

---

Konrad-Zuse-Zentrum  
für Informationstechnik Berlin

Takustraße 7  
D-14195 Berlin-Dahlem  
Germany

# Jahresbericht 2005





## VORWORT

Nach Ablauf des Jahres 2005 legt das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, kurz *Zuse-Institut Berlin*, noch kürzer *ZIB*, wie in den Vorjahren all seinen Freunden und aufmerksamen Beobachtern aus Wissenschaft, Politik und Wirtschaft seinen Bericht vor.

Im vergangenen Jahr waren wir erfolgreich tätig in Projekten aus *Anwendungsschwerpunkten* der Mathematik und Informatik – wie etwa Nanophotonik, Medikamententwurf, Therapie- und Operationsplanung, Landschaftsvisualisierung oder Bild- und Signalanalyse, Telekommunikation, Verkehrsplanung, Produktion und Logistik, Erdsystemforschung, Astro- und Teilchenphysik sowie Bioinformatik. *Methodische Schwerpunkte* waren – in der Mathematik – unter anderem adaptive Multilevel-Finite-Elemente-Methoden, Laplace-Domain-Methoden, inverse Probleme, virtuelle Labore, diskrete Strukturen, ganzzahlige Optimierung, Online-Optimierung und Nichtlineare Optimierung und optimale Steuerungen sowie – in der Informatik – Peer-to-Peer-Algorithmen für zuverlässige, adaptive Grid-Systeme.

Ein kurzer Überblick über unsere Forschungsaktivitäten ist in Kapitel 2.1 zusammengestellt, genauere Details zu den einzelnen Projektschwerpunkten finden sich in Kapitel 2.2.

Unsere *Drittmittleinnahmen* haben sich auf dem erfreulich hohen Niveau des Vorjahres gehalten, unsere Industrie-Einnahmen sind sogar wieder leicht angestiegen. Wie in den Vorjahren waren wir mit den großen Berliner Universitäten FU, HU, TU und der Charité sowie mit einer Reihe außeruniversitärer Forschungseinrichtungen in Verbundprojekten aktiv: Beispiele sind das DFG-Forschungszentrum MATHEON (wurde 2006 bis 2010 weiterbewilligt!), das BMBF-geförderte Berliner Centrum für Genombasierte Bioinformatik (*BCB*) (läuft 2006 aus, Nachfolge wird diskutiert), der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (*KOBV*, bewilligt bis 2010) sowie das landesweite Netz *BRAIN*. Darüber hinaus sind wir Mitglied in drei Graduiertenkollegs, einer DFG-Forschergruppe, einer Klinischen DFG-Forschergruppe, zwei DFG-Schwerpunktprogrammen, einem Sfb, fünf neuen BMBF-Projekten zum Grid-Computing sowie einigen EU-Projekten. Natürlich waren wir auch in Vorträge für Cluster und Graduiertenschulen im Rahmen der Exzellenzinitiative des Bundes und der Länder eingebunden. In diesem Zusammenhang erlauben wir uns, darauf hinzuweisen, daß das ZIB sich den Zielen dieser Initiative schon seit seiner Gründung verpflichtet fühlt und sie seit vielen Jahren erfolgreich umsetzt.

Die gute Nachricht für die Superuser unseres Supercomputers: Im Berichtszeitraum konnten wir die Beschaffung eines Nachfolgers des jetzigen HLRN-Rechners, mit dem Kürzel *HLRN II* bezeichnet, als verteiltes Gesamtsystem an den Standorten Berlin und Hannover erfolgreich auf den Weg bringen. Sowohl Wissenschaftsrat als auch DFG haben positiv votiert. Die Finanzierung war zunächst im Zuge der Föderalismusdiskussion unklar, ist jedoch seit April 2006 gesichert. Aller Voraussicht nach wird dieses Rechnersystem ab 2007 in einer ersten Ausbaustufe zur Verfügung stehen.

Der *Wissenschaftliche Beirat* tagte am 07./08. Juni 2005. Wie in den Vorjahren sei auch diesmal aus seinem Bericht die für uns erfreulichste Passage zitiert: Der Wissenschaftliche Beirat beobachtet „... eine von Erfolg gekrönte und von Begeisterung getragene Arbeit aller Beteiligten an wichtigen und schwierigen Projekten, bei denen die Mathematik entscheidende Beiträge liefert und für welche die gesamte Fachwelt das ZIB bewundert.“ Dem wollen wir nichts mehr hinzufügen.

Berlin, im Mai 2005

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

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

<b>1</b>	<b>Das ZIB – Struktur und Ziele</b>	<b>9</b>
<b>2</b>	<b>Forschung und Entwicklung</b>	<b>15</b>
2.1	Überblick . . . . .	15
2.2	Schwerpunkte . . . . .	26
2.2.1	Nano-Optik . . . . .	26
2.2.2	Mathematische Modellierung im Medikamentenentwurf . . . . .	34
2.2.3	Medizinische Therapie- und Operationsplanung . . . . .	44
2.2.4	Virtuelle Labore . . . . .	55
2.2.5	Geometrieverarbeitung . . . . .	62
2.2.6	Bild- und Signalanalyse . . . . .	69
2.2.7	Nichtlineare Optimierung und optimale Steuerung . . . . .	78
2.2.8	Ganzzahlige Optimierung . . . . .	81
2.2.9	Online-Optimierung . . . . .	88
2.2.10	Diskrete Strukturen . . . . .	96
2.2.11	Telekommunikation . . . . .	109
2.2.12	Verkehr . . . . .	124
2.2.13	Produktion und Logistik . . . . .	131
2.2.14	Verteilte Systeme und Anwendungen . . . . .	135
2.3	Auszeichnungen und Rufe . . . . .	153
<b>3</b>	<b>Wissenschaftliche Dienstleistungen</b>	<b>155</b>
3.1	Überblick . . . . .	155
3.2	Schwerpunkte . . . . .	159
3.2.1	Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV) . . . . .	159
3.2.2	Suchmaschinentechnologien und Math-Net . . . . .	161
3.2.3	Math&Industry – Anwendungen der Mathematik im Web . . . . .	164
3.2.4	Informationstechnische Werkzeuge für Museen . . . . .	166
3.2.5	Computeralgebra (REDUCE) . . . . .	167
<b>4</b>	<b>Supercomputing und Netze</b>	<b>171</b>
4.1	Hochleistungsrechner am ZIB . . . . .	171

4.1.1	Hochleistungsrechner Nord (HLRN) . . . . .	171
4.1.2	Der Wissenschaftliche Ausschuss – Ausgewählte Großprojekte . . . . .	175
4.2	Fachberatung . . . . .	186
4.2.1	Chemie und Bioinformatik . . . . .	188
4.2.2	Geowissenschaften . . . . .	188
4.2.3	Ingenieurwissenschaften . . . . .	189
4.2.4	Physik . . . . .	189
4.3	Berliner Wissenschaftsnetz (BRAIN) . . . . .	190
<b>5</b>	<b>Publikationen</b>	<b>195</b>
5.1	Preprints . . . . .	195
5.2	Mitherausgabe von Publikationen . . . . .	195
5.3	Beiträge in Zeitschriften und Tagungsbänden . . . . .	196
5.4	Monographien . . . . .	205
5.5	Dissertationen . . . . .	206
5.6	Examensarbeiten . . . . .	206
<b>6</b>	<b>Software</b>	<b>211</b>
6.1	Numerische Algorithmen . . . . .	211
6.2	Visualisierung . . . . .	212
6.3	Optimierung . . . . .	214
6.4	Computeralgebra . . . . .	217
6.5	Computer Science . . . . .	218
6.6	Informationsdienste . . . . .	221
6.7	KOBV-Dienste . . . . .	222
<b>7</b>	<b>Vorträge und Lehrveranstaltungen von ZIB-Mitarbeitern</b>	<b>229</b>
7.1	Vorträge und Gastaufenthalte . . . . .	229
7.2	Vorlesungen und Seminare . . . . .	253
7.3	Mitveranstalter auswärtiger Tagungen . . . . .	257
<b>8</b>	<b>Tagungen und Gäste am ZIB</b>	<b>259</b>
8.1	Gastvorträge . . . . .	259
8.2	Gastaufenthalte . . . . .	261
8.3	Tagungen und Veranstaltungen . . . . .	265
8.4	Ausstellungen und Softwaredemonstrationen . . . . .	266
8.5	Mathematik und Informatik für die Öffentlichkeit . . . . .	266



---

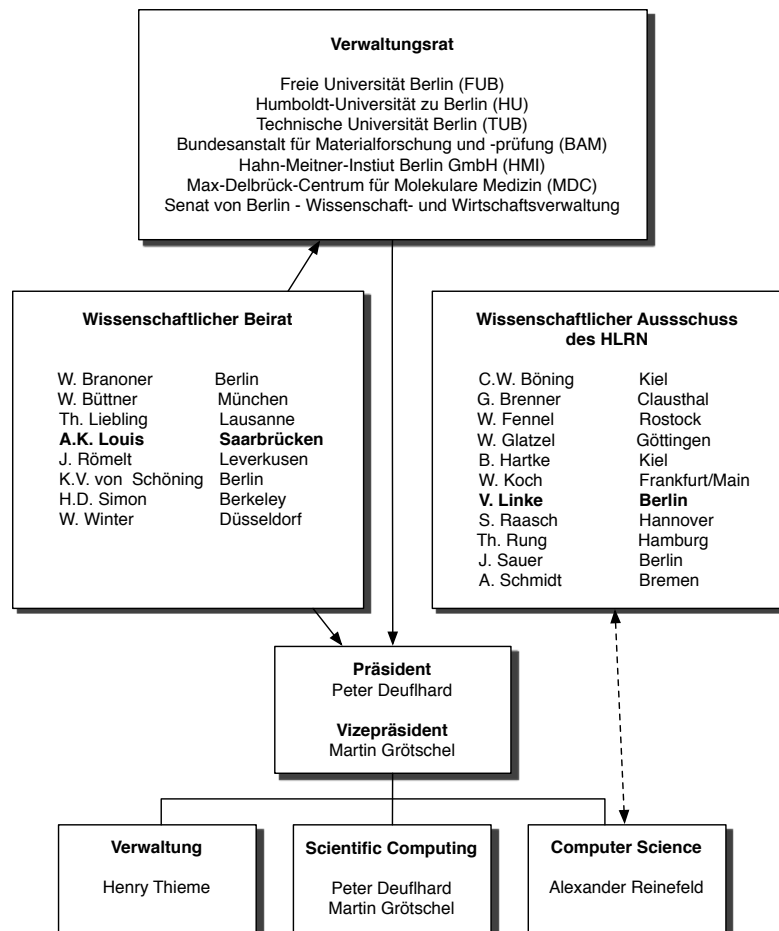
<b>9 Organisatorisches</b>	<b>273</b>
9.1 Organe . . . . .	273
9.2 Satzung . . . . .	273
9.3 Wissenschaftlicher Beirat . . . . .	274
9.4 Mitgliedschaften . . . . .	274
9.5 ZIB-Fellows . . . . .	275
9.6 Selbstverwaltung . . . . .	275
9.7 Wirtschaftliche Situation . . . . .	275
9.8 Spin-off-Firmen . . . . .	278
9.9 Personelle Entwicklung . . . . .	279
<b>10 Ansprechpartner</b>	<b>281</b>
<b>Anhang: Übersicht Preprints</b>	<b>283</b>



## KAPITEL 1

# DAS ZIB – STRUKTUR UND ZIELE

Das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin ist eine außeruniversitäre Forschungseinrichtung des Landes Berlin. Es betreibt in enger fächerübergreifender Kooperation mit den Hochschulen und wissenschaftlichen Einrichtungen in Berlin Forschung und Entwicklung auf dem Gebiet der Informationstechnik, vorzugsweise in anwendungsorientierter algorithmischer Mathematik 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 Erprobung der Algorithmen an leistungsfähigen Computersystemen und der Test der mathematischen Modelle auf ihre praktische Brauchbarkeit sollen dabei eine nachhaltige Synthese eingehen.

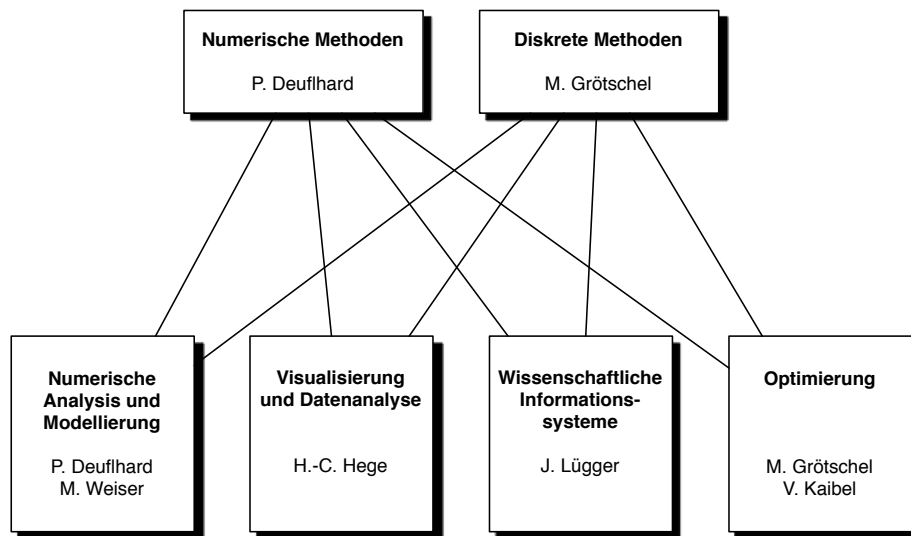
## Anwendungsbezogene Forschung, Kooperationen

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, Fahrzeugbau, Chemie-, Elektro- und Computerindustrie, Energieversorgung, Nano-Optik. Das ZIB ist zudem eine der fünf Institutionen, die das von der DFG geförderte Forschungszentrum MATHEON „Mathematik für Schlüsseltechnologien: Modellierung, Simulation und Optimierung realer Prozesse“ tragen.

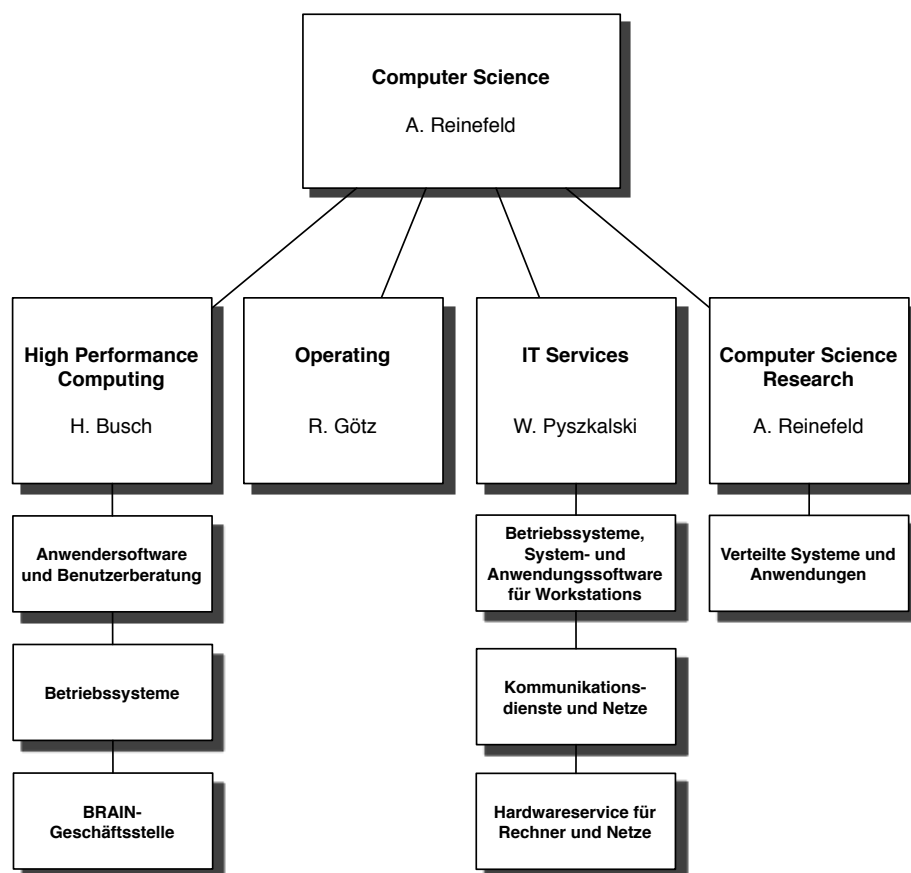
## Supercomputing als Dienstleistung

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 (siehe Kapitel 4.1). Ein identisches System ist am HLRN-Standort Hannover installiert. Diese Kapazität steht in begrenztem Umfang auch Benutzern aus den anderen Bundesländern zur Verfügung. Die Zuteilung von Rechenzeit an Großprojekte erfolgt nach wissenschaftlichen Kriterien der DFG durch einen Zulassungsausschuss. Alle befürworteten Projekte werden von einem Fachberater begleitet.

### 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 in die folgenden Arbeitsgruppen: Computational Medicine, Computational Nano-Optics, Inverse Problems in Science and Technology 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 Visualization in Science, Geometry and Visualization (bis 31.12.2005) und Medical Planning Systems. Derzeitige Hauptanwendungsgebiete sind medizinische Therapieplanung, computergestützte Chirurgie, Merkmalsextraktion bei komplexen Strömungen und Moleküldynamik. 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 sowie Transport und Logistik.

*Abteilung Wissenschaftliche Informationssysteme.* Aufgaben sind die Konzeption, die Entwicklung und die Realisierung mathematischer Informationssysteme. Beispielhaft für Internetbasierte Informationstechnologie sind die Projekte „Informationsdienste für die Mathematik im Internet (Math-Net)“ und „Informationstechnische Werkzeuge für Museen“ sowie der „Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)“.

## Gliederung des Bereiches Computer Science

*Abteilung Computer Science Research.* Im Zentrum des Forschungsinteresses liegt die Theorie und Praxis paralleler und verteilter Systeme. Profitiert wird dabei vom Zugriff auf modernste Hochleistungsrechner und Cluster, die im ZIB als Dienstleistung für die Wissenschaft betrieben werden. Die Erfahrungen aus dem Produktionsbetrieb der Parallelrechner bilden den Hintergrund für die Entwicklung zuverlässiger, skalierbarer Dienste in geographisch verteilten Systemen. Derzeit liegt der Forschungsschwerpunkt der Abteilung im Management sehr großer Datenmengen in Grid-Systemen, einer Problematik, die in unserer zunehmend vernetzten und mobilen Welt an Bedeutung gewinnt.

*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 umfasst wie bisher die beiden Abteilungen

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

<i>Computational Medicine</i>	(Leitung Martin Weiser),
<i>Computational Nano-Optics</i>	(Leitung Frank Schmidt),
<i>Inverse Problems in Science and Technology</i>	(Leitung Gerd Teschke) und
<i>Computational Drug Design</i>	(Leitung Frank Cordes) sowie
  
- *Visualization and Data Analysis*, untergliedert in die Arbeitsgruppen
 

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

Die Arbeitsgruppe *Geometry and Visualization* wechselte zum Jahresende an die Freie Universität, Fachbereich Mathematik und Informatik, an der Konrad Polthier seit 01.12.2005 die MATHEON-Professur für *Mathematische Geometrieverarbeitung* innehat. Die Arbeitsgruppe *Inverse Problems in Science and Technology* wurde am 01.10.2005 neu eingerichtet, unter Leitung von Gerd Teschke, der von der Universität Bremen zu uns kam.

Im Berichtszeitraum wurden die *methodischen* Schwerpunkte

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

- inverse Probleme und Sparseness
- 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
- Meteorologie: Rekonstruktion von Windvektorfeldern
- Nanotechnologie: Nano-Optik
- Physik: Gravitationsphysik

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

**Nano-Optik.** Dieser Schwerpunkt war auch im Berichtszeitraum wiederum äußerst erfolgreich. Die Lösungsansätze der vergangenen Jahre zur Simulation elektromagnetischer Wellenausbreitung, insbesondere in nano-optischen Bauelementen, wurden konsequent weiterverfolgt. Wie bisher wurden dabei parallel methodisch-algorithmische Fragestellungen untersucht und technologie-relevante Projekte mit Industriepartnern durchgeführt. Von den theoretischen Ergebnissen seien zwei besonders hervorgehoben: Die Entwicklung einer adaptiven Steuerung für Außenraumdiskretisierungen, die eine effiziente Simulation von Wellen auch im Falle von singulären Feldern ermöglicht, und die Erweiterung der in der Arbeitsgruppe entwickelten *Laplace-Domain-Methode* auf hyperbolische Gleichungen.

Die Arbeit im BMBF-Verbundprojekt *HiPhoCs*, in dem wir mit zwei Projekten zu photonischen Kristallen beteiligt waren, wurde erfolgreich beendet. Die laufenden Projekte zu Resonanzen in offenen Systemen (DFG-Projekt gemeinsam mit Thorsten Hohage, Universität Göttingen) und zu photonischen Kristallen (DFG-Schwerpunktprogramm) wurden fortgesetzt. Im Projekt D9 des DFG-Forschungszentrums MATHEON „Mathematik für Schlüsseltechnologien“ haben wir weiter an effektiven Methoden zur Lösung gekoppelter Innenraum-/Außenraumprobleme gearbeitet, wobei der Schwerpunkt im vergangenen Jahr auf der Entwicklung neuer sogenannter Hardyraummethoden lag. Neu hinzugekommen ist das MATHEON-Projekt D15, in dem in Kooperation mit dem DFG-Forschungszentrum „Center for Functional Nanostructures“ in Karlsruhe Algorithmen zur Erforschung künstlicher nanostrukturierter Materialien (Metamaterialien) entwickelt und angewendet werden.

Weiterhin ist es uns gelungen, zwei neue industrie-finanzierte Projekte zur Simulation von Lithographiemasken für die Halbleiterindustrie zu beginnen. Diese Arbeiten erfolgen in enger Kooperation mit der Firma Infineon und der Spin-off-Firma *JCMwave* und stellen gemeinsam mit den Simulationen zu Metamaterialien den gegenwärtigen Anwendungsschwerpunkt unserer Methoden dar.

Wie in den Vorjahren fand eine Vorlesung „Computational Photonics“ an der TU und FU statt; darüber hinaus wurden vier Diplomarbeiten betreut.

**Mathematische Modellierung im Medikamentenentwurf.** Der bisherige Schwerpunkt „Molekulare Konformationsdynamik“ wurde im Berichtszeitraum erweitert und deshalb umbenannt. Die Thematik wird in Kooperation mit der Arbeitsgruppe Ch. Schütte (FU, Mathematik) im Rahmen einer gemeinsamen Campus-Arbeitsgruppe bearbeitet, die auch ein internes

Campus-Forschungsseminar abhält. Im Berichtszeitraum wurde in der Abteilung „Numerische Analysis und Modellierung“ der Schwerpunkt auf die thermodynamische Simulation von Wirkstoffmolekülen und auf das semiflexible Docking gelegt. In der Abteilung „Visualisierung und Datenanalyse“ wurden das oberflächenbasierte semiflexible Molekülalignment und neue Methoden zur Visualisierung molekularer Zustandsmengen entwickelt.

Die Erfahrungen aus den Vorjahren haben zu der Einsicht geführt, dass thermodynamische Gewichtung und Clusterung von Molekülzuständen nicht gleichzeitig wohlkonditioniert berechnet werden können. Da das Clusterproblem bereits durch den Algorithmus ZIBgridfree recht befriedigend gelöst werden konnte, wurden im Berichtszeitraum die Simulationsmethoden genauer untersucht und schnellere Algorithmen zur Analyse des Konformationsraums entworfen. Außerdem wurde das neue Konzept einer *Konformationskinetik* verfolgt, das die Untersuchung des Übergangsverhaltens von Molekülen für unterschiedliche Zeitskalen erlaubt und nicht von Trajektorien fester Länge abhängt. Der schnellen Analyse des Konformationsraums schließt sich eine neu entwickelte Methode zum semiflexiblen Docking von Wirkstoff- und Targetmolekülen an, die im Vergleich mit Standardmethoden deutlich bessere Ergebnisse erzielte. Neben dem Docking als Werkzeug im Virtuellen Screening wurde auch der paarweise oberflächenorientierte Vergleich von Molekülen zur Identifizierung von möglichen Wirkstoffen weiterentwickelt. Dieser Algorithmus basiert ebenfalls auf einer schnellen Analyse des Konformationsraums. Um sich ein Bild der möglichen Zustände eines Biomoleküls zu machen, wurde die Visualisierung molekularer Zustandsmengen mit Hilfe von partiellen Alignments deutlich verbessert (Kooperation mit der Arbeitsgruppe Prömel/Hougardy, HU).

Die Thematik geht teilweise ein in Projekt A4 des DFG-Forschungszentrums MATHEON „Mathematik für Schlüsseltechnologien“. Ein Teil der Arbeiten wurde zudem im BMBF-Verbundprojekt „Berliner Centrum für Genombasierte Bioinformatik“ (BCB) durch eine Nachwuchsgruppe (Frank Cordes) gefördert; das dort angesiedelte Projekt „Konformationsdatenbanken für das Virtuelle Screening“ ist mit der Verbesserung zum Docking und zur Konformationsanalyse jetzt international konkurrenzfähig und wurde für den semiflexiblen Fall erfolgreich zu einem vorläufigen Abschluss gebracht. Darüber hinaus bilden Mitglieder der ZIB-Arbeitsgruppe Bachelor- und Master-Studierende des Studiengangs Bioinformatik an der FU aus.

Außerdem wurde die mathematische Modellierung in der gynäkologischen Endokrinologie aufgenommen, mit dem Fernziel, medikamentös auf den weiblichen Hormonzyklus einwirken zu können.

**Medizinische Therapie- und Operationsplanung.** Im Berichtszeitraum wurde diese Thematik sowohl in der Arbeitsgruppe *Computational Medicine*, hier mit den Schwerpunkten mathematische Modellierung und numerische Simulation, als auch in der Arbeitsgruppe *Medical Planning Systems* behandelt, dort mit den Schwerpunkten geometrische Modellierung, Interaktion und Visualisierung.

Im Projekt A1 des DFG-Forschungszentrums MATHEON wurde insbesondere auf die Online-Regelung und Nachoptimierung der Hyperthermie hingearbeitet. Dazu gehört die Identifizierung von Perfusion und Temperatur, aber auch der thermisch wirksamen Anteile der Antennen-Basisfelder aus verfügbaren MR-Daten. Insbesondere letzterer Ansatz, der in enger Kooperation mit Peter Wust (Charité, Campus Virchow-Klinikum) verfolgt wird, zeigt überraschend gute Resultate. Im Projekt A2 konnte in enger Kooperation mit der Arbeitsgruppe Kornhuber (FU Berlin) und Krause (Universität Bonn) eine Modifikation des verbreiteten

Newmark-Verfahrens erarbeitet werden, die bei der Zeitintegration dynamischer Kontaktprobleme deutliche Stabilitätsvorteile aufweist. Dual zu A2 sind die Teilprojekte TP 7 und TP 12 der klinischen DFG-Forschergruppe *Biomechanik und Biologie der Knochenheilung: Individuelle, beanspruchungsgerechte Osteosynthese* (Charité, Berlin), die gemäß der Gutachterempfehlung in eine SFB-Struktur überführt werden soll. Die Simulation der elektrischen Anregung des Herzmuskels mit dem adaptiven Multilevel-FE-Paket KARDOS konnte erfolgreich fortgeführt werden, wobei der Schwerpunkt auf der Behandlung größerer und realistischer Geometrien lag.

Im Bereich der computergestützten Chirurgie wurden zum einen die Arbeitsschritte zur Rekonstruktion individueller anatomischer 3D-Modelle verbessert, zum anderen neue klinische Anwendungsgebiete erschlossen. Zur schnelleren Segmentierung tomografischer Bilddaten soll verstärkt statistisches Formwissen eingesetzt werden. In Kooperation mit dem MATHEON-Projekt F2 wurden Formmodelle einzelner anatomischer Regionen (Schädelkalotte, Unterkiefer, Augenhöhlen) aus tomografischen Datensätzen erstellt, mit dem Ziel, diese in einem statistischen 3D-Modell des gesamten Kopfes zusammenzuführen.

Zur Planung von Knochenschnitten wie auch zur Flächenzerlegung wurde ein allgemein nutzbares Verfahren zur interaktiven Spezifikation von Pfaden auf triangulierten Oberflächen implementiert, das auch in anderen Problemstellungen des CAGD (Computer Aided Geometric Design) Anwendung finden kann. Für die Abschätzung der Weichgewebeerlagerung im Rahmen der Planung von Knochenverlagerungen wurden Konzepte zur interaktiven Deformationssimulation auf Basis sogenannter Tensor-Massen-Modelle (hyperelastische Tetraederelemente) erarbeitet. Damit sollten sich interaktive Knochenverlagerungen hinsichtlich der resultierenden Weichgewebeanordnung *direkt* bewerten lassen. Des Weiteren ermöglicht die lose Kopplung der Randflächen (Knochen/Weichgewebe) eine Spezifikation von konsistenten Randbedingungen für die FE-Simulation der Weichgewebedeformation. Zudem wurden neue Modellierungsansätze aus der nichtlinearen Elastomechanik untersucht und implementiert.

Bei den klinischen Anwendungen erfolgte ein erster Einsatz eines statistischen Formmodells zur Planung und Durchführung einer chirurgischen Rekonstruktion eines fehlgebildeten Kinderschädels. Bei der computergestützten Planung von Eingriffen in der onkologischen Leberchirurgie lag der Schwerpunkt auf der Gefäßrekonstruktion und dem intraoperativen Abgleich der Leberbewegung mit dem Planungsmodell. Für die Erstellung eines statistischen Modells der menschlichen Augenhöhle sowie die Planung rhinochirurgischer Eingriffe unter Berücksichtigung der Atemwegsgeometrie konnte eine externe Finanzierung zweier studentischer Hilfskräfte eingeworben werden. Weiterhin wurde im Berichtszeitraum ein EU-Projekt zur Planung eines optimalen endoprothetischen Gelenkersatzes für die chirurgische Orthopädie erfolgreich eingeworben.

**Virtuelle Labore.** Neben den oben erwähnten medizinischen Planungssystemen sowie dem virtuellen Labor zur Analyse von Biomolekülen werden am ZIB weitere Analyse-Umgebungen zur integrierten Datenanalyse und Visualisierung entwickelt.

Das *Strömungslabor* wurde im Rahmen des SFB 557 „Beeinflussung komplexer turbulenter Scherströmungen“ mehrfach erweitert: So wurden die Werkzeuge zur topologischen Analyse von Strömungsfeldern komplettiert, „Out-of-Core“-Verfahren zur Analyse auch sehr großer Datensätze entwickelt und die Verfahren zur Wirbelextraktion auf zeitabhängige Daten ausgedehnt. Im Rahmen des neu gestarteten Projektes (VIRTUE, VIRTual Tank Utility in Europe) im Bereich des Schiffsbaus, bei dem das ZIB für die Visualisierungskomponente verantwort-

lich ist, wurde die Praxistauglichkeit des Strömungslabors verbessert, unter anderem durch Entwicklung von besser skalierenden Verfahren und die Unterstützung weiterer Gittertypen.

Bei der Arbeit an dem virtuellen *Astrophysik-Labor* wurden die Verfahren zur Darstellung von skalaren, vektoriellen und tensoriellen zeitabhängigen Feldern – zum Teil auf hierarchischen, lokal verfeinerten (AMR-)Gittern mit veränderlicher Gittertopologie – weiterentwickelt. Neue Methoden für entfernten Datenzugriff erlauben es nun, auch auf die in Supercomputern berechneten Rohdaten direkt zuzugreifen.

Um die Entwicklung des virtuellen *Neurolabors* weiterführen zu können, wurden Vorarbeiten für eine neu zu etablierende überregionale Forschergruppe „Digitale Neuroanatomie“ durchgeführt und ein Antrag bei der DFG gestellt. Dieser wurde zwar nicht als Ganzes bewilligt, doch erhält eine Kerngruppe, zu der auch das ZIB zählt, die beantragte Förderung. Schwerpunkt der Arbeiten am ZIB ist die Entwicklung von Verfahren zur Rekonstruktion und Repräsentation von hierarchischen anatomischen Modellen. Im Zusammenhang mit dem am ZIB durchgeführten Workshop „Virtuelle Labore in der Neurobiologie“ begannen wir eine Kooperation mit dem Max-Planck-Institut für medizinische Forschung (Bert Sakmann, Heidelberg) zu Fragen der Signalvermittlung im zentralen Nervensystem von Säugetieren.

Im Bereich der *Landschaftsvisualisierung* wurde das System zur interaktiven Darstellung von bewachsenen 3D-Landschaften deutlich weiterentwickelt und u. a. um Methoden zum skizzenhaften Rendering ergänzt. Das von der DBU geförderte Forschungsprojekt Lenné3D wurde erfolgreich abgeschlossen und eine Spin-off-Firma gleichen Namens gegründet. Diese bietet Dienstleistungen und Software für die Modellierung und Visualisierung von Vegetation in ländlichen und urbanen Landschaften an. Neu entwickelte Verfahren zur schnellen Berechnung von realitätsnahen Beleuchtungsmodellen finden in einem Nachfolgeprojekt Anwendung (Silvisio, BMBF), in dem insbesondere Waldlandschaften interaktiv darzustellen sind.

**Geometrieverarbeitung.** Im Berichtszeitraum untersuchte die Arbeitsgruppe „Geometry and Visualization“ differentialgeometrische Probleme zur Analyse und Optimierung von industriellen Oberflächen und Formen. Schwerpunkte waren geometrische Variationsprobleme zur Berechnung und Modellierung von hochqualitativen Flächen im Computer Aided Design (CAD) und der Bereich Geometry Processing in der Computergraphik.

Zum einen wurden die mathematischen Grundlagen weiterentwickelt und Konvergenzaussagen hergeleitet, zum anderen wurden die Kooperationen mit Industriepartnern kontinuierlich verstärkt und ausgebaut: Die im Jahr 2004 begonnene Kooperation mit der Tebis AG hat zu ersten Publikationen geführt; die Neuentwicklung des FreeLence-Algorithmus zur Geometrie-kompression wurde bei der Firma mental images GmbH von Mitarbeitern der Gruppe implementiert; eine neue Kooperation mit der Firma SciFace GmbH, Paderborn, wurde im Rahmen des Computer-Algebra-Systems MuPAD durchgeführt.

Im DFG-Forschungszentrum MATHEON wurden in den beiden Teilprojekten F1 „Discrete Differential Geometry“ und F4 „Geometric Shape Optimization“ theoretische Grundlagen zur diskreten Differentialgeometrie entwickelt und in industriell verwendbare Algorithmen umgesetzt. Hinzugekommen ist eine Beteiligung am neuen Projekt F6 „Multilevel Methods for Manifold Meshes“ (seit 01.05.2005), das seit dem 01.01.2006 von mental images an der FU Berlin mit einer vollen Mitarbeiterstelle (BAT IIa) finanziert wird.

Unter Verwendung der Geometrie- und Visualisierungssoftware JavaView wurde die Integration mit führenden Computeralgebrasystemen (Mathematica, Maple) intensiviert. JavaViewLib wird in der neuen Version 3.22 von Maplesoft als Research Powertool angeboten (lange Zeit

„Top-rated No. 1“). Im Rahmen des Stabilitätspaktes für Südosteuropa (Belgrad, Budapest, Sofia, u. a.) wurde Software für elektronische Lehrmaterialien entwickelt. Der durch Unterstützung des ZIB entwickelte mathematische Videofilm MESH gewann mehrere internationale Preise.

Die Vorlesung „Einführung in Scientific Visualization“ wurde als gemeinsame Veranstaltung an TU Berlin und FU Berlin gelesen. Es wurden fünf Diplomarbeiten (zwei davon bereits abgeschlossen) und fünf Dissertationen betreut.

**Bild- und Signalanalyse.** Die seit Ende des Jahres am ZIB eingerichtete Arbeitsgruppe *Inverse Problems in Science and Technology*, die von G. Teschke geleitet wird, beschäftigte sich mit schlechtgestellten inversen Problemen, die ihren Ursprung hauptsächlich im Bereich der medizinischen und meteorologischen/geologischen Signal- und Bildverarbeitung haben. Der wissenschaftliche Fokus im Jahr 2005 lag in der Entwicklung von iterativen Verfahren zur Lösung von Operatorgleichungen unter gemischten Sparsity- und Glattheitsnebenbedingungen. Dabei war ein Schwerpunkt die Konstruktion und Auswahl geeigneter Funktionenräume auf Grundlage der Frametheorie. Bestehende Forschungsk Kooperationen z. B. mit Ingrid Daubechies (Princeton University), Stephan Dahlke (Universität Marburg), Luminata Vese (UCLA), Ronny Ramlau (RICAM Linz) wurden weiter ausgebaut und führten zu neuen fruchtbaren Ergebnissen.

Die Forschung dieser Arbeitsgruppe wird durch DFG-Einzelprojekte gefördert. Die Brücke zu den Anwendungen wird geschlagen durch schon seit längerer Zeit bestehende Kooperationen mit der Universität Tübingen (MEG Zentrum) im Bereich der pränatalen Diagnostik, der SELEX Sistemi Integrati GmbH (ehemals AMS Gematronik GmbH) in Neuss im Bereich der Inversion von Radargleichungen, dem Deutschen Wetterdienst im Bereich der Windvektorfeldrekonstruktion und der Universität Basel im Bereich der Konstruktion/Beschleunigung von Support Vector- und Lernmaschinen zur Echtzeit-Mustererkennung in Filmsequenzen. Gemeinsam mit der Universität Potsdam (Matthias Holschneider) wurde ein regionales Seminar „Image and Data Processing“ etabliert.

In der Arbeitsgruppe *Visualisierung in den Naturwissenschaften* wurde ein neues Verfahren entwickelt, mit dem sich aus wenigen 2D-Röntgenbildern ein 3D-Modell eines Knochens rekonstruieren lässt. Dazu werden die Parameter eines statistischen Formmodells an die Individualdaten angepasst, indem ein Distanzmaß zwischen simulierten und realen Röntgenprojektionen minimiert wird. Das Verfahren wurde am Beispiel der Rekonstruktion von Beckenknochen erprobt. Das Forschungsprojekt zur Analyse der Feinstruktur von Knochen und deren Veränderung unter Mikrogravitationsbedingungen wurde erfolgreich abgeschlossen. Für ein Folgeprojekt, das inzwischen wissenschaftlich sehr gut beurteilt worden ist, wurden prototypische Verfahren entwickelt, mit denen sich Mikrofrakturen in Wirbelkörpern detektieren lassen. Hierzu werden  $\mu$ CT-Aufnahmen vor und nach einem Belastungstest starr registriert.

Im Rahmen des Projektes zur Rekonstruktion von 3D-Pflanzenmodellen aus hochaufgelösten Serienschnitten wurden schnelle Verfahren zur elastischen Registrierung von Bildstapeln entwickelt. Damit lassen sich die durch Schneide- und Glättungsprozesse entstandenen nichtlinearen Verzerrungen der Schnitte in guter Näherung beheben.

**Nichtlineare Optimierung und optimale Steuerung.** Diese Thematik wird sowohl in der Abteilung „Numerische Analysis und Modellierung“ als auch in der Abteilung „Optimierung“ behandelt. Sie stellt damit eines der wenigen Brückenprojekte der großen Bereiche „Numerische Methoden“ und „Diskrete Methoden“ dar.

In der Abteilung *Numerische Analysis und Modellierung* kam die Entwicklung adaptiver Multilevel-Methoden zur Behandlung steuerungsbeschränkter Optimalsteuerungsprobleme mit partiellen Differentialgleichungen weitgehend zum Abschluss. Insbesondere die im Rahmen des DFG-Forschungszentrums MATHEON „*Mathematik für Schlüsseltechnologien*“ (Projekt A1) entwickelten steuerungsreduzierten Algorithmen führen zu geringen Diskretisierungsfehlern bei gleichzeitig superlinearer Konvergenz. Der Focus verschob sich daher zunehmend auf zustandsbeschränkte Probleme mit verteilter oder diskreter Steuerung.

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 optimale Steuerung
- Ganzzahlige Optimierung
- Online-Optimierung
- Diskrete Strukturen
- Telekommunikation
- Verkehr
- Produktion und Logistik

*Wissenschaftliche Informationssysteme*

- Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV)
- Suchmaschinentechnologien und Math-Net
- Math&Industry
- Informationstechnische Werkzeuge für Museen
- Computeralgebra (REDUCE)

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.

Dieses Spektrum unserer Arbeit spiegelt sich in der Strukturierung in die drei methodisch definierten Schwerpunkte *Nichtlineare Optimierung und optimale Steuerung* (der als abteilungsübergreifender Schwerpunkt Ausgangspunkt der Ausnutzung von Synergien verschiedener Bereiche im Haus ist), *Ganzzahlige Optimierung* und *Online-Optimierung*, in die drei Anwendungsschwerpunkte *Telekommunikation*, *Verkehr* und *Produktion und Logistik*, sowie in den Grundlagen-Schwerpunkt *Diskrete Strukturen* wieder. Den Schwerpunkt *Produktion und Logistik* haben wir im Jahr 2005 neu eingeführt, um unsere Aktivitäten in diesem Bereich über die methodisch in der Online-Optimierung angesiedelten Projekte hinaus zu erweitern.

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* (zum Ende des Berichtszeitraums ausgelaufen) und *Stochastische Modellierung und quantitative Analyse großer Systeme in den Ingenieurwissenschaften (MAGSI)*, mehrere BMBF- und EU-Programme, sowie natürlich das DFG-Forschungszentrum MATHEON dokumentiert. Im Wettbewerb der Teilprojekt-Anträge für die anstehende zweite Förderperiode des MATHEON ist es uns gelungen, zwei neue Projekte zu etablieren (*Chip design verification with constraint integer programming* und *Symmetries in integer programming*).

Bei dem zweiwöchigen Workshop „Combinatorial Optimization at Work“ haben wir Studenten und Kollegen im vergangenen Jahr die in der Abteilung praktizierte Art der wissenschaftlichen Arbeit anhand konkreter Fallstudien von Industrieprojekten umfassend präsentiert. Die Resonanz war mit mehr als 100 Teilnehmern (davon über 50 von außerhalb Berlins) überwältigend. Wir werden im Jahr 2006 solche Workshops außerhalb Berlins wiederholen, einen davon in Peking.

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 optimale 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. In dem z. B. im Hinblick auf Hyperthermieplanung durchgeführten Projekt über funktionenraumbasierte Innere-Punkte-Methoden wurden unter anderem superlineare Konvergenzresultate für die steuerungsreduzierte Innere-Punkte-Methode erzielt. Im Projekt zur Betriebsoptimierung der Berliner Trinkwasserversorgung wurde im Berichtsjahr das in den vorangegangenen Jahren entwickelte Optimierungsmodul in das Betriebsleitsystem der Berliner Wasserbetriebe integriert, wo es nun für die Tagesplanung eingesetzt wird.

**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 die Integration von Methoden des Constraint Programming in Lösungsverfahren für gemischt-ganzzahlige Programme (in der Software SCIP). Die entwickelten Methoden erweisen sich in einem gemeinsamen Projekt mit Infineon (gefördert durch das BMBF) zur Validierung von System-on-Chip-Entwürfen als sehr wertvoll. Wir verstärken unsere Aktivität in diesem Bereich weiter, u. a. mit einem neuen MATHEON-Projekt. Neben der Weiterentwicklung der in SCIP implementierten Schnittebenen und Branchingregeln haben wir im Berichtszeitraum ein Projekt gestartet, in dem wir uns mit der Entwicklung von Methoden zum Lösen hochgradig symmetrischer Modelle beschäftigen. Dies wird ebenfalls demnächst in einem neuen MATHEON-Projekt gefördert. 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 weiteren



Projekten beschäftigen wir uns mit der kombinatorischen Struktur von Verallgemeinerungen verschiedener 0/1-Probleme, mit dem Ziel, die praktische Lösbarkeit von ganzzahligen Programmen mit nicht-binären Variablen zu verbessern, sowie mit Algorithmen zum Auffinden von minimal unzulässigen Teilsystemen von unlösbaren Ungleichungssystemen.

**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 beispielsweise 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. Im Berichtszeitraum haben wir an verschiedenen grundlegenden Fragen in der Theorie der Online-Optimierung gearbeitet, die größtenteils aus Praxisprojekten wie der Steuerung von Lastaufzugssystemen in Versandlagern oder der Einsatzplanung von Kundendiensten hervorgegangen sind. Themen sind hier z. B. die Frage nach der Entwicklung geeigneter Gütemaße für Online-Algorithmen, die die Schwächen der klassischen kompetitiven Analyse überwinden (im Rahmen eines Projekts der DFG-Forschergruppe *Algorithmen, Struktur, Zufall*), und die Untersuchung von Reoptimierungsalgorithmen, die bereits getroffene Entscheidungen unter gewissen Bedingungen revidieren. Außerdem wurden die Arbeiten zur Politik-Evaluierung mittels der approximativen Lösung von Markov-Entscheidungsproblemen weiter getrieben (MATHEON-Projekt). Unser langjähriges Projekt mit dem ADAC, in dem wir Methoden zur Einsatzplanung der Pannenhilfsfahrzeuge („Gelbe Engel“) entwickelt und zum Einsatz gebracht haben, ist im Berichtszeitraum erfolgreich abgeschlossen worden.

**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. Im Jahr 2005 haben wir die Palette der behandelten Themen um allgemeine 0/1-Polytope (Projekt im Rahmen der DFG-Forschergruppe *Algorithmen, Struktur, Zufall*), randomisierte Netzwerkalgorithmen (MATHEON-Projekt), kardinalitätsbeschränkte Kreise und Wege sowie Branch-and-Cut-Algorithmen zur Bestimmung von optimalen Morse-Matchings in der kombinatorischen Topologie erweitert. Fortgeführt wurden die Arbeiten über perfekte Graphen mit Ergebnissen zu verschiedenen Imperfektheitsmaßen und die Entwicklung von Algorithmen zur Berechnung der Baumweite von Graphen. Wie in der Vergangenheit haben wir auch 2005 besonderes Gewicht auf die Vermittlung diskreter Mathematik nach außen gelegt. Hauptaktivitäten waren hier der oben erwähnte Workshop „Combinatorial Optimization at Work“ (mit einem zugehörigen Buchprojekt im Rahmen des MATHEON) und die Fertigstellung des Schul-Buchprojekts *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, 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 auf diesem Gebiet mit

verschiedenen industriellen Partnern sehr erfolgreich zusammen. Wir decken dabei ein großes Spektrum ab, das von der Planung von UMTS- und Backbone-Netzen über die Entwicklung von Kommunikationsprotokollen für den Internetverkehr bis hin zur Untersuchung der Mechanismen von Märkten reicht, in denen Telekommunikation von besonderer Bedeutung ist (z. B. dezentrale Energieversorgung). Die Projekte in diesem Schwerpunkt sind sehr stark in der Praxis verankert. Im Berichtszeitraum haben wir etwa an der Optimierung der logischen Struktur des neuen Wissenschaftsnetzes X-WiN gearbeitet, und der DFN-Verein benutzte von uns entwickelte Verfahren zur wirtschaftlichen Bewertung der im Rahmen einer Ausschreibung angebotenen Trassen. Neben der in diesem Schwerpunkt sehr guten öffentlichen Drittmittelförderung (MATHEON-Projekte, DFG-Graduiertenkolleg MAGSI, BMBF-Programm *Eibone*, EU-Programme) deutet sich mittlerweile auch wieder eine leichte Verbesserung im Bereich der industriellen Förderung an. Mit der Entwicklung einer neuen Bibliothek SNDlib, in der umfangreiche Daten zu Fest- und Funknetzplanung bereit gestellt und gepflegt werden, haben wir unsere Aktivitäten im Bereich des wissenschaftlichen Service über die schon vorhandenen Angebote wie das FAP-Web hinaus erweitert.

**Verkehr** Der Schwerpunkt Verkehr umfasst Projekte im öffentlichen Personennahverkehr, in der Einsatzplanung von Fluggesellschaften sowie der Auktionierung von Trassen für den Bahnverkehr. Methodisch zentral ist in diesem Schwerpunkt das Projekt *Integrierte Umlauf- und Dienstplanung im ÖPNV* (und seine Vorgängerprojekte). Unser in den vergangenen Jahren entwickeltes Optimierungstool IS-OPT wurde im Berichtszeitraum in das Planungssystem MICROBUS der Firma IVU Traffic Technologies AG eingebaut. In den durchgeführten Tests zeigte sich, dass unser System vor allem im Regionalverkehr deutliche Verbesserungen erzielen kann. Die im Rahmen dieses Projekts erworbene Kompetenz setzen wir auch in Zusammenarbeit mit der Lufthansa Systems Berlin GmbH im Projekt *Airline Crew Scheduling* ein. Von der mathematischen Methodik her spielen hier Spaltengenerierungsverfahren eine herausragende Rolle. Unsere Erfahrungen in diesem Bereich sind ebenfalls sehr wertvoll für den Aspekt der Linienplanung im Projekt *Strategische Planung im Öffentlichen Nahverkehr* (MATHEON-Projekt). In diesem Projekt haben wir im Berichtszeitraum außerdem an der Weiterentwicklung unserer nichtlinearen Modelle für die Preisplanung gearbeitet. Im Projekt *Trassenbörse* geht es um die Untersuchung von Auktionen zur Vergabe von Eisenbahntrassen. Ein Schwerpunkt unserer Arbeit im Berichtszeitraum war dabei die Entwicklung eines spezialisierten Branch-and-Cut-Algorithmus für das Trassenallokationsproblem, welches in jeder Runde einer solchen Auktion gelöst werden muss.

**Produktion und Logistik** In den vergangenen Jahren haben wir schon zahlreiche Projekte in diesem Bereich durchgeführt, die wegen der speziellen Charakteristika der Aufgabenstellungen dem Schwerpunkt Online-Algorithmen zugeordnet wurden. Da wir unsere Aktivitäten im Bereich der Logistik und der Produktion derzeit über solche Online-Probleme hinaus verstärken, haben wir diesen neuen Schwerpunkt eingeführt. Er umfasst das schon in den vergangenen Jahren existierende Projekt *Validierung von System-on-Chip-Entwürfen* (das bisher aus methodischen Gründen im Schwerpunkt *Ganzzahlige Optimierung* aufgeführt war) sowie neue Projekte zur Auslastung von Laserquellen an Roboterschweißstationen (gemeinsam mit der Volkswagen AG) und zur Optimierung der Betriebsabläufe des Container-Terminals im Hafen „Botany Bay“ in Sydney, Australien.

Der Bereich **Computer Science** umfasst die vier Abteilungen *High Performance Computing*,

*IT Services, Operating* und *Computer Science Research*. Während die ersten drei überwiegend wissenschaftliche Dienstleistungen im Umfeld des Höchstleistungsrechnens anbieten, bearbeitet die vierte Abteilung eigene Forschungsthemen. Das Spektrum reicht von der Entwicklung systemnaher Software z. B. für parallele FPGA-Rechnersysteme<sup>1</sup> bis zum Entwurf neuer Algorithmen für den kooperativen Einsatz geographisch verteilter Ressourcen. Auf den untersten Softwareschichten aufbauend werden höherwertige Dienste entwickelt, die den effizienten, benutzerfreundlichen Einsatz paralleler und verteilter Systeme ermöglichen, was die Systemkosten deutlich reduziert. In den heutigen vernetzten Systemumgebungen sind Methoden zur selbständigen Fehlerbehebung und Software-Rekonfiguration von zentraler Bedeutung, da der überwiegende Anteil der Betriebskosten nicht auf Hard- und Software, sondern auf Löhne und Gehälter des Betriebs- und Wartungspersonals entfällt, wie eine neuere Studie gezeigt hat.

**Verteilte Systeme und Anwendungen.** Die Theorie und Praxis paralleler und verteilter Systeme liegt im Zentrum unseres Forschungsinteresses. Ausgehend von den 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, das heißt, es können beliebig viele Nutzer gleichzeitig bedient werden. Da jeder neu hinzukommende Knoten in der Regel auch als Dienstleister fungiert, besteht ein hoher Grad an Ausfallsicherheit – sofern die verteilte Systemsoftware entsprechend konzipiert wurde. Auch die selbständige Re-Konfiguration (z. B. bei Komponentenausfällen) wird durch den Einsatz von Peer-to-Peer-Techniken ermöglicht.

Seit einigen 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-Ansätzen, skalierbare Software zur sicheren und effizienten Speicherung attributierter Dateien in verteilten Systemen. Der Zugriff auf diese Dateien geschieht nicht über ihren Namen und Speicherort, sondern über Attribut/Wertpaare, die der Nutzer frei wählen kann. Mehrere Doktoranden, Diplomanden und Studenten arbeiten an dieser Thematik mit dem Ziel, eine Software zur Verwaltung von Millionen Dateien im Grid zu entwickeln. Da die Speicher-knoten 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.

Neben den genannten inhaltlich/methodischen Schwerpunkten haben wir im Berichtszeitraum die EU-Projekte CoreGrid und GridCoord fortgeführt sowie mehrere neue BMBF-Projekte gestartet, die sich mit verschiedenen Aspekten des verteilten Rechnens und Speicherns von Daten beschäftigen.

---

<sup>1</sup>FPGA = field programmable gate array

## 2.2 Schwerpunkte

### 2.2.1 Nano-Optik

Im Schwerpunkt *Nano-Optik* haben wir die in den Vorjahren entwickelten Ansätze zur Lösung industrierelevanter Probleme konsequent weiterverfolgt. Durch die Beteiligung im Anwendungsbereich „Elektronische Schaltkreise und optische Technologien“ des DFG-Forschungszentrums MATHEON „Mathematik für Schlüsseltechnologien“ und die gleichzeitige Konzentration auf Projekte aus der Industrie sind wir in der sehr günstigen Lage, 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 Simulation von Lithographiemasken für die Halbleiterindustrie wird die von uns entwickelte Software zum Entwurf und zur Optimierung eingesetzt. Für Industriepartner bietet das ZIB-Spin-off-Unternehmen JCMwave GmbH auf den jeweiligen Einsatzbereich zugeschnittene kommerzielle Softwarelösungen an.

#### Design von Phasenmasken für die Halbleitertechnik

**Bearbeitet von:** Frank Schmidt, Sven Burger, Benjamin Kettner, Roland Klose, Jan Pomplun, Achim Schädle, Lin Zschiedrich

**Kooperationspartner:** Reinhard März, Infineon Technologies AG und JCMwave GmbH; Roderick Köhle, Infineon Technologies AG, Christoph Nölscher, Infineon Technologies AG

**Förderung:** JCMwave GmbH, DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt D9

Die Strukturübertragung mittels Photolithographie ist der teuerste Prozess-Schritt in der Halbleiterherstellung und damit eine entscheidende Herausforderung in der auf Steigerung der Integrationsdichte abzielenden Halbleitertechnik. Die benötigte optische Qualität bei photolithographischen Verfahren liegt an der Grenze der derzeitigen technischen Machbarkeit. Genaue und zuverlässige numerische Simulationsverfahren sind somit von entscheidender Bedeutung.

Im Berichtszeitraum wurden zwei Projekte zur Simulation von DUV- und EUV-Phasenmasken von Infineon an JCMwave/ZIB vergeben. Die Vergabe dieser Aufträge erfolgte, nachdem sich das Softwarepaket JCMharmony gegenüber namhaften Mitbewerbern bei einem von Infineon vorgegebenen Benchmarktest durchgesetzt hatte [3]. In diesem Test wurde die Lichtstreuung einer ebenen Welle an einer zweidimensionalen Phasenmaske berechnet. Konkurrenten waren zwei am Markt etablierte Programme, *SOLID E* und *Delight*. *SOLID E* ist ein Finite-Difference-Time-Domain-Löser; *Delight* beruht auf einer Wellenleitermethode. Im Benchmarktest wurde für jede Methode der Fehler gegenüber einer sehr genauen Referenzlösung bestimmt. Abbildung 2.1 zeigt den relativen Fehler gegenüber der normalisierten Rechenzeit für jede Methode. JCMharmony zeigt sich bezüglich der Konvergenzgeschwindigkeit den Konkurrenten deutlich überlegen.

Das Programmpaket JCMharmony beruht auf einer Finite-Elemente-Methode im Frequenzbereich mit finiten Elementen höherer Ordnung, adaptiver Gitterverfeinerung und transparenten Randbedingungen nach einer modifizierten Perfectly-matched-Layer (PML)-Methode. Für das zweidimensionale Testbeispiel wurde ein Sparse-LU-Gleichungssystemlöser verwendet (PARDISO). Bei dreidimensionalen Problemen wird ein Mehrgitterlöser eingesetzt.

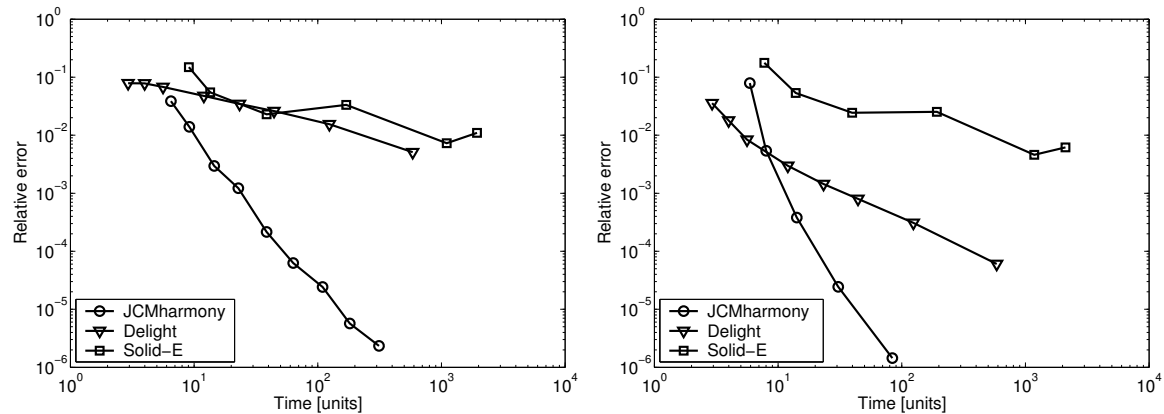


ABBILDUNG 2.1: Benchmark: Relativer Fehler des 0-ten komplexen Fourierkoeffizienten gegenüber der normalisierten Rechenzeit für TM-Polarisation (links) und TE-Polarisation (rechts). Resultate mit JCMharmony (○), *Delight* (▽) und *SOLID E* (□).

Weiterhin konnte im Berichtszeitraum die schnelle und zuverlässige Simulation dreidimensionaler realer Phasenmasken demonstriert werden. Abbildung 2.2 zeigt das Ergebnis einer mit JCMharmony durchgeführten Finite-Elemente-Berechnung des elektrischen Feldes in einer vom Kooperationspartner vorgegebenen Phasenmaske. Die algorithmische Weiterentwicklung im Berichtszeitraum konzentrierte sich auf die Automatisierung der Einstellungen für genauigkeitsrelevante Parameter. Der im Verfahren zu kontrollierende Diskretisierungsfehler hängt vor allem von der Wahl des Finite-Elemente-Gitters, der PML-Schichtdicke und der PML-Diskretisierung ab. Es wurde eine adaptive PML-Steuerung entwickelt, die eine automatische und robuste Wahl der PML-Parameter ermöglicht. Zusammen mit einem A-posteriori-Fehlerschätzer mit adaptiver Gittersteuerung für das Innenraumproblem liefert JCMharmony somit Ergebnisse mit benutzerdefinierter Genauigkeit.

### Simulation optischer Metamaterialien

**Bearbeitet von:** Sven Burger, Roland Klose, Frank Schmidt, Achim Schädle, Lin Zschiedrich  
**Kooperationspartner:** Martin Wegener, DFG-Forschungszentrum für funktionelle Nanostrukturen, Karlsruhe; Costas M. Soukoulis, Ames Laboratories, Iowa State University, USA  
**Förderung:** DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekte D9, D15

Optische Metamaterialien sind künstlich hergestellte Strukturen, die Eigenschaften besitzen, die in der Natur nicht vorkommen. Optische Metamaterialien bestehen typischerweise aus periodisch angeordneten Metallstrukturen, die in andere Medien eingebettet sind. Die Periodizitätslängen und alle anderen Abmessungen der Struktur sind dabei wesentlich kleiner als optische Wellenlängen. Ein Ziel der internationalen Metamaterial-Forschung ist die Herstellung eines Materials mit negativem Brechungsindex für die Optik. Anwendungen dafür liegen beispielsweise in Abbildungssystemen, die das klassische Beugungslimit umgehen können. Ein negativer Brechungsindex kann erreicht werden, wenn sowohl die elektrische Permittivität als auch die magnetische Permeabilität eines Materials negativ sind.

Das DFG-Forschungszentrum für funktionelle Nanostrukturen in Karlsruhe, CFN, ist weltweit führend in der Herstellung und experimentellen Untersuchung optischer Metamaterialien. In Kooperation mit dem CFN und der Iowa State University wurden in diesem Projekt die

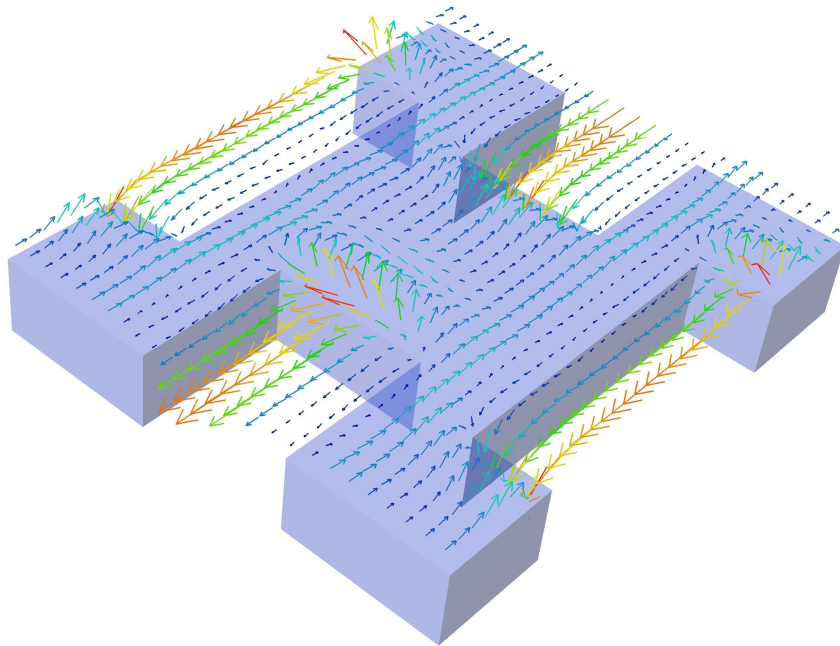


ABBILDUNG 2.2: Darstellung des elektrischen Feldes in einer realen Photolithographiemaske. Die Simulation wurde mit JCMharmony auf einem Mehrprozessor-PC (AMD-Opteron) durchgeführt. Bei  $3 \times 10^6$  Freiheitsgraden wurde eine CPU-Zeit von 170 min benötigt.

Eigenschaften optischer Metamaterialien untersucht. Abbildung 2.3 zeigt ein Beispiel einer am CFN hergestellten periodischen Anordnung von miniaturisierten Split-Ring-Resonatoren. Am ZIB wurde die Transmission von Licht durch das Material numerisch untersucht. Hierzu wurde die 3D Einheitszelle der periodischen Anordnung mit Tetraedern diskretisiert, Abbildung 2.4 zeigt eine typische Tetraedisierung [2]. Zur Diskretisierung der optischen Felder wurden Nédélec-Elemente zweiter Ordnung verwendet. Zur Simulation der Maxwellgleichungen wurden weiterhin Bloch-periodische Randbedingungen in zwei Dimensionen und transparente Randbedingungen (PML Methode) in der dritten Dimension verwendet [1]. Die Resultate stimmten sehr gut mit experimentellen Ergebnissen des CFN überein und dienen zur Interpretation der Resonanzen der Split-Ring-Resonatoren [5]. Dabei wurden unter anderem magnetische Resonanzen im sichtbaren Spektralbereich gefunden, die zu einer negativen effektiven magnetischen Permeabilität des Metamaterials korrespondieren.

### Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

**Iterative Löser für indefinite Gleichungssysteme** (Frank Schmidt, Achim Schädle, Lin Zschiedrich; Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt D9)

In diesem Projekt wurden die Arbeiten aus dem Vorjahr fortgeführt. Bei der Diskretisierung der zeitharmonischen Maxwellgleichungen mit einem Galerkinansatz und finiten Elementen erhält man große, dünn besetzte, indefinite, unsymmetrische, lineare Gleichungssysteme. Bei deren Lösung versagen zunächst die meisten bekannten Vorkonditionierer.



ABBILDUNG 2.3: Elektronenmikroskopische Aufnahme einer periodischen Anordnung von Split-Ring-Resonatoren (Aufnahme zur Verfügung gestellt von S. Linden, Karlsruhe). Diese miniaturisierten Schwingkreise besitzen Resonanzfrequenzen im sichtbaren Spektralbereich und können deshalb durch das magnetische Feld sichtbaren Lichts angeregt werden. Der Ausschnitt hat eine Größe von etwa  $8,5 \times 7,6 \mu\text{m}$ , die gesamte Größe der in Karlsruhe hergestellten Struktur beträgt etwa  $100 \times 100 \mu\text{m}$ . Die Dicke der Split-Ring-Resonatoren beträgt 30 nm.

Wir untersuchten zwei Zugänge. Der erste Zugang basiert auf einem neu-gestarteten Zeitbereichs-Vorkonditionierer und stellt sich als sehr geeignet für die Simulation typischer optischer Probleme heraus. Der zweite Zugang ist ein an der Physik orientierter Gebietszerlegungsalgorithmus. Im Gegensatz zu den weitverbreiteten und für positiv definite Probleme erfolgreichen Gebietszerlegungsalgorithmen, die an den Gebietsrändern Dirichlet- und/oder Neumann-Daten 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. Dieser Ansatz wurde speziell für die Lösung von Streuproblemen an geschichteten Medien weiterentwickelt (siehe EUV-Masken-Simulation). Damit ist es möglich, die Lichtstreuung an EUV (extremen ultra-violett)-Masken zu simulieren, ohne hierfür die als Spiegel wirkenden  $\lambda/4$ -Schichten mit finiten Elementen diskretisieren zu müssen.

**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))

Dieses bereits im Vorjahr begonnene Projekt wurde im Berichtszeitraum fortgeführt. Resonanzen sind Eigenschwingungen von Körpern, die in den Umgebungsraum des Resonanz-körpers 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.

Die theoretischen und algorithmischen Voruntersuchungen wurden erfolgreich abgeschlossen.

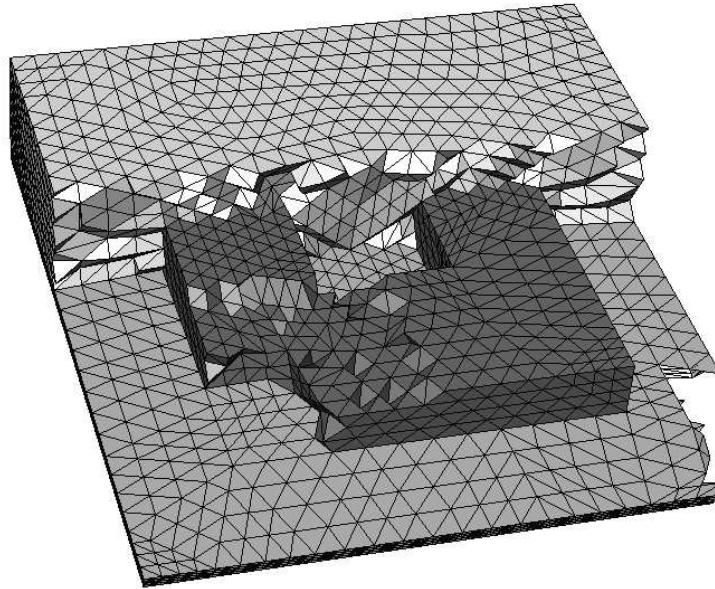


ABBILDUNG 2.4: Tetraedrische Diskretisierung einer Einheitszelle der Anordnung von Split-Ring-Resonatoren (siehe Abbildung 2.3). Dunkelgrau: Gold; hellgrau: Luft; grau: Substrat.

Hierbei hat sich ein neuartiger, auf Fouriermoden basierender Zugang zur Polbedingung als reelle Achsenmethode als sehr effizient erwiesen. Dieser zeigt superalgebraische Konvergenz. Erste Ergebnisse aus Akustik und Optik für 2D-Probleme liegen vor. Der neuartige Ansatz wurde in das Softwarepaket *JCMharmony* implementiert.

**EUV-Masken-Simulation** (Sven Burger, Frank Schmidt, Lin Zschiedrich; Kooperation: JCMwave GmbH, Infineon Technologies AG; Förderung: JCMwave GmbH)

Im Auftrag von Infineon wurden in einer Machbarkeitsstudie die Möglichkeiten zur numerischen Simulation von Lichtstreuung an zweidimensionalen EUV (Extreme UltraViolet)-Masken für die Photolithographie untersucht. Diese neuartigen Masken sind die Grundlage für die Produktion der nächsten Speicherchipgeneration. Der besondere Vorzug der FE-Methoden liegt hier darin, dass kleinste geometrische Störungen gut aufgelöst werden können. Eine besondere Schwierigkeit der EUV-Simulation sind Multilayerstacks, die aus vielen dünnen Schichten bestehen und innerhalb der EUV-Maske als Spiegel dienen. Um diese dünnen Schichten nicht mit finiten Elementen auflösen zu müssen, wurde ein spezieller Gebietszerlegungsalgorithmus entwickelt, in dem die Maxwellgleichungen in den Schichten analytisch gelöst werden [14]. Dieser Algorithmus ist eine Spezialisierung der im Projekt *Iterative Löser für indefinite Gleichungssysteme* entwickelten Methode. Damit ist es nun möglich, die Streuung an EUV-Masken annähernd so schnell wie im Fall von herkömmlichen Phasenmasken zu berechnen. Damit wird der Einsatz der Finite-Elemente-Methode zur Analyse und Optimierung von realen, technologischen Strukturen ermöglicht.



**Photonische-Kristall-Fasern für die Astronomie** (Sven Burger, Frank Schmidt, Lin Zschiedrich; Kooperation: Ronald Holzlöhner, European Southern Observatory, München und Chile; Peter J. Roberts, Technical University of Denmark, Lyngby)

Photonische-Kristall-Fasern sind Glasfasern mit in Propagationsrichtung verlaufenden Luftporen. Wenn die Abmessungen der Poren in der Größenordnung der Wellenlänge des in der Faser geführten Lichts liegen, treten Interferenzeffekte auf, die ausgenutzt werden können, um der Faser spezielle Eigenschaften zu geben. In dem sehr großen Teleskop der ESO in Chile soll eine Photonische-Kristall-Faser eingesetzt werden, um kurze Lichtpulse sehr hoher Intensität mit möglichst niedrigen Verlusten von einem Laser in die Bildebene des Spiegelteleskops zu leiten. Dies ist ein Teil des adaptiven Optik-Systems des Teleskops, mit dem atmosphärische Verzerrungen der extraterrestrischen Signale entzerrt werden. Die Verluste der Faser hängen von der Dicke der Materialstege zwischen den Luftlöchern in der Faser sowie von weiteren geometrischen Parametern ab. Um das Layout der Faser zu „designen“ sind daher präzise Simulationen der Eigenmoden für unterschiedliche geometrische Konfigurationen notwendig.

Die Rechenzeiten zur genauen Berechnung von typischen Eigenmoden mit adaptiven finiten Elementen höherer Ordnung liegen im Bereich einiger Sekunden. Bisher wurden bei den Kooperationspartnern in München und Lyngby Ebene-Wellen-Expansionsmethoden (wie das „Photonic Bands Package“ des MIT) verwendet, bei denen die Rechenzeiten bei vergleichbarer Genauigkeit im Bereich von Stunden bis Tagen lagen. Durch den Einsatz der am ZIB entwickelten Finite-Elemente-Software wurde bei den Projektpartnern erstmals eine Optimierung über mehrere geometrische Parameter ermöglicht. Eine so optimierte Faser wird demnächst im „Very Large Telescope“ der ESO in Chile eingesetzt werden.

Zur Zeit wird der Einsatz der Finite-Elemente Software JCMmode zur Berechnung von „Leaky modes“ (verlustbehaftete Resonanzmoden) in Photonischen-Kristall-Fasern untersucht.

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

Seit dem Jahr 2004 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 OptecNet 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, auf dem OptecNet-Gemeinschaftsstand auf der Messe *Laser 2005. World of Photonics*, München, sowie bei einem Treffen mit vergleichbaren Netzwerken in Nordamerika (Tucson und Ottawa) auf der Photonics West in San José präsentiert.

Beim parlamentarischen Tag im Berliner Abgeordnetenhaus wurden den Abgeordneten Resultate der Forschung 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)

Der schnelle, vergessliche Faltungsalgorithmus [10] wurde für variable Schrittweiten weiterentwickelt und implementiert. Dadurch ist jetzt eine adaptive Schrittweitensteuerung möglich.

Es werden nun  $N$  Schritte einer Faltungsquadratur mit variabler Schrittweite zur Approximation eines Faltungsintegrals, mit nur  $O(N \log N)$  Operationen und einem Speicheraufwand von  $O(\log N)$  berechnet. Hierzu werden keine Auswertungen des Faltungskerns benötigt, sondern  $O(\log N)$  Auswertungen seiner Laplacetransformierten. Das Verfahren wird zur Lösung von linearen und nichtlinearen Integral- und Integrodifferentialgleichungen verwendet.

**Moden in Bandlücken photonischer Kristalle** (Frank Schmidt, Christian Marwitz, Sven Burger; Kooperation: Andreas Knorr, Volker Mehrmann, TU Berlin)

Die optischen Eigenschaften photonischer Kristalle können durch Banddiagramme beschrieben werden. Dabei werden die Richtungen angegeben, in denen der photonische Kristall für eine bestimmte optische Frequenz transparent wird. Die Lücken zwischen den Bändern charakterisieren Frequenzen, für die Licht nur mit Dämpfung transportiert wird. Üblicherweise werden nur die zu den Bändern gehörenden ungedämpften Moden aus der Lösung von selbstadjungierten Eigenwertproblemen berechnet. Inhalt dieses im Rahmen einer Diplomarbeit bearbeiteten Projekts war das Aufstellen und numerische Lösen eines allgemeinen, nichtselbstadjungierten Eigenwertproblems, aus dem auch die gedämpften Moden bestimmt werden können. Die verwendete Eigenwertformulierung besitzt eine charakteristische Struktur aus hermiteschen und schieferhermiteschen Matrizen, die die Verwendung des speziell für solche Zwecke entwickelten Solvers SHIRA in Kooperation mit dem MATHEON-Projekt C4 ermöglichte. Der entwickelte Algorithmus wird insbesondere zum Studium von Verlustmechanismen beim Wellentransport in photonischen Kristallen verwendet.

**Diskretisierung inhomogener Außenräume in 2D und 3D** (Benjamin Kettner, Achim Schädle, Frank Schmidt; Kooperation: Günther Ziegler, TU Berlin; Wolfgang Löffler, DFG-Forschungszentrum für funktionelle Nanostrukturen, Karlsruhe; Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt D15)

Um partielle Differentialgleichungen auf unbeschränkten Gebieten diskretisieren zu können, muss der Außenraum um ein beschränktes Rechengebiet diskretisiert werden.

Ein Anwendungsgebiet findet sich bei der Lösung der Maxwellgleichungen für Fragestellungen in der integrierten Optik. Dabei ist eine Diskretisierung unter Nebenbedingungen beispielsweise notwendig für die Anwendung der Perfectly-matched-Layer-Methode in inhomogenen Außenräumen und für die Umsetzung der Polbedingung.

Um eine solche Diskretisierung umzusetzen, wurde im Rahmen des DFG-Forschungszentrums MATHEON in Kooperation mit Projekt F1 ein Algorithmus entwickelt, untersucht und realisiert, der Inhomogenitäten im Außenraum berücksichtigt. Das Verfahren erzeugt die Facetten einer Diskretisierung des Außenraumes, unter Berücksichtigung dieser Inhomogenitäten. Im Rahmen einer Diplomarbeit wurde eine Referenzimplementierung dieses Algorithmus in Matlab vorgenommen, und es wurden die Eigenschaften des Algorithmus näher untersucht.

Durch diese Diskretisierung von 3D-Außenräumen wird eine Berechnung von Streufeldern und Resonanzen vielfältiger Geometrien ermöglicht. Eine Untersuchung des Resonanz- und Streuverhaltens der von den Kooperationspartnern am CFN Karlsruhe hergestellten Nanoresonatoren hat bereits begonnen und wird mit den neu entwickelten Methoden weiter fortgesetzt.

**Transparente Randbedingungen für die Wellengleichung** (Daniel Ruprecht, Achim Schädle, Frank Schmidt; Kooperation: Rupert Klein, Potsdam-Institut für Klimafolgenforschung)

Für ein einfaches Modell aus der Klimaforschung, den linearen Flachwassergleichungen, wurden im Rahmen einer Diplomarbeit transparente Randbedingungen hergeleitet, analysiert und implementiert. Die auf der Polbedingung basierende Herleitung erlaubt die Anwendung dieser Randbedingungen in höheren Raumdimensionen. Darüber hinaus bietet die Polbedingung einen einheitlichen Rahmen zur Herleitung transparenter Randbedingungen für eine große Klasse von zeitabhängigen Gleichungen, die Wellen-, Wärmeleitungs- und Schrödinger-gleichung umfasst.

**Rekonstruktion von EUV-Maskenparametern** (Jan Pomplun, Sven Burger, Frank Schmidt; Kooperation: Frank Scholze, Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Berlin)

In Zusammenarbeit mit der Physikalisch-Technischen Bundesanstalt wurde die Lichtstreuung an zweidimensionalen EUV (Extreme UltraViolet)-Photolithographie-Masken simuliert.

Schwerpunkt war der quantitative Vergleich von Simulationsergebnissen und experimenteller Messung und die daraus resultierende Möglichkeit, aus Reflektometriemessungen die Geometrie einer EUV-Maske zu rekonstruieren. Dazu wurden EUV-Masken mit verschiedenen Geometrien simuliert und diejenige bestimmt, deren Simulation die geringste Abweichung zur experimentellen Messung hat.

Die FEM-Simulationen reproduzierten experimentelle Messungen sehr gut. Zudem konnte die Geometrie einer EUV-Maske wie beschrieben aus Simulationen rekonstruiert werden. Das Ergebnis stimmte sehr gut mit der mikroskopisch bestimmten Geometrie der EUV-Maske überein.

## Publikationen

- [1] S. Burger, R. Klose, A. Schädle, F. Schmidt, L. Zschiedrich. *FEM modelling of 3d photonic crystals and photonic crystal waveguides*. In Y. Sidorin and C. A. Wächter, editors, *Integrated Optics: Devices, Materials, and Technologies IX*, volume 5728, pages 164–173. Proc. SPIE, 2005.
- [2] S. Burger, L. Zschiedrich, R. Klose, A. Schädle, F. Schmidt, C. Enkrich, S. Linden, M. Wegener, and C. M. Soukoulis. *Numerical Investigation of Light Scattering off Split-Ring Resonators*. In: *Metamaterials*, Proc. SPIE Vol. 5955, 18-26, 2005.
- [3] S. Burger, R. Köhle, L. Zschiedrich, W. Gao, F. Schmidt, R. März, C. Nölscher. *Benchmark of FEM, waveguide and FDTD algorithms for rigorous mask simulation*. In J. T. Weed and P. M. Martin, editors, *Photomask Technology*, volume 5992, pages 378–389. Proc. SPIE, 2005.

- [4] S. Burger, L. Zschiedrich, R. Klose, A. Schädle, F. Schmidt, C. Enkrich, S. Linden, M. Wegener, C. M. Soukoulis. *Numerical investigation of light scattering off split-ring resonators*. In T. Szoplik, E. Özbay, C. M. Soukoulis, and N. I. Zheludev, editors, *Metamaterials*, volume 5955, pages 18–26. Proc. SPIE, 2005.
- [5] C. Enkrich, M. Wegener, S. Linden, S. Burger, L. Zschiedrich, F. Schmidt, C. Zhou, T. Koschny, C. M. Soukoulis. *Magnetic metamaterials at telecommunication and visible frequencies*. *Phys. Rev. Lett.*, 95:203901, 2005.
- [6] T. Kalkbrenner, U. Håkanson, A. Schädle, S. Burger, C. Henkel, V. Sandoghdar. *Optical microscopy using the spectral modifications of a nano-antenna*. *Phys. Rev. Lett.*, 95:00801, 2005.
- [7] R. Klose, S. Burger, F. Schmidt, L. Zschiedrich. *A multilevel method for the computation of eigenmodes in 3d photonic crystals*. In *Proceedings of the 5th International Conference on Numerical Simulation of Optoelectronic Devices*, pages 61–62, 2005.
- [8] M. López-Fernández, Ch. Lubich, C. Palencia, A. Schädle. *Fast Runge-Kutta approximation of inhomogeneous parabolic equations*. *Numer. Math.*, 102:277–291, 2005.
- [9] M. López-Fernández, C. Palencia, A. Schädle. *A spectral order method for inverting sectorial Laplace transforms*. Report 05-26, ZIB, 2005. to appear in *SIAM J. Numer. Anal.*
- [10] A. Schädle, M. López-Fernández, Ch. Lubich. *Fast and oblivious convolution quadrature*, Report 05-09, ZIB, 2005
- [11] A. Schädle L. Zschiedrich. *Additive Schwarz method for scattering problems using the PML method at interfaces*. Report 05-27, ZIB, 2005.
- [12] F. Schmidt, S. Burger, A. Schädle, R. Klose. *Finite element methods for optical device design*. In *Proceedings of the 5th International Conference on Numerical Simulation of Optoelectronic devices*, pages 57–58, 2005.
- [13] L. Zschiedrich, S. Burger, R. Klose, A. Schädle, F. Schmidt. *JCMmode: An adaptive finite element solver for the computation of leaky modes*. In Y. Sidorin and C. A. Wächter, editors, *Integrated Optics: Devices, Materials, and Technologies IX*, volume 5728, pages 192–202. Proc. SPIE, 2005.
- [14] L. Zschiedrich, S. Burger, A. Schädle, F. Schmidt. *Domain Decomposition Method for Electromagnetic Scattering Problems: Application to EUV Lithography*. In *Proceedings of the 5th International Conference on Numerical Simulation of Optoelectronic Devices*, pages 55–56, 2005.

### 2.2.2 Mathematische Modellierung im Medikamentenentwurf

Der bisherige Schwerpunkt „Molekulare Konformationsdynamik“ wurde im Berichtszeitraum erweitert und deshalb umbenannt. Im Berichtszeitraum wurde in der Abteilung „Numerische Analysis und Modellierung“ der Schwerpunkt auf die thermodynamische Simulation von Wirkstoffmolekülen und auf das semiflexible Docking gelegt. Außerdem wurde die mathematische

Modellierung in der gynäkologischen Endokrinologie aufgenommen, um Methoden für eine gezieltere Einwirkung auf den weiblichen Hormonzyklus zu entwickeln. Neu hinzugekommen ist auch der Bereich der Konformationskinetik, der die Theorie des Transferoperators auf Übergangsraten verallgemeinert.

### Thermodynamische Simulation

**Bearbeitet von:** Peter Deuffhard, Marcus Weber, Susanna Kube, Lionel Walter, Frank Cordes, Ullrich Nowak, Holger Meyer

**Kooperationspartner:** AG Christof Schütte, FU Berlin, Fachbereich Mathematik und Informatik

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

Bei der Berechnung der Konformationsdynamik mit dem am ZIB entwickelten Programmpaket ZIBgridfree [13, 7, 4] werden die einzelnen Konformationen eines Moleküls über Robuste-Perron-Cluster-Analyse (PCCA+) [8] aus einer gegebenen Übergangsmatrix  $P$  identifiziert.  $P$  beinhaltet Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen Ansatzfunktionen. Die Identifizierung der Konformationen führt genau dann zu einer Aufteilung des Ortsraumes in möglichst metastabile Bereiche, wenn das Eigenwertspektrum von  $P$  für jede Konformation mindestens einen Eigenwert nahe dem Perron-Eigenwert 1 besitzt. Gleichzeitig ist aber auch genau dann die Berechnung der thermodynamischen Gewichte der einzelnen Konformationen mittels linkem Perron-Eigenvektor von  $P$  schlecht konditioniert. Dieses resultiert aus einer geringen Übergangswahrscheinlichkeit zwischen den Konformationen und damit aus einem geringen Überlapp der Ansatzfunktionen in  $P$ , siehe Kapitel 6.5 in [13].

Zur Überwindung dieser Problematik während der Monte-Carlo-Quadratur der Überlappintegrale wurden in der Arbeitsgruppe verschiedene Ansätze getestet, die die Konvergenz der Verfahren zur Berechnung der Überlappintegrale der einzelnen Ansatzfunktionen verbessern sollen.

1. *Simulation bei unterschiedlichen Temperaturen:* Zur Überwindung von Barrieren innerhalb der Monte-Carlo-Simulationen werden diese zu verschiedenen Temperaturen gefahren, wobei die erzeugten Ortszustände mit Hilfe von Replica-Exchange-Schritten zwischen den Temperaturen ausgetauscht werden dürfen.
2. *Sprünge zwischen Metastabilitätsgebieten:* Innerhalb der HMC-Verfahren werden explizite Sprünge aus einem Metastabilitätsgebiet in ein anderes vorgeschlagen, um die thermodynamische Gewichtung der Konformationen zueinander korrekt berechnen zu können. Dabei werden Vorschlag- und Akzeptanzwahrscheinlichkeit dieser Schritte so abgestimmt, dass das Gesamtverfahren gegen die korrekte Verteilung konvergiert.

Die beiden vorgeschlagenen Verfahren wurden zunächst auf die unmodifizierte Potentialfunktion der Moleküle angewendet. In diesem Fall wird ohne gitterfreie Zerlegung des Ortsraumes gearbeitet. Es existieren also auch keine Überlappintegrale zur Definition eines normE-Konvergenzindikators im Sinne von Kapitel 5.2.3 in [13]. Hier arbeiten wir an verbesserten Konvergenzkriterien.

Besonderen Erfolg für einige unserer Test- und Wirkstoffmoleküle lieferte bisher die Methode der Sprünge, die die thermodynamische Verteilung der Ortszustände bei guter Vorkenntnis

der Metastabilitätsbereiche sehr schnell approximieren kann, im Gegensatz zu ZIBgridfree jedoch keine Übergangswahrscheinlichkeiten berechnet. Da mit dieser Methode thermodynamisch geringgewichtige Übergangsbereiche des Moleküls kaum aufgesucht werden, sondern direkt zwischen den Metastabilitäten „getunnelt“ werden kann, skaliert diese Methode in erster Linie auch nur mit der Anzahl der Metastabilitäten und nicht mit der Größe und Anzahl möglicher Übergangsregionen dazwischen. Zur Vorkonditionierung der Sprungmethode wurde ein schnelles Konformationsanalyseprogramm auf der Basis von Hypercubes und lokalen Minimierungen entwickelt.

### Virtuelles Screening

**Bearbeitet von:** Frank Cordes, Peter Deuffhard, Alexander Steidinger, Holger Meyer, Daniel Baum, Aysam Guerler, Sebastian Moll

**Kooperationspartner:** Nachwuchsgruppe Wilhelm Huisinga, DFG-Forschungszentrum MATHEON (Computational Physiology)

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

Im strukturbasierten Virtuellen Screening wird der Bindungsvorgang von Wirkstoffmolekülen, target + drug : target – drug complex, in drei Phasen aufgeteilt.

Während der Vorgang des *Bindens* in der Regel als Nicht-Gleichgewichtsprozess modelliert wird und durch einen Docking-/Alignment-Ansatz für jedes Bindungsproblem neu berechnet werden muss, werden *Edukte* und *Produkte* als Gleichgewichtszustände modelliert und durch Verfahren zur Konformationsanalyse untersucht.

Für das Virtuelle Screening muss die Konformationsanalyse von pharmazeutischen Molekülbibliotheken und Proteinen, die den Zustand vor der Bindung repräsentieren, nur einmal durchgeführt und in Konformationsdatenbanken gespeichert werden. Nachgeschaltete Module zum flexiblen Alignment/Docking, Scoring und zur rigorosen thermodynamischen Bewertung können auf die Datenbank zurückgreifen. Die Genauigkeit der Zustandsbeschreibung vor der Bindung besitzt maßgeblichen Einfluss auf die darauf aufbauenden Module, insbesondere auf das immer noch ungelöste Problem des Scorings, das heißt, die thermodynamische Bewertung der Bindungskomplexe.

Die Erkenntnisse aus der Dissertation von M. Weber [13] und der Masterarbeit von H. Meyer [4] führten zur Entwicklung neuer Verfahren, die eine sehr schnelle, vollständige Unterteilung des Konformationsraums in metastabile Konformationsbereiche erlauben und mit dieser Information die Konformationsdatenbank füllen. Die Vollständigkeit der Verfahren basiert auf systematischen Suchansätzen. Die Effizienz beruht auf einer Dimensionsreduktion durch den Übergang vom Punkt- zum Raumkonzept. Vergleiche mit kommerziellen Programmen zur Konformationsanalyse zeigen bei einem vertretbaren Mehraufwand eine verbesserte Abtastung des Raums.

Im Berichtszeitraum wurden im Rahmen von Bachelorarbeiten kleine Konformationsdatenbanken für Wirkstoffe aufgebaut, die an humanes Serum-Albumin [3] und an HIV-Protease [2] binden. Die strukturellen Daten wurden durch Molekülvergleiche (siehe „Virtuelles Molekül-labor“) klassifiziert. Die Arbeiten legen nahe, dass funktionelle Ähnlichkeit von Molekülen unter bestimmten Voraussetzungen durch strukturelle Ähnlichkeit abbildbar ist (Abb. 2.5).

Die Konformationsdatenbanken wurden außerdem als Eingabe für das flexible Alignment- und Docking-Modul FADO genutzt. Dieser Ansatz erlaubt es, ein Konformationsensemble auf

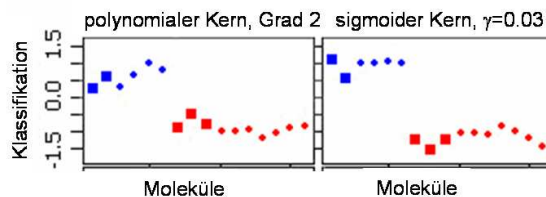


ABBILDUNG 2.5: Klassifikation struktureller Ähnlichkeiten, die sich aus paarweisem Vergleich von Konformationsdaten von HIV-Protease-Inhibitoren (die ersten sechs Verbindungen) und von HIV-unspezifischen Wirkstoffen ergeben. Bei Verwendung des sigmoiden Kerns können durch Support Vector Machines bindende von nicht-bindenden Molekülen getrennt werden.

eine Punktemenge z. B. auf die Pharmakophoratome einer Leitstruktur abzubilden. Durch einen Optimierungsansatz wird die optimal zur Punktemenge passende Geometrie aus den Konformeren des Ensembles linear kombiniert, translatiert und rotiert. Gegenüber herkömmlichen Methoden, in denen durch Auswahl einzelner Konformere aus einem vorab berechneten Ensemble nur eingeschränkt die Flexibilität der Moleküle wiedergegeben wird, kann FADO Moleküle während des Vergleichs flexibel einander anpassen.

Das flexible Alignment wurde auf das Dockingproblem übertragen. Die zielführende Punktemenge besteht in diesem Fall aus den Positionen innerhalb des aktiven Zentrums eines Proteins, die ein hohes Interaktionspotential für einzelne Atome des zu bindenden Wirkstoffs besitzen. Durch einen am ZIB entwickelten Ansatz besitzt diese Punktemenge eine hohe Wiedergabegenauigkeit der essentiellen Bindungseigenschaften eines Proteins. Für das flexible Docking eines Wirkstoffs an ein starres Molekül benötigt der Algorithmus auf einem PC eine Rechenzeit von einer Minute pro Molekül und liegt damit in der Größenordnung der zur Zeit schnellsten Dockingmethoden. Für 70% der bisher getesteten Fälle erreicht die Vorhersage des Protein-Wirkstoff-Komplexes im Vergleich zum Experiment eine Genauigkeit von weniger als 2,0 Å. Für die Bewertung der Bindungsenergien der vorhergesagten Komplexe durch eine Scoringfunktion werden zur Zeit die Konformationsdaten genauer analysiert.

Alle Methoden des Virtuellen Screenings stehen in einem Webportal [6] den Kooperationspartnern zur Verfügung.

### Konformationskinetik

**Bearbeitet von:** Peter Deuffhard, Susanna Kube, Marcus Weber

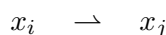
**Förderung:** DFG-Forschungszentrum „Mathematik für Schlüsseltechnologien“, Projekt A4

Die Kenntnis von Übergangspfaden zwischen verschiedenen Konformationen eines Moleküls spielt eine wichtige Rolle in der Strukturbiologie. Während sich viele Wissenschaftler für ausgewählte Übergangspfade interessieren, z. B. solche über niedrigste Energiebarrieren, versucht man am ZIB, entropische Effekte zu berücksichtigen. Tatsächlich gibt es ein Ensemble von Übergangspfaden. Im Prinzip treten alle möglichen Übergangspfade auf, jedoch einige mit größerer Wahrscheinlichkeit als andere. Aus diesem Grund betrachten wir Besetzungswahrscheinlichkeiten der verschiedenen Konformationen und untersuchen die Evolution der entsprechenden Wahrscheinlichkeitsdichte im Konformationsraum.

Um die metastabilen Mengen oder Konformationen zu finden, wird der Torsionswinkelraum auf eine Zahl von  $N$  Zuständen reduziert, die durch Basisfunktionen [13] oder Boxen dargestellt werden. Zunächst betrachtet man also Dichten  $x(t)$  im  $\mathbb{R}^N$ . Das zeitliche Verhalten der Dichte wird durch die Master-Gleichung beschrieben, ein System linearer gewöhnlicher Differentialgleichungen erster Ordnung mit konstanten Koeffizienten,

$$\dot{x}(t) = Q^\top x(0).$$

Die Einträge der Matrix  $Q$  können als Reaktionsraten monomolekularer Reaktionen



betrachtet werden, wobei  $x_i$  für das Gewicht oder den Anteil des Zustandes  $i$  an der aktuellen Verteilung steht [11]. Daher wird die Matrix  $Q$  als Ratenmatrix bezeichnet. Es handelt sich dabei um den infinitesimalen Generator der Übergangshalbgruppe  $P(t)$  der zugrunde liegenden zeit-stetigen homogenen Markov-Kette. In der bisherigen Modellierung konnte dieser zeit-unabhängige Generator nicht direkt aus den Übergangswahrscheinlichkeiten berechnet werden, da  $P(t)$  nicht die Chapman-Kolmogorow-Gleichung erfüllt. Daher war es bisher nicht möglich, Aussagen über das Zeitverhalten des Systems auf beliebigen Zeitskalen zu treffen. Die direkte Simulation von Übergangsraten gestattet nun diese neue Betrachtungsweise.

Da die Eigenvektoren der Übergangswahrscheinlichkeitsmatrix  $P(t)$  und der Ratenmatrix gleich sind, kann die Robuste-Perron-Cluster-Analyse direkt auf  $Q$  angewendet werden, um die Zugehörigkeitsvektoren zu berechnen. Bei den Ratenmatrizen handelt es sich um große, schwach besetzte Matrizen. Daher spielt die Effizienz des Eigenwertlösers eine wichtige Rolle. Als Alternative zum bisher benutzten Arnoldi-Verfahren wurde die Jacobi-Davidson-Methode implementiert und getestet. Dieses Verfahren lässt sich so steuern, dass der Algorithmus abbricht, sobald der nächste Eigenwert zu weit entfernt vom Zielwert liegt und somit die Konvergenzgeschwindigkeit sinkt. Es eignet sich daher besonders für die Berechnung von Eigenwert-Clustern, falls die genaue Zahl dieser Eigenwerte nicht im Voraus bekannt ist.

Tatsächlich interessiert jedoch nicht das Verhalten von Dichten im Raum aller  $N$ -Zustände, sondern die Wahrscheinlichkeitsdichten im Raum der  $N_C$ -Konformationen. Eine Möglichkeit besteht darin, die vollständige Mastergleichung zu lösen und nach jedem Zeitschritt das Ergebnis auf den niedrig-dimensionalen Konformationsraum einzuschränken. Es wurde gezeigt, dass man stattdessen direkt eine reduzierte Mastergleichung lösen kann, wodurch der Rechenaufwand erheblich abnimmt [9]. Der Schwerpunkt der Untersuchung lag auf der Fragestellung, wie sich Methoden, die im Fall der harten Clusterung bekannt sind, auf den Fall einer weichen Clusterung übertragen lassen. Weiterhin wurde untersucht, wie sich die Dynamik durch die Vorgabe eines zu erreichenden Endzustandes verändert. Abbildung 2.6 zeigt die Entwicklung der Dichte im Konformationsraum für das Pentan-Molekül.



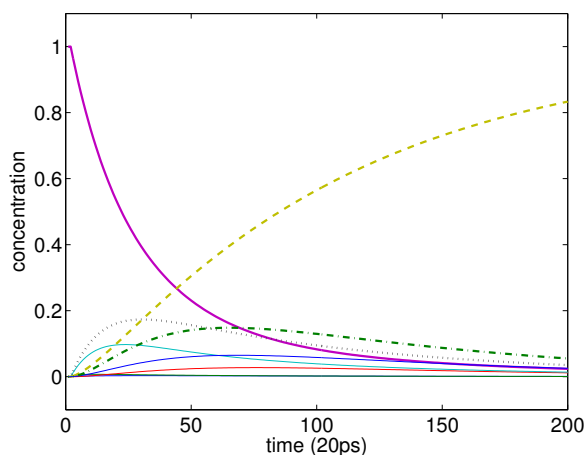


ABBILDUNG 2.6: Konformations-Kinetik-Simulation von Pentan. Die neun Linien entsprechen den Gewichten der neun Cluster. Die (g+/t)-Konformation (—) wurde als Start-Konformation gewählt und die (t/g+)-Konformation (---) als Ziel-Konformation. Die Dichte wurde in einem Intervall von 20 ps mit einer Schrittweite von 0.1 ps berechnet.

### Virtuelles Moleküllabor

**Bearbeitet von:** Daniel Baum, Timm Baumeister, Johannes Schmidt-Ehrenberg, Maro Bader, Christian Schudoma

**Kooperationspartner:** AG Christof Schütte, FU Berlin, Fachbereich Mathematik und Informatik; Nachwuchsgruppen „Alignment und Threading auf massiv parallelen Rechnern“ und „3D-strukturelles Datamining und Qualitätsmanagement“ (BCB/ZIB); AG Giovanni Galizia, FU Berlin, Fachbereich Neurobiologie; Mercury Computer Systems, Berlin

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

### Multiple semi-flexible Überlagerung molekularer Oberflächen

Die *Solvent excluded surface (SES)* eines Moleküls umschließt den Raum, der Wassermolekülen nicht zugänglich ist, und wird berechnet, indem eine Kugel von der Größe eines Wassermoleküls über die Van-der-Waals-Kugeln des Moleküls gerollt wird. Die SES approximiert also die Oberfläche, an der mögliche Interaktionen eines Moleküls mit anderen Molekülen stattfinden und ist daher für die Bestimmung der Ähnlichkeit von Molekülen von besonderem Interesse. Aus diesem Grund wurde das im vorigen Berichtszeitraum vorgestellte, auf Atomkernpositionen basierende Verfahren der semi-flexiblen Überlagerung von Molekülen [1] auf Moleküloberflächen übertragen.

Die neue Methode basiert auf der Überlagerung von Oberflächenpunkten, die wie folgt generiert werden: Jedes Dreieck der triangulierten Moleküloberfläche wird initial dem Atom zugeordnet, dem es am nächsten liegt. Jeder Atompatch wird durch einen Punkt in seiner Mitte repräsentiert. Damit die Dichte der Punkte auf der Oberfläche etwa gleich ist, werden große Patches weiter zerlegt. Das linke Bild in Abbildung 2.7 zeigt die Zerlegung einer Moleküloberfläche in Patches und deren korrespondierende Oberflächenpunkte. Die weißen Linien markieren die Ränder der initialen Atompatches.

Der Algorithmus zur paarweisen Überlagerung der Oberflächen beruht weiterhin auf zwei Schritten: Generierung initialer Überlagerungen und lokale Optimierung der Überlagerungen. Für den zweiten Schritt werden nur die Oberflächenpunkte berücksichtigt, was zu folgenden Verbesserungen führt: (1) Atome, die einen größeren Oberflächenanteil haben, werden in der Überlagerung stärker berücksichtigt, da sie durch proportional zum Oberflächenanteil viele Punkte repräsentiert werden. (2) Die 1-zu-1-Zuordnung von Atomen zueinander wird aufgebrochen, was zu einer besseren Überlagerung der molekularen Strukturen führt. In Abbildung 2.7 ist das Ergebnis einer Oberflächenüberlagerung zweier HIV-Protease-Inhibitoren gezeigt, die von dem atom-basierten Ansatz nicht gefunden wird.

Für die Generierung multipler Überlagerungen aus paarweisen Überlagerungen wurde der statische Überlagerungsbaum durch einen adaptiven ersetzt, der einen erheblich geringeren Speicherbedarf bei gleicher Laufzeit hat.

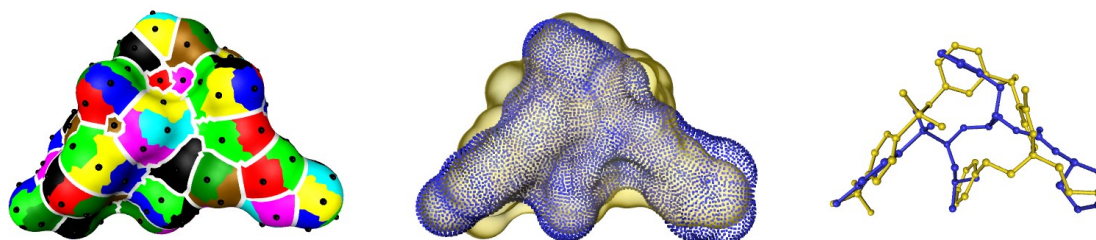


ABBILDUNG 2.7: Links: Zerlegung der Moleküloberfläche von Tipranavir in Patches. Mitte und rechts: Die beste Überlagerung der HIV-Protease-Inhibitoren Amprenavir (dunkel) und Tipranavir (hell). Die Moleküloberflächen zeigen eine gute Übereinstimmung, trotz deutlicher Unterschiede in der atomaren Struktur.

### Hierarchisches Alignment molekularer Zustandsdichten

Das Konzept molekularer Metastabilität impliziert, dass die dynamische Formvariation eines Moleküls in langfristige, aber seltene Änderungen und thermische Fluktuationen zerlegt werden kann.

Ziel der Visualisierung sind hier die Darstellung und der Vergleich der metastabilen Formen des Moleküls. Dabei soll die durch thermische Fluktuation bedingte Unschärfe möglichst gering gehalten werden. Um eine solche Darstellung zu erhalten, ist eine geometrische Ausrichtung der einzelnen Zustände zueinander notwendig. Bei der bisherigen Alignmentmethode werden die Varianzen aller Atompositionen minimiert und somit alle Formvariationen als thermische Fluktuationen interpretiert. Sie kann sinnvoll nur auf eine Teildichte, die genau eine metastabile Form enthält, oder ein Teilmolekül, das in allen metastabilen Formen dieselbe Geometrie hat, angewendet werden.

Aufbauend auf einer Analyse mit Hilfe von Hidden-Markov-Modellen wurde nun eine neue Alignment-Strategie entwickelt [5]. Das Molekül wird dazu als eine Hierarchie von Teilmolekülen beschrieben, die mit Teildichten verknüpft sind. Die Hierarchie reicht von einer minimalen Teilstruktur, die in der gesamten Dichte bis auf thermische Fluktuation konstante Geometrie hat, bis zum kompletten Molekül, dessen Geometrie nur innerhalb der den metastabilen Formen entsprechenden Teildichten konstant ist. Jedes Atom ist dabei eindeutig mit einer Hierarchiestufe verknüpft. Die Zielfunktion des Alignments ist die Varianz der Atompositionen innerhalb der verschiedenen dem Atom zugeordneten Teildichten.

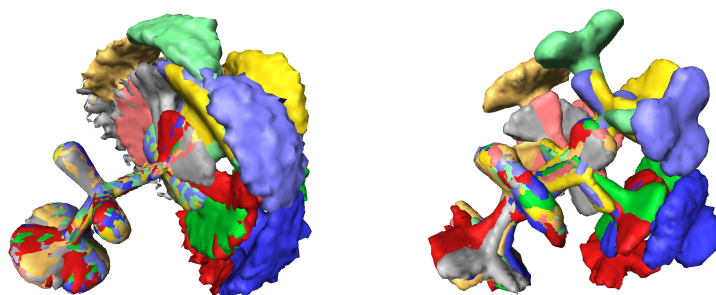


ABBILDUNG 2.8: Vergleich von Alignment-Strategien an Hand einer Trajektorie des Pentanmoleküls mit 15.000 Zeitschritten, die in 9 metastabile Formen zerlegt werden kann. Diese werden jeweils durch Isoflächen ihrer Konfigurationsdichten dargestellt. Links: Alignment durch Minimierung der Positionsvarianzen von 3 Kohlenstoffatomen. Rechts: Die neue Methode unter Verwendung derselben 3 Atome als minimale Struktur.

Der Effekt der neuen Methode wird in Abbildung 2.8 am Beispiel der Zustandsdichte von Pentan illustriert. Bei Anwendung der bisherigen Methode auf ein Teilmolekül ist die Teilstruktur (jeweils unten links) sehr klar zu erkennen, während der Rest des Moleküls stark verrauscht dargestellt ist. Die neue Strategie zeigt die Teilstruktur etwas unschärfer, lässt dafür aber im Rest des Moleküls wesentlich deutlichere Formen erkennen.

### Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

**Clusterwettbewerb der Arbeitsgemeinschaft für Datenanalyse und Klassifizierung (AG DANK)** (Susanna Kube, Marcus Weber; Kooperation: Alexander Schliep, Wasinee Rungsarityotin)

Die Robuste-Perron-Cluster-Analyse (PCCCA+) ist ein universelles Werkzeug zur Clusterung von Daten. Neben der Identifizierung fast invarianter Mengen von Zuständen in Markov-Ketten kam sie auch in anderen Bereichen zum Einsatz, z. B. bei der Clusterung von Gen-Expressionsdaten in der Brustkrebsforschung [12]. Ein Schwerpunkt des vergangenen Jahres lag in dem Vergleich der PCCA+ mit etablierten Cluster-Verfahren. Auf Einladung der Gesellschaft für Klassifizierung (GfKl) fand eine Evaluation von Cluster-Analyse-Programmen statt. In der Ankündigung der GfKl vom August 2005 heißt es: „Ziel ist, festzustellen, ob bzw. inwieweit verschiedene Algorithmen (und Programme) in der Lage sind, gewisse mehr oder weniger ausgeprägte Clusterkonstellationen anhand der zugehörigen Daten zu erkennen. Da es sich um simulierte Daten handelt, sind die dem Auswerter verborgenen Clusterkonfigurationen bekannt und können – bei der Herbsttagung – mit den Ergebnissen verglichen werden. Hierdurch erhofft man sich Aufschluss über die Qualität der Algorithmen.“ An der Evaluierung nahmen acht Gruppen von verschiedenen Forschungseinrichtungen teil. Es ging darum, elf verschiedene 4-oder 5-dimensionale Datensätze mit bis zu 500 Datenpunkten sowie zwei 25-dimensionale Datensätze mit 773 bzw. 1.418 Datenpunkten zu clustern. Da es sich dabei um statische Daten handelt, bestand die Hauptschwierigkeit darin, ein geeignetes Ähnlichkeitsmaß zu finden. Die Datensätze, bei denen uns dies gelang, wurden mit Hilfe der PCCA+ erfolgreich geclustert, zum Teil sogar wesentlich einfacher und effizienter als mit den Verfahren anderer Gruppen.

**RNA-3D-Modellierung** (Christian Schudoma, Patrick May, Frank Cordes, Hans-Christian Hege)

Für die Weiterentwicklung des bereits in den Jahresberichten 2003 und 2004 beschriebenen RNA-Threading-Frameworks wurde eine neue Template-Struktur-Bibliothek entwickelt. Diese basiert auf Daten aus den öffentlichen Webdatenbanken PDB und SCOR. In ihr sind Strukturinformationen von 368 verschiedenen RNA-Molekülen enthalten. Die Bibliothek beinhaltet außerdem Informationen über kleinere Sekundärstruktur-Fragmente sowie über Tertiärstruktur-Motive. Damit bietet sie eine umfangreichere Datengrundlage für die Modellierung von RNA-3D-Strukturen als die ursprünglichen Template-Bibliotheken. Somit wird auch die Verwendung alternativer Modellierungsansätze ermöglicht, die beispielsweise Strukturmodelle aus Substrukturfragmenten zusammensetzen.

**Molekularer 3D-Editor** (Timm Baumeister, Hans-Christian Hege)

Zur interaktiven Konstruktion und Verfeinerung von Liganden im aktiven Zentrum wurde ein Editor entwickelt, der es erlaubt, Moleküle unter Berücksichtigung chemischer Regeln in 3D zu verändern.

Der Aufbau der Moleküle erfolgt hierbei durch Anhängen einzelner Atome oder ganzer als SMILES-String gegebener Gruppen an vorhandene Bezugsatome. Bei der Verkettung werden die lokalen Bindungsgeometrien nach dem VSEPR-Modell (VSEPR = (valence shell electron pair repulsion) berücksichtigt und Geometrien und Valenzen benachbarter Atome angepasst.

Zur Berechnung der dabei erforderlichen chemischen Eigenschaften wurde eine Reihe von Algorithmen der Chemoinformatik implementiert und weiterentwickelt. Hierzu zählen Methoden zur Berechnung der kleinsten Menge kleinster Zyklen, zum Auffinden von Subgraph-Isomorphismen des molekularen Graphen sowie zum Auffinden aromatischer Ringsysteme nach den erweiterten Hückel-Regeln.

**Mathematische Modellierung in der gynäkologischen Endokrinologie** (Peter Deuffhard, Isabel Reinecke; Kooperation: Wilhelm Huisinga, Andrea Weiße, FU Berlin; Horst Lübbert, Julia Bartley, Charité, Campus Benjamin Franklin; Bertram Wiedenmann, Ursula Plöckinger, Charité, Campus Virchow-Klinikum)

Auch wenn etwa die Hälfte der Bevölkerung davon betroffen ist und weltweit mehr als 100 Millionen Frauen die Pille nehmen (in Deutschland sind es etwa vier Millionen), spielte der weibliche Hormonzyklus in der mathematischen Modellierung bislang keine große Rolle. Zweck dieses Projektes ist, alle wesentlichen biochemischen Abläufe innerhalb dieses Regelkreises in einem Modell zu erfassen, mit dem Ziel der Entwicklung der individuellen Pille.

Dies setzt das genaue Verständnis der Physiologie voraus. Unter dem weiblichen Hormonzyklus versteht man die Abläufe des Regelkreises im Körper der Frau, die im gesunden Fall regelmäßig zur Ovulation führen und damit die Reproduktion ermöglichen. Mit Hilfe von Hormonbehandlungen kann man bei einem gestörten Zyklus die Ovulation hervorrufen oder aber, als hormonale Kontrazeptiva verabreicht, unterdrücken.

Im Berichtszeitraum wurden zunächst die Vorgänge in den einzelnen Kompartimenten Hypothalamus, Hypophyse und Ovarien und die Beziehungen untereinander untersucht. Eine Übersicht ist in der Abbildung 2.9 dargestellt. Bei der Modellierung werden biochemische Mechanismen – wie z. B. die Enzymkinetik – berücksichtigt, was zu einer Erhöhung der

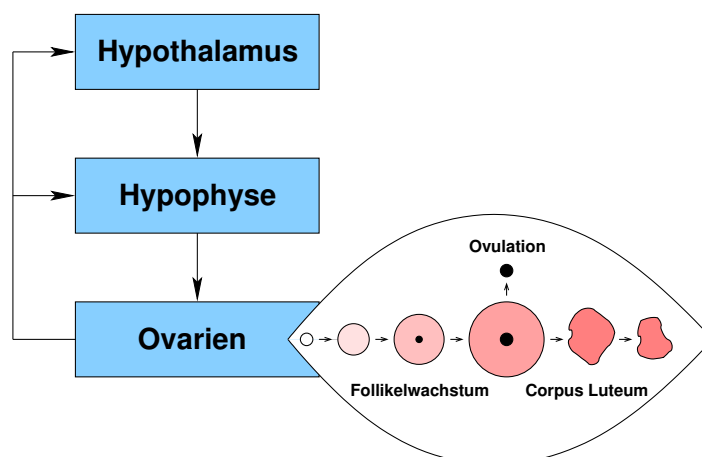


ABBILDUNG 2.9: Weiblicher Hormonzyklus mit Darstellung des Follikelwachstums

Komplexität führt. Als mathematischer Ansatz dient ein System von Differentialgleichungen, mit denen zurzeit die Dynamik von etwa 30 Hormonen und Follikelphasen beschrieben wird. Da Prozesse an verschiedenen Orten im Körper stattfinden und sich zeitverzögert beeinflussen, ist es sinnvoll, zu Delaydifferentialgleichungen überzugehen. Die pulsatile Freisetzung des Hormons GnRH aus dem Hypothalamus wird durch ein komplexes und zum Teil wenig erforschtes Neuronen-Netzwerk geregelt, weshalb hier ein anderer Ansatz gewählt wird [10].

### Publikationen

- [1] Daniel Baum, *Multiple Semi-flexible 3D Superposition of Drug-sized Molecules*, Computational Life Sciences: First International Symposium, CompLife 2005 (Konstanz, Germany), Lecture Notes on Computer Science, vol. 3695, Springer, 2005, pp. 198–207.
- [2] A. Exner, *Vergleich von 2D- und 3D-Ähnlichkeitsdeskriptoren am Beispiel von HIV-Protease-Inhibitoren*, Bachelorarbeit, Freie Universität Berlin, 2005.
- [3] C. Krüger, *Bindung von Wirkstoffen an Serum-Albumin basierend auf 3D-Strukturvergleich*, Bachelorarbeit, Freie Universität Berlin, 2005.
- [4] H. Meyer, *Die Implementierung und Analyse von HuMfree – einer gitterfreien Methode zur Konformationsanalyse von Wirkstoffmolekülen*, Masterarbeit, Freie Universität Berlin, 2005.
- [5] Johannes Schmidt-Ehrenberg und Hans-Christian Hege, *Visual analysis of molecular conformations by means of a dynamic density mixture model*, Computational Life Sciences: First International Symposium, CompLife 2005 (Konstanz, Germany), Lecture Notes on Computer Science, vol. 3695, Springer, 2005, pp. 229–240.
- [6] A. Steidinger, *Data Management for Processing Molecules*, Report 05-01, ZIB, 2005.
- [7] M. Weber und H. Meyer, *ZIBgridfree – Adaptive Conformation Analysis with qualified Support of Transition States and Thermodynamic Weights*, Report 05-17, ZIB, 2005.

- [8] P. Deuffhard und M. Weber, *Robust Perron Cluster Analysis in Conformation Dynamics*, J. Lin. Alg. Appl. **398C** (2005), 161–184.
- [9] S. Kube und M. Weber, *Conformation Kinetics as a Reduced Model for Transition Pathways*, Report 05-43, ZIB, 2005.
- [10] I. Reinecke und P. Deuffhard, *A Complex Mathematical Model of the Human Menstrual Cycle*, Report 06-18, ZIB, 2006 (in Vorbereitung).
- [11] M. Weber und S. Kube, *Robust Perron Cluster Analysis for Various Applications in Computational Life Science*, Computational Life Sciences, First International Symposium, CompLife 2005, Konstanz, Germany, September 25-27, 2005, Proceedings (M. R. Borthold und R. C. Glen und K. Diederichs und O. Kohlbacher und I. Fischer, ed.), Lecture Notes in Computer Science, vol. 3695, Springer, 2005, pp. 57–66.
- [12] M. Weber und W. Rungtarityotin und A. Schliep, *An Indicator for the Number of Clusters Using a Linear Map to Simplex Structure*, From Data and Information Analysis to Knowledge Engineering, Proceedings of the 29th Annual Conference of the Gesellschaft für Klassifikation e. V., Universität Magdeburg, März 2005 (M. Spiliopoulou und R. Kruse und C. Borgelt und A. Nürnberger und W. Gaul, ed.), Studies in Classification, Data Analysis, and Knowledge Organization, Springer, 2006, pp. 103–110.
- [13] M. Weber, *Meshless Methods in Conformation Dynamics*, Dissertation, Freie Universität Berlin, Fachbereich Mathematik und Informatik, Verlag Dr. Hut München, 2006.

### 2.2.3 Medizinische Therapie- und Operationsplanung

Im Berichtszeitraum wurde diese Thematik sowohl in der Arbeitsgruppe *Computational Medicine*, hier mit den Schwerpunkten mathematische Modellierung und numerische Simulation, als auch in der Arbeitsgruppe *Medical Planning Systems* behandelt, dort mit den Schwerpunkten geometrische Modellierung, Interaktion und Visualisierung.

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

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

**Kooperationspartner:** Hans-Florian Zeilhofer, Klinik für Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie, Kantonsspital Basel, Schweiz; Robert Sader, Klinik für Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie, Johann-Wolfgang-Goethe-Universität Frankfurt; Thomas Hierl, Klinik und Poliklinik für Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie, Universitätsklinikum Leipzig; Emeka Nkenke, Klinik und Poliklinik für Mund-, Kiefer-, Gesichtschirurgie der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg; Gert Wittwer, Klinik für Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie der Medizinischen Universität Wien, Österreich; Anders Westermarck, Klinik für Mund-, Kiefer-, Gesichtschirurgie, Karolinska Hospital Stockholm, Schweden

Die computergestützte Planung komplexer chirurgischer Knochenumstellungen, einschließlich der Abschätzung der daraus resultierenden Weichgewebeanordnung, lässt sich mittlerweile an aus CT-Daten rekonstruierten Patientenmodellen problemlos durchführen, was anhand

diverser Fallbeispiele demonstriert werden konnte [16, 17]. Im Berichtszeitraum erfolgte eine weitere Validierung der Simulationsergebnisse sowie die Erarbeitung neuer Konzepte zur Beschleunigung der Modellerzeugung und zur Verbesserung der Planung und der Deformationssimulation [22, 18].

Die Segmentierung tomografischer Bilddaten ist derzeit noch die zeitintensivste Tätigkeit im Rahmen der Planungsvorbereitung. Hier wird an der Nutzung anatomischen Formwissens gearbeitet, wobei einzelne Regionen des Schädels in anatomische Formmodelle überführt wurden, die zur Segmentierungsunterstützung herangezogen werden können (siehe Abschnitt 2.2.6 auf Seite 72). Ziel ist es, ein Modell des kompletten Schädels zu erstellen, das innerhalb seiner normalen Variationsbreite an die Bilddaten angepasst wird und so als Segmentierungshilfe dient. Die Optimierung der Oberflächennetze zur Generierung von Volumengittern, die zur numerischen Simulation der Weichgewebedeformation benötigt werden, wurde durch ein neues Remeshing-Verfahren deutlich beschleunigt und führt zu wesentlich besseren Ausgangsvernetzungen (siehe auch S. 68). Die Osteotomieplanung wurde durch eine robuste Implementierung von Pfaden auf Oberflächenmodellen verbessert (siehe S. 67), und für die Umstellungsplanung wurde ein Konzept entwickelt, das es erlaubt, bereits während der interaktiven Knochenverlagerung einen Eindruck von der Weichgewebeveränderung zu erlangen. Dazu wird momentan ein physikalisch basiertes Tensor-Massen-Deformationsmodell implementiert und mit einer Kollisionserkennung gekoppelt. Aus der Knochenendlage resultieren konsistente Randbedingungen, unter Berücksichtigung eines gleitenden Weichgewebekontaktes, die in die Berechnung der räumlichen Weichgewebedeformation via bewährter Finite-Elemente Methoden einfließen. An der Verbesserung der Weichgewebesimulation durch erweiterte Modellierungsansätze wird ebenfalls kontinuierlich gearbeitet.

### **Planung von Schädelumformungen in der Kinder-Neurochirurgie**

**Bearbeitet von:** Hans Lamecker, Stefan Zachow, Britta Weber, Hans-Christian Hege, Peter Deuffhard

**Kooperationspartner:** Ernst-Johannes Haberl, Maja Zöckler, Pädiatrische Neurochirurgie, Klinik für Neurochirurgie, Charité, Campus Virchow-Klinikum

**Förderung:** DFG-Forschungszentrum MATHEON, Teilprojekt F2

Frühzeitig verknöcherte Schädelnähte (Kraniosynostosen) können bei Neugeborenen im Verlauf des Wachstums zu Schädelfehlbildungen führen. Mittels eines operativen Eingriffes lassen sich solche Wachstumsstörungen korrigieren, aus denen sich unter anderem auch Schädigungen des Gehirns ergeben können. Dazu werden Teile des Gehirnschädels mobilisiert und unter Berücksichtigung einer normalen Schädelform neu angeordnet. Neben der funktionellen Rehabilitation spielt jedoch auch die Herstellung einer ästhetischen Kopfform eine wesentliche Rolle, wobei deren präoperative Planung und die Bewertung im Rahmen der Umgestaltung das Hauptproblem darstellt.

Auf Basis von 21 aus MRT-Daten rekonstruierten Oberflächenmodellen frühkindlicher Schädelkalotten wurde ein statistisches Formmodell des relevanten Bereiches des Gehirnschädels berechnet [10] (vgl. S. 63). Ein solches Modell liefert die Grundlage für eine objektive und dennoch patientenspezifische Umformung des Schädelknochens. Gleichzeitig lassen sich durch dessen Einsatz unbeabsichtigte Fehlkorrekturen und daraus resultierende Sekundäreingriffe vermeiden. Das statistische Modell kam im Berichtszeitraum bei einem operativen Eingriff an einem Patienten mit Trigonocephalie (Verknöcherung der Frontalnaht) zu einer ersten An-

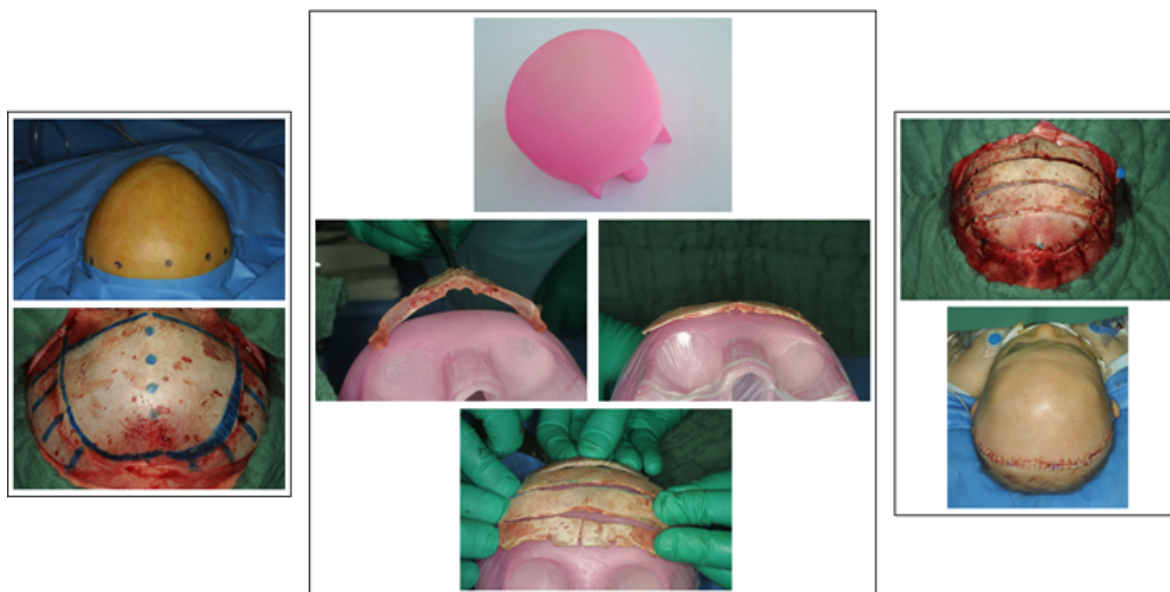


ABBILDUNG 2.10: Erste klinische Anwendung eines statistischen Formmodells des Schädelsknochens zur Planung einer Knochenumformung.

wendung [8]. Dazu wurde das Modell an wenige, am Kopf des Kindes präoperativ vermessene Landmarken angepasst, deren Lage keine Auswirkung auf die chirurgische Umformung hatte (Eingang zu den Gehörgängen, Nasensattel, Okziput). Auf Basis der daraus resultierenden Modellinstanz wurde ein Kunststoffmodell gefertigt, das im Verlauf der Operation direkt zur Umformung und Anpassung der Knochenfragmente genutzt wurde (siehe Abbildung 2.10).

### Planung von Kieferrekonstruktionen und dentalen Implantaten auf Basis eines statistischen 3D-Unterkiefermodells

**Bearbeitet von:** Stefan Zachow, Hans Lamecker, Britta Weber, Antonia Wittmers

**Kooperationspartner:** Barbara Elsholtz, Michael Stiller, Zentrum für Zahn-, Mund- und Kieferheilkunde, Charité, Campus Benjamin Franklin; Anders Westermark, Klinik für Mund-, Kiefer-, Gesichtschirurgie, Karolinska Hospital Stockholm, Schweden

Die chirurgische Rekonstruktion von stark fehlgebildeten bzw. durch Tumorsektion verlorenen Knochenstrukturen stellt eine hohe Anforderung an die modellierenden Fähigkeiten eines Chirurgen – insbesondere dann, wenn aufgrund beidseitiger Defekte keine Spiegelung intakter Strukturen möglich ist. Zu diesem Zweck wird ein dreidimensionales statistisches Formmodell des normal ausgebildeten menschlichen Unterkiefers entwickelt, das individuell an die gegebene Anatomie angepasst und so als Rekonstruktionsgrundlage genutzt werden kann [20]. Im Berichtszeitraum wurde die Datenbasis anhand geeigneter CT-Datensätze vergrößert und das statistische Formmodell entsprechend erweitert. Zur Korrespondenzanalyse wurden eine Einteilung des Unterkiefers in Regionen spezifiziert und Verfahren implementiert, mit denen die Gebietszerlegung interaktiv vorgenommen werden kann (siehe Abschnitt 2.2.5).



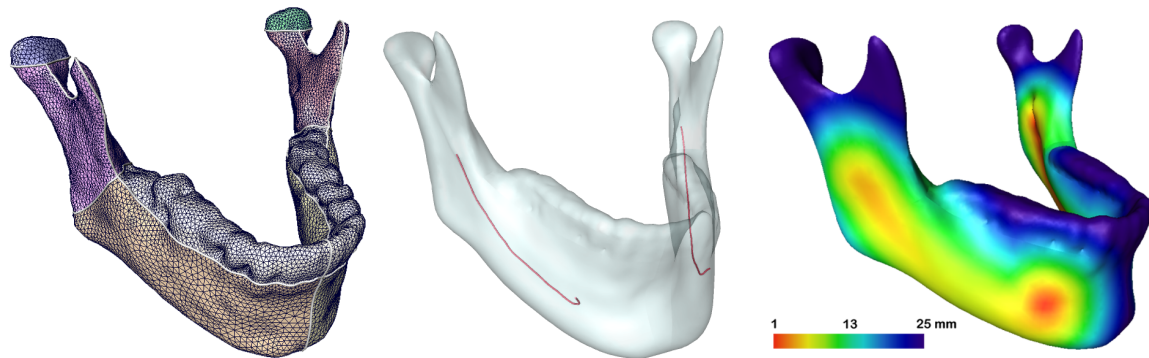


ABBILDUNG 2.11: Links) Gebietszerlegung des Unterkiefermodells, Mitte) Integration des Mandibularnerves, rechts) mittlerer Abstand zwischen Nerv und Knochenoberfläche

Mit der Verfügbarkeit eines statistischen 3D-Formmodells des Unterkiefers lassen sich weitere Fragestellungen in der Kieferchirurgie und der dentalen Implantologie beantworten. Unter anderem, ob der Verlauf des Mandibularnerves mit der Form des Unterkiefers korreliert und aus dieser abgeleitet werden kann. Zu diesem Zweck wurden die Nervverläufe aus den entsprechenden CT-Daten rekonstruiert und das statistische Formmodell des Unterkiefers um die beiden Nerven erweitert (Abbildung 2.11). Durch die Zuordnung von Kieferform und Nervverlauf sowie die Mittelung über eine große Stichprobenzahl wird eine entsprechende Korrelationsanalyse ermöglicht, die im Falle der Nutzung von Panorama- oder multiplanarer Röntgenaufnahmen als Zusatzinformation genutzt werden kann (siehe auch Abschnitt 2.2.3 auf Seite 49). Das resultierende statistische Modell lässt sich somit für die Abschätzung des Nervverlaufes aus der Unterkieferform nutzen [19], aber auch zur automatisierten Segmentierung des Unterkiefers selbst [9], ggf. sogar inklusive des Mandibularnerves.

### Planung der chirurgischen Rekonstruktion von Augenhöhlendefekten

**Bearbeitet von:** Hans Lamecker, Stefan Zachow, Antonia Wittmers, Britta Weber

**Kooperationspartner:** Hansrudi Noser, Lukas Kamer, AO Foundation Development Institute, Davos, Schweiz; Beat Hammer, Cranio Faciales Centrum Hirslanden, Aarau, Schweiz; Nils-Claudius Gellrich, Alexander Schramm, Medizinische Hochschule Hannover, Klinik und Poliklinik für Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie

**Förderung:** AO Foundation Development Institute, Davos, Schweiz

Die Diagnostik bei Defekten der knöchernen Augenhöhle erfolgt typischerweise mittels Röntgen-Computertomografie (RCT) oder digitaler Volumentomographie (DVT). Die Planung einer chirurgischen Versorgung von Orbitafrakturen basiert in der Regel auf den Schnittbildern der CT-Untersuchungen. Eine Dislokation von Knochenfragmenten ist dabei im Allgemeinen bereits gut erkennbar. Die detaillierte Vorplanung der chirurgischen Rekonstruktion einer frakturierten Augenhöhle ist jedoch aufgrund der fehlenden Dreidimensionalität der Bilddaten schwierig und erfordert eine computergestützte 3D-Rekonstruktion und -Planung. Die automatische 3D-Rekonstruktion der zum Teil papierdünnen Orbitawände aus tomografischen Bilddaten ist allerdings aufgrund des sogenannten Partialvolumeneffektes unzuverlässig und erfordert eine aufwendige, manuelle Feinsegmentierung.

Im Orbita-Projekt wird an robusten und schnellen Segmentierungsverfahren unter Zuhilfenahme anatomischer Zusatzinformation sowie an computergestützten Planungs- und Rekon-

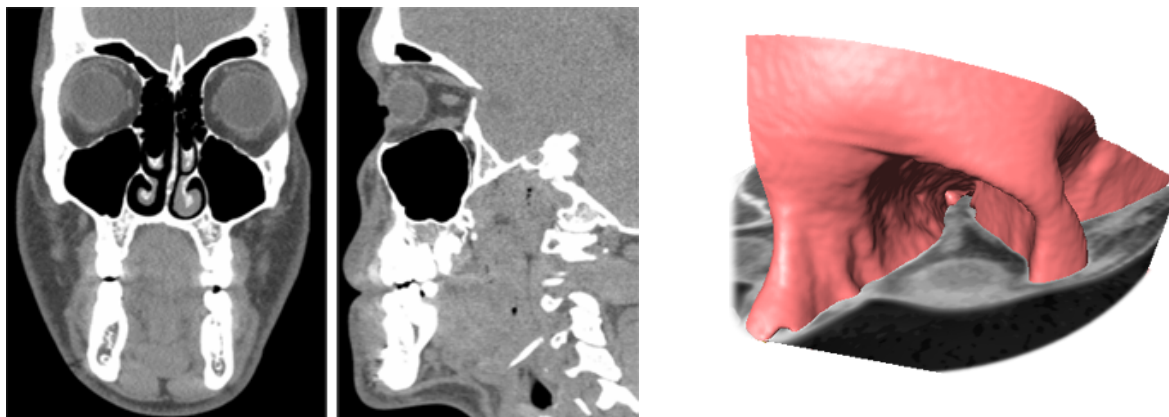


ABBILDUNG 2.12: Links: Koronales und sagittales Schnittbild aus einem CT-Datensatz. Rechts: Rekonstruktion der orbitalen Region.

struktionsverfahren gearbeitet, bei denen individuelle sowie charakteristische anatomische Gegebenheiten berücksichtigt und Defekte mit Hilfe von anatomischem Formwissen (statistische 3D-Formmodelle normal ausgeprägter Anatomie) rekonstruiert werden können.

### Planung von Nasennebenhöhlen- und Nasenscheidewandoperationen unter Berücksichtigung der individuellen Nasenatmung

**Bearbeitet von:** Stefan Zachow, Michael Zilske, Kai Poethkow, Bertram Wölk

**Kooperationspartner:** Thomas Hildebrandt, Asklepios-Klinik Birkenwerder; Alexander Steinmann, Peter Bartsch, CFX Berlin Software GmbH; Werner Heppt, Rainer Weber, Klinikum Karlsruhe, HNO-Klinik

**Förderung:** HNO-Klinik, Städtisches Klinikum Karlsruhe

Rhinologische Beschwerden sind sehr häufig. Dazu gehören unter anderem Nasenatmungsbehinderung, Beeinträchtigungen des Geruchssinnes, Kopfschmerzen, Schnarchen und rezidivierende bzw. chronische Sinusitiden sowie pulmonologische Erkrankungen. In der HNO-Heilkunde nimmt die Therapie rhinologischer Probleme deshalb einen breiten Raum ein. Die operativen und medikamentösen Behandlungsmöglichkeiten haben sich in den letzten Jahren und Jahrzehnten stark verbessert. Unverändert schwierig ist es aber, die komplexen Funktionsstörungen der Nase präzise einzuschätzen und Vorhersagen über die Erfolgsaussichten operativer Behandlungsmethoden zu treffen [13]. Als eine wesentliche Größe für die objektive Beurteilung der Nasenfunktion gilt die Fluss-Druck-Abhängigkeit, die rhinomanometrisch gemessen werden kann. Die Fortschritte bei der numerischen Strömungssimulation (Computational Fluid Dynamics, CFD) erlauben es, unter Verwendung eines individualisierten geometrischen Modells, die Atemströmung durch die Nase örtlich und zeitlich hochaufgelöst zu berechnen. Simulationsergebnisse lassen sich mit geeigneten Visualisierungsverfahren anschaulich darstellen und bieten so die Möglichkeit der Interpretation für die Chirurgen.

Zur systematischen Analyse von Strömungsmustern wurde im Berichtszeitraum von einem beschwerdefreien Probanden ein hochaufgelöstes Computertomogramm der kompletten Atemwege der Nase einschließlich Nebenhöhlen angefertigt. Die Aufnahme erfolgte nach Verabreichung schleimhautabschwellender Medikamente. Dabei stellte sich eine quasi ideale anatomische Konfiguration mit freien Atemwegen und Nebenhöhlen dar. Zusätzlich wurden rhino-

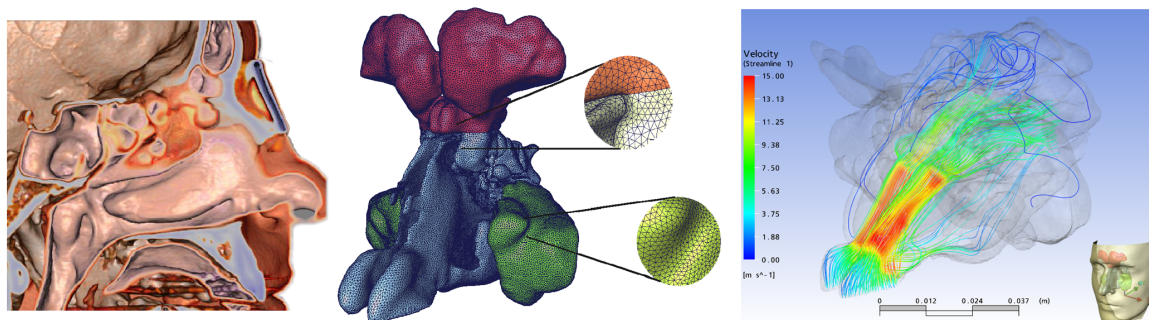


ABBILDUNG 2.13: Links) Medianschnitt durch die CT-Daten des Nasenatmungstraktes, mitte) Oberflächenrekonstruktion inklusive Nasennebenhöhlen, rechts) Visualisierung der berechneten Strömungsgeschwindigkeit.

manometrische Messungen unter gleichen Bedingungen durchgeführt. Im Zusammenhang mit den normalen rhinomanometrischen Messwerten des Probanden bei einem vergleichbaren Schleimhautschwellungszustand kann man davon ausgehen, dass damit in erster Näherung ein pathophysiologisch ungestörtes Referenzströmungsmuster vorliegt. Aus den CT-Daten wurden die Nasenatemwege einschließlich der Nebenhöhlen rekonstruiert. Die Oberflächen sowie die daraus resultierenden Volumengitter werden mit neu entwickelten Verfahren zur Optimierung von Dreiecksnetzen im Hinblick auf die Gitterqualität für die numerische Strömungsanalyse optimiert (Abbildung 2.13, vgl. S. 68). In einem ersten Schritt werden Ergebnisse von Strömungssimulationen – basierend auf dem Nasenmodell mit den rhinomanometrischen Messungen – verglichen. Nach der Validierung sollen weitere Strömungssimulationen mit jeweils nach klinischen Gesichtspunkten virtuell veränderter Nasengeometrie zu einer systematischen Übersicht möglichst vieler, klinisch relevanter Strömungseffekte in der Nase führen. Auf dieser Grundlage und mittels geeigneter Verfahren zur Darstellung und Auswertung der Ergebnisse sind weitreichende Schlussfolgerungen für chirurgische und konservative Therapiekonzepte zu erwarten [21].

### Planung für die onkologische Leberchirurgie

**Bearbeitet von:** Hans Lamecker, Thomas Wenckebach, Hans-Christian Hege, Peter Deuffhard

**Kooperationspartner:** Thomas Lange, Sebastian Eulenstein, Peter Schlag, Klinik für Chirurgie und Onkologische Chirurgie, Charité, Campus Berlin-Buch

**Förderung:** DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt F2

Die genaue Lokalisation der intrahepatischen Gefäße in Relation zu einem Tumor ist eine wichtige Aufgabe in der onkologischen Leberchirurgie. Eine verlässliche computergestützte präoperative Planung eines chirurgischen Eingriffs erfordert daher eine präzise Rekonstruktion der Gefäße. Im Berichtszeitraum wurde ein Verfahren entwickelt, um solche Modelle durch Fusion von CT- oder MRI-Daten in unterschiedlichen Phasen der Kontrastmittelausbreitung zu erzeugen. Dazu wurden sowohl lineare als auch nicht-lineare Deformationen, die unter anderem durch Atmungsbewegung entstehen können, durch eine neuartige Kombination eines Segmentierungs- und Registrierungsverfahrens kompensiert [11, 12].

Die Übertragung der Planungsergebnisse 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. Das entwickelte Hybridverfahren aus dem ICP-Algorithmus und B-Spline-basierter nicht-linearer Registrierung der Gefäßmittellinien soll in der Zukunft mit geeigneten Ähnlichkeitsmaßen kombiniert werden, um robuste Ergebnisse zu erhalten.

### **Planung eines optimalen endoprothetischen Gelenkersatzes**

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

**Kooperationspartner:** Mark Taylor, School of Engineering Sciences, University of Southampton Highfield, Großbritannien; Georg Duda, Charité, Campus Mitte; Arold J. M. Reusken, Leiden University Medical Center, Niederlande; José Angel Villar Rivacoba, University of Zaragoza, Spanien; Vincent Chaillou, ESI Group, Rungis, Frankreich; Mike Tuke, Finsbury Development Ltd., Leatherhead, Großbritannien; Andrew Miles, Pera Innovation Ltd., Leicestershire, Großbritannien; Allan Ritchie, Depuy International Limited, Leeds, Großbritannien

**Förderung:** EU-FP6-Projekt 27252 „DeSSOS“

Neu eingeworben wurde das im 6. Rahmenprogramm angesiedelte EU-Projekt DeSSOS (Decision Support System for Orthopedic Surgery), bei dem es um die optimale endoprothetische Versorgung im Falle eines künstlichen Gelenkersatzes geht. Basierend auf patientenspezifischen anatomischen Gegebenheiten soll in Hinblick auf Form, Größe und Orientierung eine optimale Prothesenauswahl getroffen werden können. Das Implantat soll dabei an die individuelle Knochenanatomie angepasst werden, wobei mittels biomechanischer Simulation unter Berücksichtigung von Muskeln, Bändern und Sehnen, Kräfte und Kinematik in den Optimierungsprozess einfließen. Die Bestimmung geeigneter Optimierungsparameter durch Analyse relevanter Faktoren ist ein wesentliches Ziel des Forschungsvorhabens. Das Projekt begann am 1. Januar 2006 und hat eine Laufzeit von drei Jahren.

### **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; Georg Bergmann, Charité, Campus Benjamin Franklin

**Förderung:** Klinische Forschergruppe Biomechanik und Biologie der Knochenheilung; Individuelle, beanspruchungsgerechte Osteosynthese, DFG

Die patientenspezifische Planung chirurgischer Interventionen benötigt zuverlässige Informationen über charakteristische Belastungen und Bewegungsabläufe. Diese sind zumeist nur aus kinematischen Daten erhältlich. Im Berichtszeitraum wurden daher die Untersuchungen zur präzisen Ermittlung von Segmentbewegungen fortgesetzt. Nach einer Analyse der wesentlichen Fehlerquellen [14], wurde eine vergleichende Zusammenfassung bisheriger Ansätze zusammen mit einer neuen Methodik publiziert [2]. Diese ermöglicht die simultane Bestimmung von Gelenkzentren und -achsen. Außerdem ist eine Detektion sekundärer Bewegungsanteile möglich, etwa der internen Rotation der Tibia, die der Flexion überlagert ist.

Im Wesentlichen abgeschlossen sind die Arbeiten zur inversen Dynamik am Schafsmodell ([5, 15]), analysiert wurden vor allem noch im Detail die lateralen und proximalen Lastanteile im Knie.

Fortgesetzt wurde weiterhin die Entwicklung eines dynamischen Modells auf der Grundlage der Mehrkörpersimulation. Hierbei wird der Schwerpunkt in Kooperation mit dem MATHEON-Projekt A2, Modelling and Simulation of Human Motion for Osteotomic Surgery, auf ein detailliertes Modell des menschlichen Knies gelegt.

Auch die Entwicklung eines praktikablen Verfahrens zur Mittelung stark streuender und zeitversetzter Signale, z. B. Frakturenbewegungen oder Belastungsdaten, ist weitgehend abgeschlossen. Solche Probleme lassen sich als separable nichtlineare Ausgleichsprobleme formulieren, die sich mit speziellen Gauß-Newton-Verfahren mit adaptiver Steuerung lösen lassen. Die Programme sollen nun im routinemäßigem Einsatz für große Datenmengen getestet werden.

### **Simulation des menschlichen Gangs**

**Bearbeitet von:** Peter Deuffhard, Susanne Ertel

**Kooperationspartner:** Ralf Kornhuber, FU Berlin, Fachbereich Mathematik und Informatik; Rolf Krause, Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, Zuse-Fellow; Uli Sack, Oliver Sander, FU Berlin

**Förderung:** DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt A2, „Mathematik für Schlüsseltechnologien“

Elastische Spannungen und Deformationen, die während des Gehens an Knie oder Hüfte auftreten, können durch ein dynamisches Kontaktmodell beschrieben werden. Die Zeit-Diskretisierung der Newtonschen Bewegungsgleichung geschieht mit Hilfe des Newmark-Verfahrens. Trotz der aus der Kontaktbedingung resultierenden Nichtlinearität erlaubt die Effizienz der zur Lösung der statischen Kontaktprobleme verwendeten monotonen Mehrgittermethoden [6] die Wahl von Parametern aus der Klasse der impliziten Newmark-Verfahren.

Dem Ansatz von Pandolfi et al. [Int. Journ. for Num. Methods in Engineering 53, 2002, S. 1801–1829] folgend, werden die Kontaktkräfte voll implizit behandelt. Wir konnten nachweisen, dass dadurch auch beim Ablösen der Kontaktknoten die Energie des Systems nur abnehmen und nicht erhöht werden kann, wie im Fall des klassischen Newmark-Verfahrens. Trotz des dissipativen Charakters des Algorithmus wiesen die numerischen Resultate starke Oszillationen im Wechsel von Kontakt-/Nichtkontakt-Zustand der Randknoten auf. Eine Verbesserung lieferte die Idee der Projektion des Prädiktors auf den Raum der zulässigen Verschiebungen. Dabei bleibt das Zeitintegrationsschema weiterhin dissipativ sowohl beim Finden, als auch beim Lösen von Kontakt. Zugleich wird jedoch die Anzahl der Wechsel von Kontakt-/Nichtkontakt-Zustand der Randknoten drastisch verringert. Diese Stabilisierung verhindert zudem die Oszillationen in den Verschiebungen und Tangentialspannungen und reduziert die Amplitude der Oszillationen in den Normalspannungen.

Die Implementierung des beschriebenen Verfahrens wurde mit dem statischen Kontaktlöserbaustein aus DUNE gekoppelt. Ein Hertzsches Kontaktproblem in zwei und drei Dimensionen erlaubt die Beurteilung der numerischen Resultate durch den Vergleich mit einer approximativen analytischen Lösung. Erste Resultate einer 3D-Implementierung des dynamischen Kniemodells liegen vor.

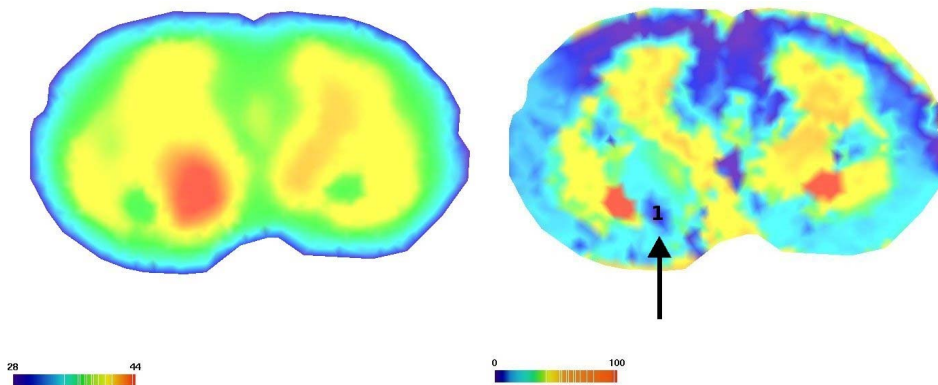


ABBILDUNG 2.14: Ergebnis der Identifizierung für reale Daten. Position 1 markiert das Gebiet mit dem identifizierten nekrotischen Tumor. Links: Temperatur, rechts: Perfusion.

### Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

**Parameteridentifizierung in der Hyperthermie** (Martin Weiser, Tobias Gänzler; Kooperation: S. Volkwein, Universität Graz, Österreich; P. Wust, J. Gellermann, M. Weihrauch, Charité, Campus Virchow-Klinikum; Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt A1)

Die sich einstellende Temperaturverteilung in der regionalen Hyperthermie hängt in hohem Maße von der Perfusion (Durchblutung) des Gewebes ab. Die Perfusion jedoch variiert erheblich während einer Therapiesitzung, ist individuell stark verschieden, und hängt zudem von der Temperaturverteilung im ganzen Körper ab. Dies führt dazu, dass Therapieplanungen mittels Standardmodellen die sich einstellende Temperaturverteilung nur ungenügend beschreiben. Mit dem an der Charité zur Verfügung stehenden kombinierten offenen MR-Hyperthermie-Applikator kann während der Therapie 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 Mess-Signal fortgeführt. Die Perfusion wird nun nichtnegativ modelliert und das im Finite-Elemente-Code KASKADE implementierte SQP-Verfahren zur Identifizierung wurde dahingehend erweitert [3]. Da die Perfusion innerhalb eines jeden Gewebes als stetig differenzierbar vorausgesetzt wird, werden lineare Finite Elemente verwendet. Dabei übertragen sich die Eigenschaften der Barrierefunktion nicht aus dem Kontinuierlichen und deshalb wurden spezielle Interpolationsformeln (Lobatto) verwendet. Angewendet auf reale Daten wurde ein Gebiet mit nekrotischem Tumor identifiziert (vgl. Abbildung 2.14).

Ein weiteres Hindernis bei der Therapieplanung ist, dass die Eigenschaften des Hochfrequenz-Leistungsgenerators sowie des Übertragungsnetzwerks zum Applikator nicht genau bekannt sind. Gemeinsam mit der Charité wurde daher begonnen, mit Gauß-Newton-Verfahren die thermisch wirksamen Anteile der  $E$ -Felder aus MR-Temperaturmessungen an Phantomen zu unterschiedlichen Ansteuerungen zu identifizieren. Aus technischen Gründen sind nur wenige Messungen zu jeder Phantomlagerung verfügbar, so dass nur eine Anpassung eines Planungsmodells an die Messwerte erfolgen kann. Dennoch ergibt sich eine überraschend stark verbesserte Vorhersagefähigkeit des angepassten Modells [4].

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

Die elektrische Aktivität im Herzmuskel, wie sie im Elektrokardiogramm sichtbar wird, kann durch ein System von degenerierten parabolischen Reaktions-Diffusions-Gleichungen für das intra- und das extrazelluläre Potential des myokardialen Gewebes in drei Raumdimensionen näherungsweise modelliert werden. Das Modell schließt intramurale Faserrotation und anisotrope Leitfähigkeitskoeffizienten ein. Zwei Gleichungen für die Potentiale sind mit einem System gewöhnlicher Differentialgleichungen gekoppelt, welche die Ionenströme und die Ca-Konzentration 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 italienischen Kooperationspartner beinhaltet eine einfachere Steuerung der Zeitschrittweite und eine Parallelisierung der Ortsprobleme durch Gebietszerlegungsmethoden in jedem Zeitschritt.

Im Berichtszeitraum wurden mit der am ZIB entwickelten Software KARDOS, die in enger Kooperation mit der Darmstädter Arbeitsgruppe weiterentwickelt wird, die im Vorjahr begonnenen Studien fortgeführt. Die auf einer Rothe-Methode basierende adaptive Steuerung in Zeit und Ort bewies zunächst an Modellrechnungen auf einem kleinen Teilstück des Herzens ihre Effizienz, [1].

Auf der Agenda steht die Erweiterung der Simulation auf realistische Herzmodelle (erste Rechnungen erfolgten bereits, siehe Abbildung 2.15) und ein Vergleich der Effizienz unserer Methode mit anderen, bisher in diesem Gebiet üblichen Methoden.

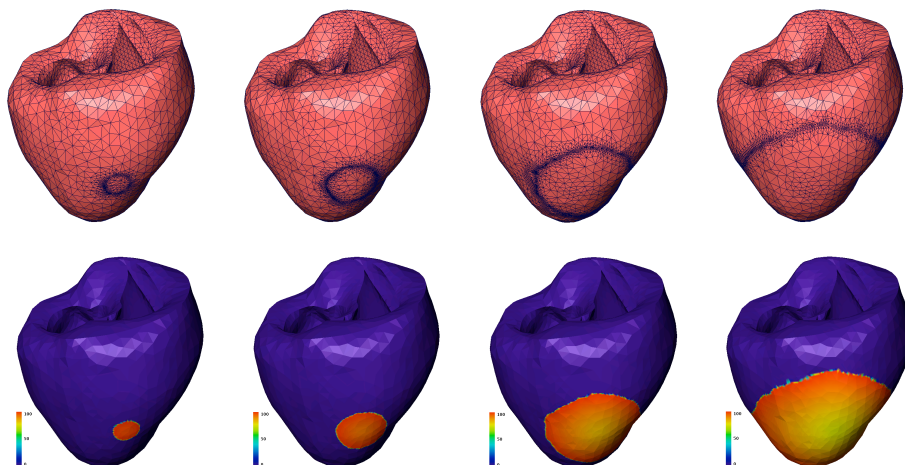


ABBILDUNG 2.15: Zeitliche Entwicklung des Potentials (unten) und des adaptiven Gitters (oben) in der kardio-elektrischen Anregungsphase.

## Publikationen

- [1] P. Colli Franzone, P. Deuffhard, B. Erdmann, J. Lang, and L. F. Pavarino, *Adaptivity in space and time for reaction-diffusion systems in electrocardiology*, to appear in SIAM J. Sc. Comp. (2006).
- [2] R. M. Ehrig, W. R. Taylor, G. N. Duda, and M. O. Heller, *A survey of formal methods for determining the centre of rotation of ball joints*, Journal of Biomechanics, im Druck (2006).
- [3] T. Gänzler, S. Volkwein, and M. Weiser, *SQP methods for parameter identification problem arising in hyperthermia*, to appear in Optimization Methods & Software Journal. (2005).
- [4] J. Gellermann, M. Weihrauch, C. H. Cho, W. Wlodarczyk, H. Föhling, R. Felix, V. Budach, M. Weiser, J. Nadobny, and P. Wust, *Comparison of MR-thermography and planning calculations in phantoms*, submitted, Charité, 2006.
- [5] M. O. Heller, G. N. Duda, R. M. Ehrig, H. Schell, P. Seebeck, and W. R. Taylor, *Muskuloskeletale Belastungen im Schafshinterlauf: Mechanische Rahmenbedingungen der Heilung*, Materialwissenschaft und Werkstofftechnik **36** (2005), 775–780.
- [6] Ralf Kornhuber and Rolf Krause, *Adaptive multigrid methods for signorini's problem in linear elasticity*, [J] Comput. Vis. Sci., 4 **No.1** (2001), 9–20.
- [7] H. Lamecker, S. Zachow, H. Haberl, M. Stiller: *Medical Applications for Statistical Shape Models*. In: Weber, S. et al. (Hrsg.) Computer Aided Surgery around the Head, Fortschritt-Berichte VDI 17(258), S. 61 (2005)
- [8] H. Lamecker, S. Zachow, H.-C. Hege, M. Zöckler, H. Haberl: *Surgical Treatment of Craniosynostosis based on a Statistical 3D-Shape Model: First Clinical Application*. Accepted for Publication in: Lemke, HU et al. (Hrsg.) Computer Assisted Radiology and Surgery, Int. Congress Series, Elsevier (2006)
- [9] H. Lamecker, S. Zachow, A. Wittmers, B. Weber, H.-C. Hege, B. Elsholtz, M. Stiller: *Automatic Segmentation of Mandibles in Low-Dose CT-Data*. Accepted for Publication in: Lemke, HU et al. (Hrsg.) Computer Assisted Radiology and Surgery, Int. Congress Series, Elsevier (2006)
- [10] H. Lamecker, M. Zöckler, H. Haberl, S. Zachow, H.-C. Hege: *Statistical Shape Modeling for Craniosynostosis Planning*. 2. Int. Conf. on Advanced Digital Technology in Head and Neck Reconstruction, Banff, Alberta, CA, 10.–13. März, S. 60 (2005)
- [11] T. Lange, T. Wenckeback, 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*. In: Lemke, HU et al. (Hrsg.) Computer Assisted Radiology and Surgery, Int. Congress Series (1281), Elsevier, S. 768–772 (2005)
- [12] T. Lange, T. Wenckeback, H. Lamecker, M. Seebaß, M. Hünerbein, S. Eulenstein, P.-M. Schlag: *Registration of Different Phases of Contrast-Enhanced CT/MRI Data for Computer-Assisted Liver Surgery Planning: Evaluation of State-of-the-Art Methods* Int. J. Medical Robotics and Computer Assisted Surgery, Wiley, 1(3), S. 6–20 (2005)



- [13] G. Mlynski: *Physiology and Pathophysiology of Nasal Breathing*. Thieme, S. 75–87 (2004)
- [14] W. R. Taylor, R. Ehrig, M. O. Heller, H. Schell, P. Klein, and G. N. Duda, *On the influence of soft tissue coverage in the determination of bone kinematics using bone markers*, Journal of Orthopedic Research **23** (2005), 726–734.
- [15] W. R. Taylor, R. Ehrig, M. O. Heller, H. Schell, P. Seebeck, and G. N. Duda, *Tibio-femoral joint contact forces in sheep*, Journal of Biomechanics **39** (2006), 791–798.
- [16] A. Westermarck, S. Zachow, and B. Eppley: *3D osteotomy planning in maxillofacial surgery, including soft tissue prediction*. Journal of Craniofacial Surgery, 16(1), S. 100–104 (2005)
- [17] S. Zachow: *Computergestützte 3D-Osteotomieplanung in der Mund-Kiefer-Gesichtschirurgie unter Berücksichtigung der räumlichen Weichgewebeanordnung*. Verlag Dr. Hut, Reihe Medizininformatik (2005)
- [18] S. Zachow, H.-C. Hege, P. Deuffhard: *Computer Assisted Planning in Cranio-Maxillofacial Surgery*. In: Journal of Computing and Information Technology – Special Issue on Computer-Based Craniofacial Modelling and Reconstruction, CIT 14(1), S. 1–12 (2006)
- [19] S. Zachow, H. Lamecker, B. Elsholtz, M. Stiller: *Is the course of the mandibular nerve deducible from the shape of the mandible?* Accepted for Publication in: Lemke, HU et al. (Hrsg.) Computer Assisted Radiology and Surgery, Int. Congress Series, Elsevier (2006)
- [20] S. Zachow, H. Lamecker, B. Elsholtz, M. Stiller: *Reconstruction of mandibular dysplasia using a statistical 3D shape model*. In: Lemke, HU et al. (Hrsg.) Computer Assisted Radiology and Surgery, Int. Congress Series (1281), Elsevier, S. 1238–1243 (2005)
- [21] S. Zachow, A. Steinmann, Th. Hildebrandt, R. Weber, W. Heppt: *CFD simulation of nasal airflow: Towards treatment planning for functional rhinosurgery*. Accepted for Publication in: Lemke, HU et al. (Hrsg.) Computer Assisted Radiology and Surgery, Int. Congress Series, Elsevier (2006)
- [22] 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*, In: Payan, Y. (Hrsg.) Biomechanics Applied to Computer Assisted Surgery, Research Signpost Publisher, Kap. 17, S. 277–298 (2005)

#### 2.2.4 Virtuelle Labore

Integrierte, anwendungsspezifische, durchgängig visuell unterstützte Softwaresysteme, *virtuelle Labors* genannt, erlauben es, berechnete und gemessene Daten zu importieren und Probleme aus dem jeweiligen Anwendungsbereich – nach Möglichkeit komplett – zu lösen.

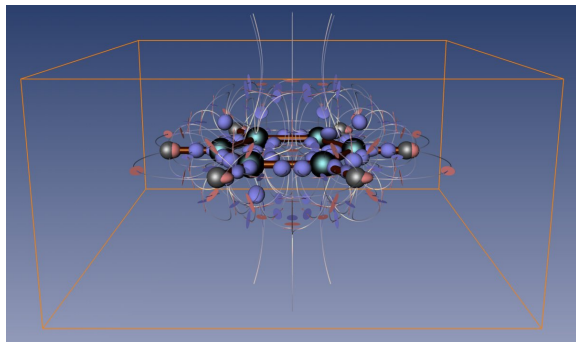
Im Folgenden werden virtuelle Labore für die Anwendungsgebiete Strömungsmechanik, Astrophysik, Neuroanatomie und Landschaftsplanung vorgestellt.

### Virtuelles Strömungslabor

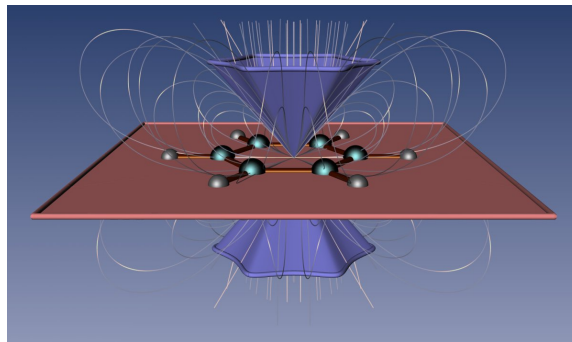
**Bearbeitet von:** Tino Weinkauff, Jan Sahner, Christoph Petz, Detlev Stalling, Hans-Christian Hege

**Kooperationspartner:** Bernd R. Noack, Bert Günter, 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; Dieke Hafermann, Hamburgische Schiffbau-Versuchsanstalt GmbH (HSVA) GmbH; Henk Prins, Marin, Niederlande; Leif Broberg, FLOWTECH International AB, Schweden; Alex Duffy, Zichao Wu, CAD Centre, University of Strathclyde, Großbritannien; Stefan Harries, FRIENDSHIP-Systems GmbH, Potsdam

**Förderung:** DFG-Sonderforschungsbereich 557 „Beeinflussung komplexer turbulenter Scherströmungen“; EU-Projekt 516201 „VIRTUE“



(a) 184 kritische Punkte finden sich in dem Datensatz vor der Vereinfachung. Die Box um das Molekül stellt das gewählte Gebiet für die Vereinfachung dar.



(b) Topologisch simplifizierte Repräsentation mit einem kritischen Punkt höherer Ordnung. Hierdurch wird das Fernfeld-Verhalten des Benzols deutlich.

ABBILDUNG 2.16: Topologische Vereinfachung am Beispiel des elektrostatischen Feldes des Benzol-Moleküls.

In diesem Projekt entsteht ein virtuelles Labor zur Visualisierung von Vektorfeldern, welches die in Amira vorhandenen Methoden erweitert und ergänzt. Dies beinhaltet insbesondere Methoden zur merkmalsbasierten Analyse von zeitabhängigen Strömungsfeldern [4].

Die 2004 entwickelten topologischen Verfahren zur Strömungsanalyse wurden 2005 durch Verfahren zur kohärenten Vereinfachung der extrahierten Strukturen erweitert (Abbildung 2.16). Diese Neuentwicklungen ermöglichen uns, auch komplizierteste topologische Strukturen auf visuell leicht verständliche ikonische Darstellungen zu reduzieren [10, 9]. Dies ist ein wesentlicher Baustein zur Komplettierung des topologischen Werkzeugkastens zur Strömungsanalyse in Amira. Erfolgreiche Anstrengungen wurden unternommen, die vorhandenen Werkzeuge auf Datensätze zu erweitern, die größer sind als der zur Verfügung stehende Hauptspeicher (*Out-of-Core-Ansatz*). Durch eine zeit-monotone Vorgehensweise sind wir in der Lage, alle topologischen Merkmale zu extrahieren, ohne Zeitschritte mehrmals zu laden.

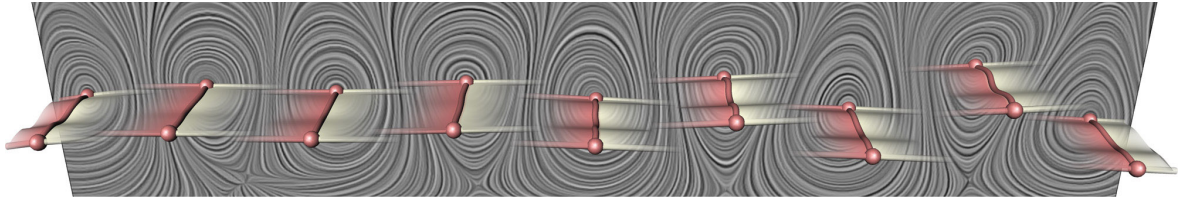


ABBILDUNG 2.17: In der Nachlaufströmung eines Zylinders werden Wirbelkernlinien mit ihrer zeitlichen Entwicklung angezeigt. Der Verlauf der Wirbelkernlinien in der Vergangenheit wird durch rote Flächen visualisiert, die durch unseren Ansatz ermöglichte exakte Voraussage der Zukunftsentwicklung wird weiß dargestellt.

Die 2004 begonnenen Vorarbeiten zur Wirbelextraktion in zeitunabhängigen Strömungen konnten im Berichtsraum maßgeblich auf zeitabhängige Strömungen erweitert werden. So sind wir durch Neuentwicklungen nun in der Lage, gefundene Wirbelmerkmale zeitlich zu verfolgen (Abbildung 2.17). Damit konnten wir das Korrespondenzproblem für Wirbelstrukturen in aufeinanderfolgenden Zeitschritten lösen [7, 8]. Dies stellt eine wesentliche Grundlage für den merkmalsbasierten Strömungsvergleich dar, den wir somit für die wichtige Strukturklasse der Wirbel durchführen können.

Bei dem Entwurf neuer Schiffsmodelle werden traditionell Experimente mit Schiffsmodellen durchgeführt, um die späteren Eigenschaften der Schiffe vorhersagen zu können. Diese Experimente sind sehr aufwendig und kostspielig, daher können sie jeweils nur für wenige Varianten eines Schiffes durchgeführt werden. In dem VIRTUE (VIRtual Tank Utility in Europe)-Projekt wird ein virtuelles Schiffsbassin entwickelt, bei dem mit Hilfe numerischer Methoden das Verhalten eines Schiffes simuliert wird. Darin werden der Wasserwiderstand eines fahrenden Schiffes, die Stabilität im Wasser bei Wellengang, Steuerungseigenschaften des Schiffes und Kavitationseffekte am Propeller untersucht. Damit wird es möglich, eine größere Anzahl von Schiffsvarianten zu untersuchen und Optimierungen der Schiffsformen durchzuführen.

Viele der Berechnungen werden auf Gittern durchgeführt, die aus mehreren Zonen bestehen, in einigen Fällen haben die verwendeten Gitter auch überlappende Zonen. Für die Visualisierung wurden Methoden für den Datenimport der verschiedenen Gitter- und Datenformate in Amira entwickelt. Die den Berechnungen zugrunde liegenden Gitter sind in den meisten Fällen stark adaptiv, die Zellgrößen unterscheiden sich um Größenordnungen. Für die Analyse der Rechenergebnisse ist es daher oft notwendig, die Visualisierungen auf einen Bruchteil des Rechengebietes beschränken zu können. Dazu wurden einige Visualisierungsmethoden in Amira angepasst, und die Datenstrukturen einiger Gittertypen wurden für adaptiv verfeinerte Gitter optimiert, so dass viele der Visualisierungstechniken gut skalieren.

Zur Vektorfeldvisualisierung wurde eine Methode zum Particle-Tracing in Amira integriert. Dabei werden massefreie Partikel in einem stationären Geschwindigkeitsfeld bewegt. Mit Hilfe dieser Animationen kann vor allem in der Nähe kritischer Punkte die Bedeutung der Topologie der Vektorfelder gut nachvollzogen werden.

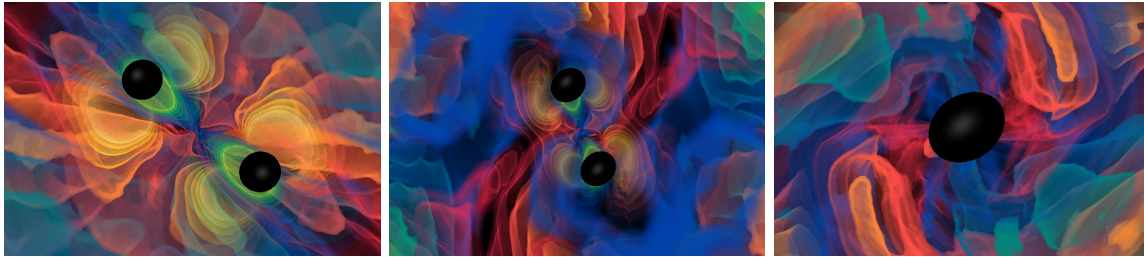


ABBILDUNG 2.18: Die Bilder zeigen drei Zeitschritte einer AMR-Simulation der Kollision zweier schwarzer Löcher. Diese Sequenz wurde für den im Auftrag der *National Science Foundation* produzierten Film „Einstein’s Messengers“ über das LIGO-Projekt verwendet.

### Virtuelles Astrophysik-Labor

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

**Kooperationspartner:** Ed Seidel, Louisiana State University, USA; Luciano Rezzolla, Albert-Einstein-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, Potsdam, Tom Abel, Kavli Institute for Particle Astrophysics and Cosmology, Stanford, USA

**Förderung:** Max-Planck-Gesellschaft

Ein Teil des Projektes befasst sich mit der Visualisierung von astrophysikalischen Daten, die auf einem bestimmten Typ lokal verfeinerter Hexaedergitter definiert sind (s. Abbildung 2.18). 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. Neben einer räumlichen Verfeinerung, in welcher Bereiche, in denen der lokale Fehler der Lösung zu groß ist, durch Blöcke höherer Auflösung überdeckt werden, wird eine zeitliche Verfeinerung durchgeführt. Das bedeutet, dass die Gleichungen auf den höher aufgelösten Zellen mit geringer zeitlicher Schrittweite gelöst werden. Die Ergebnis ist eine zeitabhängige Gittertopologie, in der die Daten auf den groben Verfeinerungsstufen, nicht zu jedem Zeitschritt gespeichert werden.

Ein im Rahmen dieser Kooperation entwickeltes Verfahren zur zeitlichen Interpolation und Visualisierung von SAMR-Simulationen wurde weiterentwickelt, um den Zugriff auf entfernte Rechner, üblicherweise die Supercomputer, auf denen die Simulation durchgeführt wurde, zu ermöglichen [5]. Ein Kernziel hierbei war die Interaktivität des Ansatzes durch eine Minimierung der benötigten Netzwerk-„Round-Trips“. Hierzu werden die Metadaten mittels sogenannter *Remote Procedure Calls (RPCs)* übertragen, während die eigentlichen Rohdaten über eine Socket-Verbindung asynchron im Hintergrund bereitgestellt werden. Der Ansatz unterstützt sowohl server- als auch client-seitige Interpolation der Daten, was je nach Anwendungsfall von Vorteil sein kann.

Die im Projekt entwickelten Visualisierungsverfahren wurden verwendet um mehrere Sequenzen für den im Auftrag der *National Science Foundation* produzierten Film „*Einstein's Messengers*“ über das *LIGO*-Projekt zur Detektion von Gravitationswellen zu erstellen.

### Virtuelles Neurolabor

**Bearbeitet von:** Hans-Christian Hege, Alexander Maye, Vincent Dercksen, Maro Bader, Peter Dulovits

**Kooperationspartner:** Randolph Menzel, Jürgen Rybak, Neurobiologie, FU Berlin

**Förderung:** Deutsche Forschungsgemeinschaft

In Kooperation mit der Arbeitsgruppe Menzel wurden Methoden zur Registrierung von hochaufgelösten histologischen Schnitten in den Standardatlas der Honigbiene untersucht. Die Schnittbilder (siehe Abbildung 2.19) haben durch Übersichtsmarkierungen mit z. B. der Ethylgallat- oder Bodianmethode einen hohen und gleichmäßigen Kontrast und eine sehr hohe Auflösung. Dadurch sind sehr feine Strukturen wie Neuronentrakte, Gliazellen und Somata sichtbar. Die Integration solcher detaillierten Aufnahmen in den Atlas macht eine genaue Zuordnung von rekonstruierten Neuronen zu definierten Gehirnstrukturen möglich.

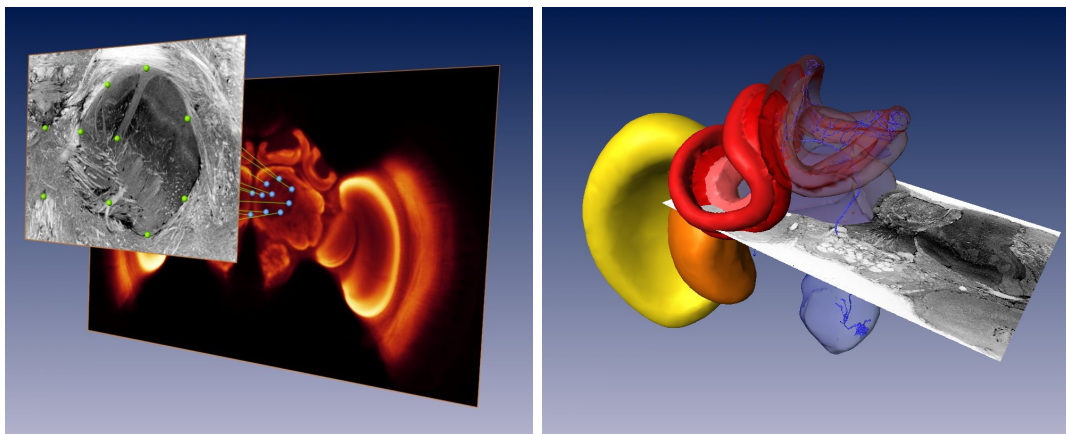


ABBILDUNG 2.19: Links: Registrierung von hochaufgelösten histologischen Schnitten in den Gehirnatlas. Rechts: Die Integration von Schnittbildern macht die genaue Zuordnung von rekonstruierten Neuronen zu Gehirnstrukturen möglich. Daten: J. Rybak, S. Kroczyk

Zusammen mit mehreren neurobiologisch orientierten Arbeitsgruppen wurde ein Konzept für eine überregionale Forschergruppe „Digitale Neuroanatomie“ erarbeitet und eine Förderung bei der DFG beantragt. Der Teilantrag des ZIB (eine Stelle) wurde positiv beschieden.

## Landschaftsvisualisierung

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

**Kooperationspartner:** Armin Werner, Wieland Röhrich, Institut für Landnutzungssysteme und Landschaftsökologie, Zentrum für Agrarlandschaftsforschung (ZALF) e. V., Münchenberg; Klaus Müller, Astrid Artner, Institut für Sozioökonomie am ZALF Münchenberg; 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 Rekittke, Lehrstuhl für Städtebau und Landesplanung, Fakultät für Architektur, RWTH Aachen; Adrian Herwig (freier Landschaftsarchitekt), Stechau; Hans Pretzsch, Stefan Seifert, Lehrstuhl für Waldwachstumskunde, TU München

**Förderung:** Deutsche Bundesstiftung Umwelt (DBU), Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF)

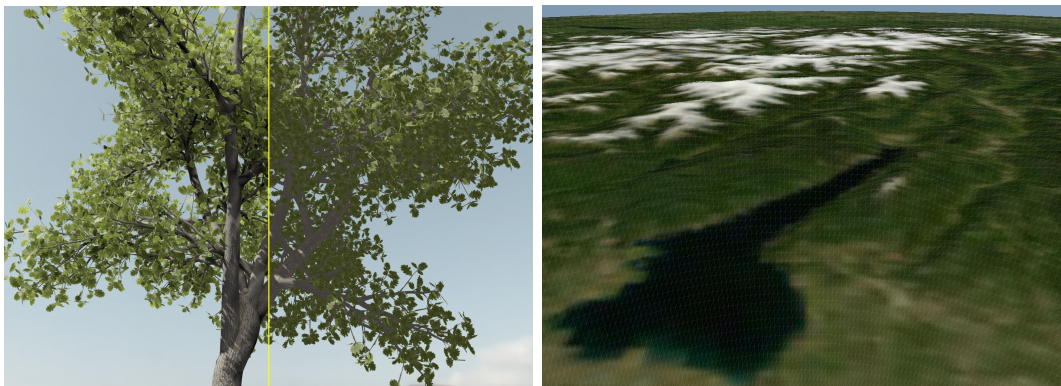


ABBILDUNG 2.20: Links: Beleuchtungsmodelle, links die globale Beleuchtung des Prototypen, rechts die übliche lokale Variante. Rechts: Das neue unlimitierte Geländemodell berücksichtigt die Erdkrümmung (Texturen: NASA).

Das 2005 abgeschlossene Projekt *Lenné3D* war ein Forschungsverbundvorhaben in den Bereichen Computergrafik, Landschaftsmodellierung und Landschaftsvisualisierung. Seit Mai 2002 wurde ein System zur interaktiven 3D-Landschaftsvisualisierung aus Spaziergängerperspektive und Kartensicht entwickelt. Mit *Lenné3D* sollen Bürgerbeteiligungen und Entscheidungsprozesse, insbesondere in der Landschaftsplanung, unterstützt werden. Im Rahmen der dreijährigen Projektlaufzeit lag der Schwerpunkt auf Vegetationsdarstellung, GIS-Daten und interaktivem Explorieren und Editieren von räumlichen Daten.

Das Nachfolgeprojekt *Silvisio* führt dies fort, wobei nun insbesondere die Darstellung von Waldlandschaften optimiert werden soll, wohingegen *Lenné3D* primär auf Agrarlandschaften ausgerichtet war. Dies spiegelt sich in einer höheren Priorität realistischer Beleuchtung wider, da indirektes Licht in Spaziergängerperspektive im Wald eine wesentliche Bedeutung hat. Dazu wurde ein Prototyp entwickelt, der unabhängig vom im Entwicklungszyklus schon weiter fortgeschrittenen *Lenné3D*-Player die Evaluierung neuer Techniken in Testszenarien ermöglichte (s. Abbildung 2.20, links).

Aus den Erfahrungen in der Anwendung des bisherigen Players und des Beleuchtungs-Prototypen wird nun in einem zweiten Schritt ein neuer Player 2.0 entwickelt. Diesem zugrunde liegt ein neues unlimitiertes Geländemodell, das unter Berücksichtigung der Erdkrümmung prinzipiell ganze Planeten verarbeiten kann (s. Abbildung 2.20, rechts). Obgleich nach wie vor die Landschaft aus Spaziergängersicht im Vordergrund steht, fällt damit die vorherige künstliche Einschränkung der Sichtweite weg.

Der Player 2.0 wird für Silvisio eine Schnittstelle zum Waldwachstumssimulator Silva der TU München erhalten. Somit wird es möglich, das dort vorhandene Wissen über die Waldentwicklung über mehrere Dutzend Jahre in den verschiedenen Darstellungsmodi zu visualisieren: Neben dem realistischeren Beleuchtungsmodell wurde auch das skizzenhafte Rendering weiterentwickelt, das sich insbesondere zur Veranschaulichung von Planungsszenarien eignet.

## Publikationen

- [1] M. Clasen, H.-C. Hege: *Realistic Illumination of Vegetation in Real-time Environments*. In: *Trends in Real-Time Landscape Visualization and Participation*, E. Buhmann, P. Paar, I. Bishop, E. Lange (eds.), Wichmann Verlag, S. 107–114, 2005.
- [2] L. Coconu, C. Colditz, H.-C. Hege, O. Deussen: *Seamless Integration of Stylized Renditions in Computer-Generated Landscape Visualization*, In: *Trends in Real-Time Landscape Visualization and Participation*, E. Buhmann, P. Paar, I. Bishop, E. Lange (eds.), Wichmann Verlag, S. 88–96, 2005.
- [3] O. Deussen, C. Colditz, L. Coconu, H.-C. Hege: *Efficient Modelling and Rendering of Landscapes*. In: *Trends in Real-Time Landscape Visualization and Participation*, E. Buhmann, P. Paar, I. Bishop, E. Lange (eds.), Wichmann Verlag, S. 56–61, 2005.
- [4] H.-C. Hege, T. Weinkauff, S. Prohaska, A. Hutanu: *Towards Distributed Visualization and Analysis of Large Flow Data* JSME Int. J. Series B 48(2), S. 241–246, 2005
- [5] R. Kähler, S. Prohaska, A. Hutanu, H.-C. Hege: *Visualization of Time-Dependent Remote Adaptive Mesh Refinement Data*, Proc. IEEE Visualization 2005, S. 175–182, Minneapolis, USA, October 2005
- [6] W. Röhricht, M. Clasen: *Multum, non multi - Hierarchische BitTrees bei der Pflanzenverteilung mit oik*, In: *Simulation in Umwelt- und Geowissenschaften*. Proc. of Workshop Dresden 2005, J. Wittmann, N.X. Thinh (eds.), Shaker, Aachen, 2005
- [7] J. Sahner, T. Weinkauff, H.-C. Hege: *Galilean Invariant Extraction and Iconic Representation of Vortex Core Lines*, Proc. Eurographics / IEEE VGTC Symposium on Visualization (EuroVis '05), K. Brodlie, D. Duke, K. Joy (eds.), Leeds, UK, June 2005
- [8] H. Theisel, J. Sahner, T. Weinkauff, H.-C. Hege, H.-P. Seidel: *Extraction of Parallel Vector Surfaces in 3D Time-Dependent Fields and Application to Vortex Core Line Tracking*, Proc. IEEE Visualization 2005, Minneapolis, USA, S. 80, 2005
- [9] H. Theisel, T. Weinkauff, H.-C. Hege, H.-P. Seidel: *Topological Methods for 2D Time-Dependent Vector Fields Based on Stream Lines and Path Lines* IEEE Trans. Vis. Comp. Graph., 11(4), 2005.

- [10] T. Weinkauff, H. Theisel, K. Shi, H.-C. Hege, H.-P. Seidel: *Topological Simplification of 3D Vector Fields by Extracting Higher Order Critical Points* Proc. IEEE Visualization 2005, Minneapolis, USA, S. 71, 2005.
- [11] A. Werner, O. Deussen, J. Döllner, H.-C. Hege, P. Paar, J. Reikittke: *Lenné3D: Walking through Landscape Plan*, in: *Trends in Real-Time Landscape Visualization and Participation*, E. Buhmann, P. Paar, I. Bishop, E. Lange (eds.), Wichmann Verlag, S. 48–59, 2005.

### 2.2.5 Geometrieverarbeitung

Arbeitsziel des Schwerpunktes „Geometrieverarbeitung“ ist es, Methoden der angewandten Geometrie mit denen der Numerik zu vereinigen und zu industriell verwertbaren Anwendungen zu führen. Diese *Arbeit an Schnittstellen der Geometrie* 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 eine Numerik schneller Löser für diese Operatoren andererseits. Dies ist die Schnittstelle, an welcher der Schwerpunkt „Geometrieverarbeitung“ ansetzt.

Der Leiter der Arbeitsgruppe „Geometrie und Visualisierung“, Konrad Polthier, erhielt 2005 Rufe auf Professuren an die Internationale Universität Bremen, die Technische Universität München und die Freie Universität Berlin.

#### Kompression topologischer und geometrischer Flächendaten

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

**Kooperationspartner:** mental images GmbH, Berlin

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

Der *FreeLence*-Algorithmus, vorgestellt auf der Eurographics-Konferenz 2005 ([4]), bietet die derzeit beste verlustfreie Kompression der Konnektivität digitaler Dreiecksnetze. Im Hinblick auf Anwendungen für externe Speicherung großer Datenmengen, der effizienten Übertragung solcher Daten im Netz sowie In-Memory-Speicherreduktion, liefert *FreeLence* neue Methoden zur *verlustfreien, speichereffizienten Darstellung* digitaler Flächen und bringt sie zur industriellen Anwendung. Der in diesem Projekt entwickelte Algorithmus nutzt diskrete Krümmungsinformationen, um die Konnektivität solcher Netze lokal besser voraussagen zu können (s. Abbildung 2.21. Anders als diverse populäre *Single-Rate-Kodierer*, beruht *FreeLence* auf der Analyse freier Valenzen. Insbesondere zeichnet sich *FreeLence* durch folgenden Merkmale aus, wodurch die bislang besten Kompressionsraten im Durchschnitt um 30% übertroffen werden:

- Die Kodierung von Konnektivität basierend auf freien Valenzen, kombiniert mit einem Geometrie-basierten Kodierungsschema.
- Die Kodierung von Geometrie (Raumposition von Punkten), basierend auf einem neuen lokalen Voraussagemuster, resultiert in Kompressionsraten.

Im Jahr 2005 wurde die Zusammenarbeit mit der Computergrafik-Firma *mental images GmbH* ausgebaut, und die Implementierung der in diesem Projekt entwickelten Ideen in Produkten



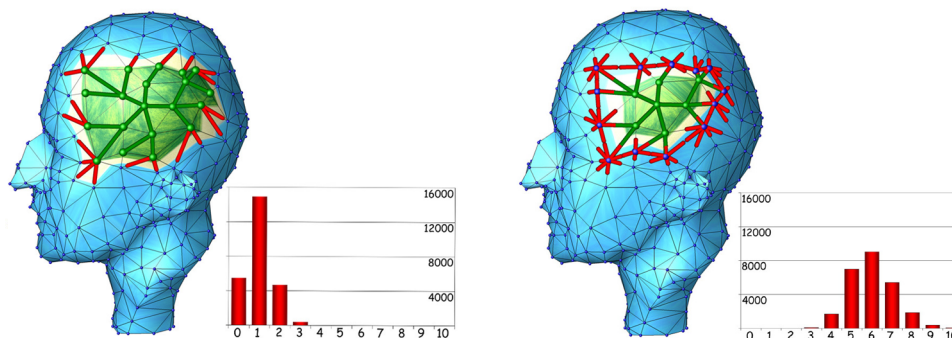


ABBILDUNG 2.21: Der FreeLence (FL)-Algorithmus (links) zeigt eine dichtere Symbolverteilung als der populäre Touma-Gotsman (TG)-Algorithmus (rechts). Dichtere Symbolverteilungen resultieren in besserer Komprimierbarkeit.

dieser Firma fortgesetzt. Die Firma mental images finanzierte hierzu zwei studentische Mitarbeiter. Seit 2006 wird die Kooperation an der FU Berlin fortgesetzt.

### Geometriebasierter Formvergleich

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

**Kooperationspartner:** Martin Seebaß, Mercury Computer Systems Inc.; Peter Wust, Johanna Gellermann, Klinik für Strahlentherapie, Charité, Campus Benjamin Franklin; Thomas Lange, Peter Schlag, Klinik für Chirurgie und Onkologische Chirurgie, Charité, Campus Berlin-Buch; Ernst-Johannes Haberl, Maja Zöckler, AG Pädiatrische Neurochirurgie, Klinik für Neurochirurgie, Charité, Campus Virchow-Klinikum; Barbara Elsholtz, Michael Stiller, Zentrum für Zahn-, Mund- und Kieferheilkunde, Charité, Campus Benjamin Franklin; Hansrudi Noser, Lukas Kamer, AO Foundation, Development Institute, Davos, Schweiz

**Förderung:** DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt F2)

Der Vergleich dreidimensionaler Formen spielt in vielen Disziplinen, von der Computergraphik bis hin zur Bildanalyse (siehe S. 72) und Medizin (siehe S. 45), 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 wurde ein Funktional erarbeitet, das die Ähnlichkeit zweier Formen auf Basis ihrer Charakterisierung durch das Fundamentaltheorem der Flächentheorie bewertet.

Eine besondere Herausforderung besteht in der Konstruktion einer diskreten Darstellung dieser Korrespondenzabbildung zur Minimierung des Funktionals. Bei dem im Berichtszeitraum untersuchten Ansatz werden die beiden Flächen in einfach zusammenhängende Gebiete (Zellen) zerlegt, die homöomorph zu einer Kreisscheibe sind. Diese Zerlegung geschieht in konsistenter Weise: die gegebene Abbildung zwischen den beiden zellulär eingebetteten Graphen soll zu einem Homöomorphismus der gesamten Flächen erweiterbar sein.

Aus Sicht der Anwendungen ist es oft erforderlich, eine Zerlegung auf einer „Referenzfläche“ vorzugeben und diese dann konsistent auf eine weitere Fläche zu übertragen. Im Berichtszeitraum wurde diese Fragestellung im Rahmen einer Diplomarbeit bearbeitet. Dazu wurde zunächst die Korrektheit eines von Praun, Schneider et al. [9] vorgeschlagenen Greedy-Algorithmus analysiert. Diese theoretischen Überlegungen basieren auf der formalen Beschreibung der Konsistenz zweier Einbettungen einer gegebenen zellulären Zerlegung durch Rotationssysteme von Graphen. Im Zusammenhang mit simplizialen Flächenkomplexen wurde ein Einbettungsschema für zelluläre Graphen entwickelt. Zu diesem Zweck wurde eine bekannte Datenstruktur erweitert und ein algebraisches Kriterium für die Einbettbarkeit des durch diese Struktur kodierten Graphen entwickelt.

### Glatte charakteristische Kurven auf digitalen Flächen

**Bearbeitet von:** Konrad Polthier, Klaus Hildebrandt, Max Wardetzky

**Kooperationspartner:** Tebis AG, München

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

*Feature lines* sind wesentliche charakteristische Linien auf Flächen im Raum und spielen eine zentrale Rolle bei der Flächenrekonstruktion (*Reverse engineering*). Die mathematische Definition von *Feature lines* beinhaltet Ableitungen dritter und vierter Ordnung, so dass die Stabilität ihrer Berechnung oft durch ungewolltes Rauschen (*Noise*) beeinträchtigt wird. In diesem Projekt wurde ein neuer und stabiler Algorithmus entworfen, der *Feature lines* mit höherer Genauigkeit produziert. Die folgenden Konzepte kommen dabei zum Tragen [2]:

- Eine neue Berechnungsmethode für *Feature lines* basierend auf diskreten Differentialoperatoren. Insbesondere bedarf diese Methode nicht einer Flächenapproximation höherer Ordnung.
- Die Methode wird ergänzt durch einen Filteralgorithmus für höhere Flächenableitungen, der einerseits die Stabilität der Erzeugung von *Feature lines* und andererseits deren Glattheit wesentlich verbessert (s. Abbildung 2.22).

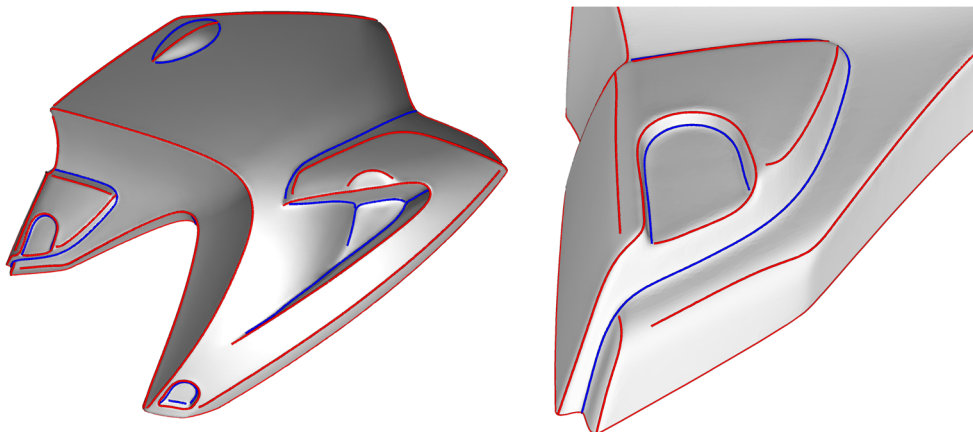


ABBILDUNG 2.22: Glatte *Feature lines* im Automobildesign (hier Teil eines BMW-Motorrades). Der in diesem Projekt entwickelte Algorithmus entstand in enger Kooperation mit der Tebis AG, München.

In Bezug auf industrielle Anwendungen und insbesondere in Zusammenarbeit mit der Tebis AG München, zielt das Auffinden glatter *Feature lines* auf ein Aufschneiden komplexer CAD-Flächen in elementare Gebiete ab. Hauptanliegen eines solchen Aufschneidens ist dabei die *Automatisierung* der manuellen Pipeline zur Flächenoptimierung in gängigen CAD-Systemen. Das automatische Erkennen von charakteristischen Linien ist hier einer der zentralsten Punkte. Diesbezüglich wurde die Kooperation mit der Tebis AG in diesem Projekt erfolgreich fortgesetzt.

Der Algorithmus wurde 2005 auf dem renomierten *Symposium on Geometry Processing* präsentiert[2].

### Kurvenoptimierung unter Nebenbedingungen

**Bearbeitet von:** Konrad Polthier, Klaus Hildebrandt, Eike Preuss

**Kooperationspartner:** Tebis AG, München

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

Dieses Projekt behandelt Algorithmen zum *Kurvenglätten unter räumlichen Nebenbedingungen*. In gängigen Design- und Produktionsprozessen (speziell im Automobile Design), werden 3D-Kurven mit einer glatten Krümmungsverteilung benötigt. Gleichzeitig müssen aus produktionstechnischen Gründen solche Kurven in einem millimetergenauen räumlichen Toleranzbereich liegen. In diesem Projekt werden Algorithmen untersucht, die auf einem vorgeschriebenen Krümmungsfluss basieren, und unter Zuhilfenahme hierarchischer Methoden der Numerik, schnelle Löser für das Kurvenglätten unter Nebenbedingung erzeugen [3], (siehe Abbildung 2.23).

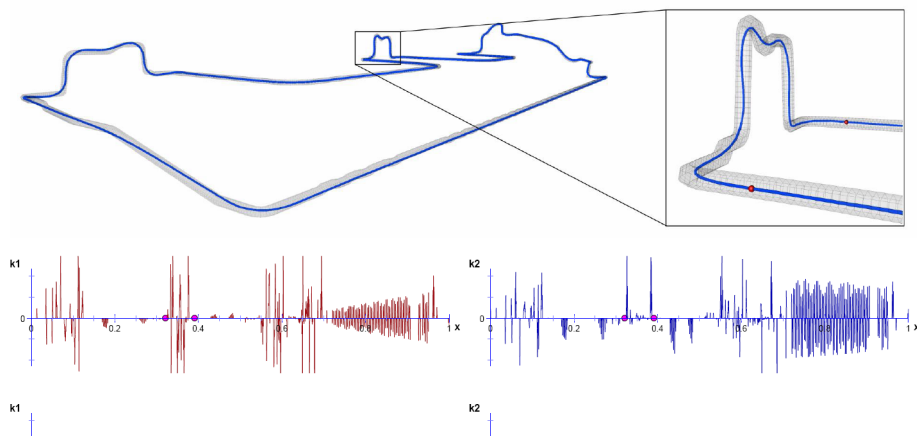


ABBILDUNG 2.23: Kurvendesign unter Nebenbedingungen mit Anwendungen im CAD-Bereich; Nebenbedingungen sind in grau dargestellt.

In Zusammenarbeit mit der *Tebis AG* München finden die in diesem Projekt entwickelten Verfahren breite Anwendung im Automobile Design. Insbesondere steht hier die Automatisierung einer manuellen und semi-automatischen Optimierungspipeline während des Designprozesses im Vordergrund. Die Tebis AG finanziert hierzu eine Doktorandenstelle.

## Diskrete Flächen und Krümmungsoperatoren

**Bearbeitet von:** Konrad Polthier, Klaus Hildebrandt, Max Wardetzky

**Kooperationspartner:** Eitan Grinspun, Columbia University, USA; Alexander Bobenko, Günter Ziegler, TU Berlin

**Förderung:** DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt F4

Dieses Projekt entwickelt mathematische Grundlagen zur diskreten Differentialgeometrie, die für Anwendungen in anderen Projekten der Geometrieverarbeitung unerlässlich sind. Insbesondere werden neue Finite-Elemente-Methoden auf gekrümmten *diskreten Flächen* studiert. Im Zentrum der Untersuchungen stehen dabei ein Differentialkalkül auf diskreten Flächen [7], und *Konvergenzaussagen* über entsprechende Operatoren [11]. 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 den Laplace-Beltrami-Operator, die mittlere Krümmung, den Hodge-Stern-Operator, sowie die diskrete Hodge-Zerlegung (siehe Abbildung 2.24) wurden solche Konvergenzaussagen erzielt, und die Theorie der *normalen Konvergenz* entwickelt [10, 1, 11].

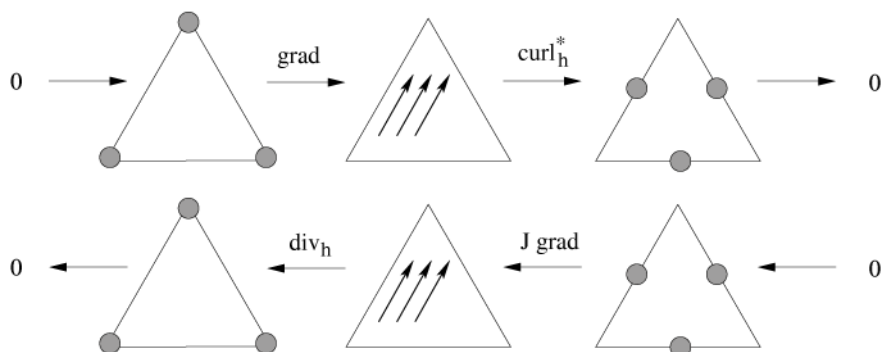


ABBILDUNG 2.24: Die *diskrete Hodge-Zerlegung* (oben: *primal*, unten: *dual*) konvergiert bei *normaler Konvergenz* der Flächen. Die mnemonischen Diagramme stellen die entsprechenden Räume dar: Lagrange-Elemente, stückweise konstante Vektorfelder, und Crouzeix-Raviart-Elemente.

Die in diesem Projekt entwickelten Grundlagen haben Bedeutung für numerische Verfahren in weiten Bereichen industrieller Anwendungen: 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 Generierung von Parametrisierungen von beliebigen diskreten Flächen.

In der Diplomarbeit von M. Nieser wurde die analytische Fortsetzbarkeit von diskreten Minimalflächen studiert und Eindeigkeitsresultate für den Spezialfall von Flächen aus planaren Vierecken erzielt. Es wurden mehrere neue diskrete Minimalflächen entdeckt, unter anderem eine diskrete Form der TT-Fläche [6], (siehe Abbildung 2.25).

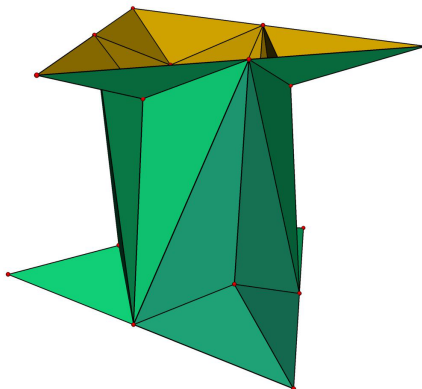


ABBILDUNG 2.25: Explizite Darstellung der diskreten Minimalfläche TT, deren glatte Variante von Karcher gefunden wurde.

### Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

**Konsistente Zellzerlegung von Oberflächen** (Philipp Beckmann, Hans Lamecker, Hans-Christian Hege; Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt F2)

Verschiedene Flächenmodelle miteinander in Korrespondenz zu setzen bedeutet bei Modellen mit identischer Topologie idealerweise sie durch Homöomorphismen zu realisieren. Ein Ansatz, eine solche Abbildung zwischen zwei Flächen global zu konstruieren, ist zunächst, sie in einzelne, einfach zusammenhängende Gebiete (Zellen) zu zerschneiden und für je zwei solcher korrespondierender Gebiete einen Teilhomöomorphismus aufzubauen. Diese können dann unter gewissen Konsistenzbedingungen an die kombinatorische Struktur der beiden Zellkomplexe zu einem gesamten Homöomorphismus zusammengefasst werden. Aus Sicht der Anwendungen ist es oft erforderlich, ein Schnittmuster, gegeben durch einen zellulär eingebetteten Graphen, auf einer „Referenzfläche“ vorzugeben und es dann konsistent auf eine weitere Fläche zu übertragen. Konsistent bedeutet hierbei die Forderung der Fortsetzbarkeit: die gegebene Abbildung zwischen den beiden Graphen soll zu einem Homöomorphismus der gesamten Flächen erweitert werden. Im Zentrum der Diplomarbeit steht ein Greedy-Algorithmus von E. Praun ([9]) zur konsistenten Übertragung eines zellulär in einer kompakten und orientierbaren Fläche eingebetteten Graphens auf eine weitere, dazu homöomorphe Fläche.

**Interaktive Bearbeitung von Kurven auf Dreiecksnetzen** (Britta Weber, Philipp Beckmann, Stefan Zachow, Hans Lamecker, Hans-Christian Hege; Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt F2)

Zur Analyse und Bearbeitung von Oberflächen stellt die interaktive Manipulation von in der Fläche eingebetteten Pfaden ein wichtiges Werkzeug dar, etwa zur Identifizierung von korrespondierenden Bereichen beim Morphing, beim Vermessen von Strecken oder der Definition von Schnittlinien für die Operationsplanung an virtuellen Patienten. Im Berichtszeitraum wurde ein Editor in AMIRA entwickelt, mit dem der Benutzer interaktiv Kurven auf Dreiecksnetzen definieren kann. Zur Verbindung zweier Punkte wurden verschiedene Strategien implementiert, die sich je nach Anwendung auswählen lassen: kürzester Weg entlang der Kanten des Dreiecknetzes, Kurve entlang des Schnittes mit einer Ebene und kürzester Pfad durch

das Innere der Dreiecke (sowie unterschiedlich effiziente, approximative Varianten). Die Flächen können schließlich entlang der so definierten Pfade retrianguliert und zerlegt werden, um z. B. das Layout einer Oberfläche zu verändern.

**Optimierung der Qualität von Dreiecksnetzen** (Michael Zilske, Hans Lamecker, Stefan Zachow, Hans-Christian Hege)

Dreiecksnetze, die zur Visualisierung oder numerischen Simulation verwendet werden, müssen bestimmten inneren Qualitätskriterien genügen (etwa keine langen, spitzen Dreiecke). Modelle, die z. B. aus optischen Aufnahmen oder aus implizit gegebenen Darstellungen rekonstruiert wurden, erfüllen diese Anforderungen oft nicht oder sind je nach Anwendung zu hoch aufgelöst. Remeshing hat zur Aufgabe, ein Gitter zu erzeugen, das vorgegebene Anforderungen an Knotenzahl, Regularität und Dreiecksqualität erfüllt und dabei eine möglichst geringe Abweichung von der Ausgangsgeometrie aufweist.

Es wurde ein Verfahren implementiert, bei dem das Ausgangsgitter anstelle einer kompletten Neuvergitterung durch eine Folge einfacher lokaler Operationen (Knoten verschieben und Kanten kippen, teilen oder kontrahieren) verbessert wird. Jede Operation wird nur dann durchgeführt, wenn das Gitter nicht über ein vorgegebenes Maß von der Ausgangsgeometrie abweicht. Das Verfahren liefert hochgradig reguläre Gitter, deren Knotenverteilung zudem noch durch vorgegebene Dichtefunktion (z. B. Krümmung, Abstandsmaß etc.) gesteuert werden können.

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

Dieses Projekt ist eine längerfristige 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] K. Hildebrandt, K. Polthier und M. Wardetzky. On the Convergence of Metric and Geometric Properties of Polyhedral Surfaces. Report 05-24, ZIB, 2005.
- [2] K. Hildebrandt, K. Polthier und M. Wardetzky. Smooth feature lines on surface meshes. In *Third Eurographics Symposium on Geometry Processing*, Seiten 85–90, 2005.

- [3] K. Hildebrandt, K. Polthier und E. Preuß. Evolution of 3D curves under strict spatial constraints. In *IEEE Proceedings on Ninth International Conference on Computer Aided Design and Computer Graphics (CAD/CG 2005)*, Seiten 40–45, 2005.
- [4] F. Kälberer, K. Polthier, U. Reitebuch, and M. Wardetzky, FreeLence – Coding with free Valences. *Comput. Graph. Forum*, Seiten 469–478, 2005.
- [5] K. Lange and K. Polthier, Anisotropic Fairing of Point Sets. Special Issue of CAGD, 2005.
- [6] M. Nieser, A Discrete TT Surface. *Electronic Geometry Model No. 2005.04.001*, 2005.
- [7] K. Polthier, Computational aspects of discrete minimal surfaces. In Joel Hass, David Hoffman, Arthur Jaffe, Harold Rosenberg, Richard Schoen, and M. Wolf, editors, *Global Theory of Minimal Surfaces*. AMS, 2005.
- [8] K. Polthier, Discrete Curvature and Surface Optimization. In Reiko Miyaoka and Kotaro Yamada, editors, *Integrable Systems, Geometry and Visualization*. 2005.
- [9] E. Praun, W. Sweldens and P. Schröder, Consistent mesh parameterizations. In *Proceedings of ACM SIGGRAPH 2001*, pp. 179–184 (2001).
- [10] M. Wardetzky. Convergence of the cotan formula – An overview. Preprint, ZIB, 2005. To appear in *Discrete Differential Geometry* (A. I. Bobenko, John M. Sullivan, Peter Schröder, Günter Ziegler, Hrsg.), Oberwolfach Seminars, Birkhäuser Basel.
- [11] M. Wardetzky, Discrete Differential Operators on Polyhedral Surfaces – Convergence and Approximation. Dissertationsschrift, Freie Universität Berlin, eingereicht 2006.

### 2.2.6 Bild- und Signalanalyse

Im Zentrum der Aktivitäten dieses Schwerpunkts standen die modellbasierte Segmentierung von 3D-Bilddaten, die Analyse der Knochenfeinstruktur, die 3D-Rekonstruktion aus hochaufgelösten Serienschnitten und die 3D-Operationsplanung bei muskuloskelettalen Erkrankungen. Neu hinzugekommen sind im letzten Jahr die Meteorologische Datenanalyse und die medizinische Bildverarbeitung in der pränatalen Diagnostik.

#### Meteorologische Datenanalyse

**Bearbeitet von:** Gerd Teschke

**Kooperationspartner:** Volker Lehmann, Deutscher Wetterdienst, Observatorium Linenberg; Frank Gekat, SELEX Sistemi Integrati GmbH (ehemals: AMS Gematronik GmbH), Neuss; Andreas Muschinski, University of Amherst, USA

**Förderung:** Deutsche Forschungsgemeinschaft, SELEX Sistemi Integrati GmbH

Für die mittel- und kurzfristige Wettervorhersage ist die Kenntnis über die Dynamik und den Zustand der erdnahen Atmosphäre notwendig. Physikalische Größen wie Wind, Niederschlag, Temperatur etc. können mittels Radar- oder akustischen Systemen gemessen werden. Bei der Verarbeitung von gemessenen Atmosphärendaten treten jedoch vielerlei Probleme auf. So hat man z. B. bei der Bestimmung von Niederschlagsfronten (Wetterradargeräte) das Anliegen, die Atmosphäre räumlich und zeitlich möglichst hoch aufzulösen, ohne dabei den „Weitblick“

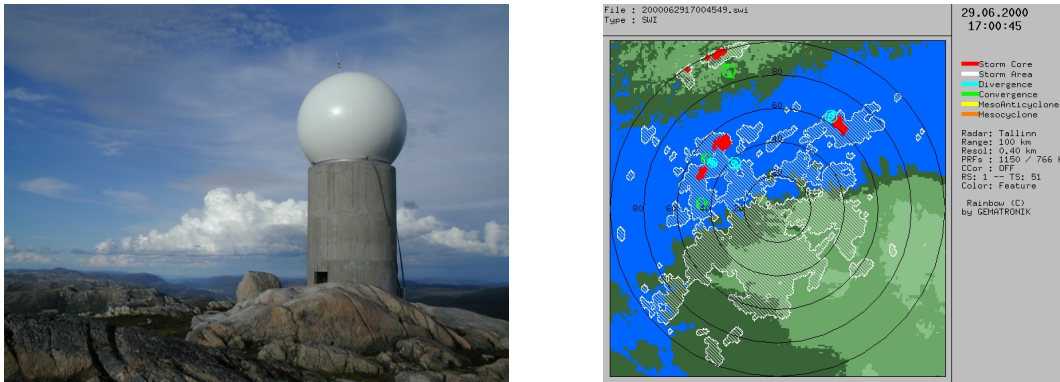


ABBILDUNG 2.26: Rechts: Wetterradargerät der Firma SELEX Sistemi Integrati GmbH in Norwegen, links: Niederschlagkarte.

des Radargerätes zu beeinträchtigen. Zudem können Flugobjekte (Vögel etc.) den Radarbeam durchqueren und so die gesamte Messung unbrauchbar machen.

In Zusammenarbeit mit der SELEX Sistemi Integrati GmbH wurden Ansätze entwickelt, das raum-zeitliche Auflösungsvermögen (Range-Doppler-Dilemma) von Wetterradargeräten (siehe Abbildung 2.26) zu erhöhen. Die Lösung des Problems bestand darin, optimale Abtastfunktionen zu konstruieren, die trotz Überlagerung der reflektierten Pulse eine hinreichend gute Rekonstruktion der Atmosphäreninformationen zulassen. Mathematisch muss hierbei ein Gleichungssystem gelöst werden, dessen Gut- bzw. Schlechtgestelltheit von den konstruierten Abtastfunktionen abhängt. Erste Simulationen wurden zusammen mit L. Cruz Martin (University of Bogota) durchgeführt, und im Rahmen der Diplomarbeit von H. Verwold (Universität Bremen, 2005) wurden verbesserte Löser für Gleichungssysteme und Verfahren zur optimalen Berechnung der Dopplerinformation entwickelt. Momentan werden die von uns entwickelten Verfahren an realen Messdaten von Wetterradargeräten der Firma SELEX Sistemi Integrati getestet.

In einer Kooperation mit dem Deutschen Wetterdienst (DWD) und der University of Amherst wurden Algorithmen entwickelt, Störkomponenten aus Windprofiler-Radarechos zu eliminieren. Die Algorithmen basieren auf einer Frame-Darstellung des Radarechos. So werden auf hochredundante Weise alle Signalkomponenten erfasst und dargestellt. Unter Ausnutzung statistischer Verteilungscharakteristiken der verschiedenen atmosphärischen und nichtatmosphärischen Radarechokomponenten wurde ein Klassifikator entwickelt, der auf effiziente Weise nichtatmosphärische Echokomponenten detektiert, siehe [11, 5]. Die entwickelten Algorithmen werden derzeit vom DWD bei der Bereinigung von Windprofilermessungen getestet.



## Medizinische Bildverarbeitung – pränatale Diagnostik

**Bearbeitet von:** Gerd Teschke, Mariya Zhariy

**Kooperationspartner:** Hubert Preissl, Universität Tübingen, MEG-Zentrum; Chris Lowery, University of Arkansas for Medical Sciences Little Rock, USA; Ingrid Daubechies, PACM, Princeton University, USA

**Förderung:** National Institutes of Health (NIH) Subcontract, Rockville Pike, USA; Deutsche Forschungsgemeinschaft

Die Analyse von Uteruskontraktionen schwangerer Frauen und der fetalen Gehirnaktivität ist ein junges Forschungsgebiet in der pränatalen Diagnostik, das im wesentlichen durch jüngste Weiterentwicklungen der medizinischen Gerätetechnik motiviert wird. Bisher konnten Uteruskontraktionen und fetale Aktivitäten nur lokal gemessen werden. Mit dem 151-channel-SQUID-fMEG-System (SARA, siehe Abbildung 2.27), wurde ein Gerät konstruiert, das es erstmals erlaubt, großflächig Magnetfelder zu messen und eine 2-dimensional-topografische Darstellung zu erzeugen. SARA ist ein stationäres Instrument auf dem die Mutter sitzt und ihren Bauch in das anatomisch geformte Sensorarrayfeld lehnt. Das Sensorfeld ist so gekrümmt, dass es eine schwangere Bauchregion mit einer Gesamtfläche von  $1300 \text{ cm}^2$  abdecken kann.

Schwerpunkt unserer Kooperation ist zunächst die Separation einzelner Signalkomponenten (Herzschlag Mutter und Fetus, Uteruskontraktion, Gehirnaktivität des Fetus etc.) aus dem abgeleiteten Signal und darauf aufbauend eine Uteruskontraktionsanalyse sowie eine 3-dimensionale Rekonstruktion/Inversion der Fetusaktivitäten.

Die Zerlegung in die verschiedenen Signalkomponenten, siehe [1, 16], ist im Allgemeinen eine schwierige Aufgabe, da sich z. B. der Herzschlag der Mutter von der Gehirnaktivität des Fetus um einige Größenskalen unterscheidet. Die Uteruskontraktionsanalyse setzt zunächst eine saubere Elemenierung aller Nichtkontraktionskomponenten voraus, wobei die letztendlich zu beantwortende medizinische Fragestellung hierbei lautet: Lassen sich aus raum-zeitlich orientierten Kontraktionsmustern Schwangerschaftsrisiken ableiten? Dazu müssen zunächst Kontraktionsmuster definiert werden. Dies geschieht über eine Grundmenge von Testpersonen, von denen „kontraktionsgetriggerte“ Daten erzeugt werden. Nach Auswahl geeigneter Merkmalstrukturen wird damit ein Klassifikator, [13], trainiert, der eine Abbildung von den Messdaten in den Entscheidungsraum – Kontraktion, keine Kontraktion – darstellt und nun Grundlage für die Generierung von raum-zeitlichen Kontraktionsmustern ist, siehe Abbildung 2.27, [12]. Auf diesen wird nun eine Bewegungsanalyse durchgeführt, die als Grundlage für medizinische Bewertungen dient.

Bei der Detektion und Lokalisierung der fetalen Gehirnaktivität ist nun ein inverses Problem zu lösen. Hierbei nehmen wir an, dass die elektrischen Quellen und das elektrische Feld über die Poisson-Gleichung mit Neumann-Randbedingungen in Verbindung stehen. Messbar ist allerdings nur das elektrische Feld in diskreten Punkten am Körperwand. Somit ist das zu invertierende Vorwärtsproblem die Abbildung, die jedem Paar – bestehend aus Konduktivität und elektrischen Quellen – ein elektrisches Feld am diskret abgetasteten Rand zuordnet. Da anders als bei bisher benutzten Methoden die Konduktivitätsfunktion nicht als gegeben eingeht, das Problem unterbestimmt ist, und zudem nur verrauschte Messdaten zur Verfügung stehen, ist das inverse Problem nichtlinear und schlecht gestellt. Bisher wurden Verfahren für nichtlineare Operatorgleichungen entwickelt, siehe [18, 17, 14, 15], die auf die vorgegebene Problemstruktur passen und für die Konvergenz- und Regularisierungsergebnisse bewiesen wurden.

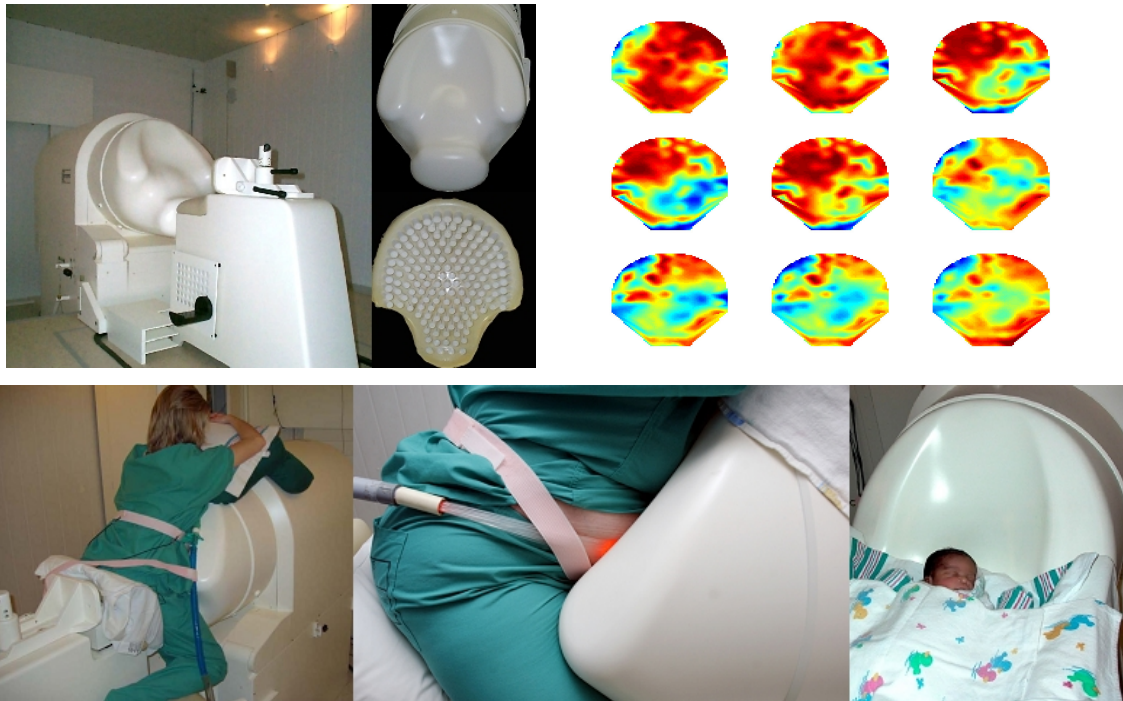


ABBILDUNG 2.27: Oben links: 151-channel-SQUID-fMEG-System, oben rechts: 2-dimensionale topografische Darstellung der Uteruskontraktionen über mehrere Zeitschritte, unten: schwangere Frau und Baby in Messapparatur.

### Modellbasierte Segmentierung von 3D-Bilddaten

**Bearbeitet von:** Hans Lamecker, Antonia Wittmers, Hans-Christian Hege, Peter Deuffhard

**Kooperationspartner:** Martin Seebaß, Mercury Computer Systems; Peter Wust, Johanna Gellermann, Klinik für Strahlentherapie, Charité, Campus Benjamin Franklin; Thomas Lange, Peter Schlag, Klinik für Chirurgie und Onkologische Chirurgie, Charité, Campus Berlin-Buch; Ernst-Johannes Haberl, Maja Zöckler, AG Pädiatrische Neurochirurgie, Klinik für Neurochirurgie, Charité, Campus Virchow-Klinikum; Barbara Elsholtz, Michael Stiller, Zentrum für Zahn-, Mund- und Kieferheilkunde, Charité, Campus Benjamin Franklin; Hansrudi Noser, Lukas Kamer, AO Foundation, Development Institute, Davos, Schweiz

**Förderung:** DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt F2

Bildsegmentierung ist eine der grundlegenden Aufgaben der quantitativ orientierten bio-medizinischen Bildanalyse. Sie ist unter anderem Voraussetzung für computergestützte Therapie- und Operationsplanung (siehe S. 44). 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, Grauwertver-

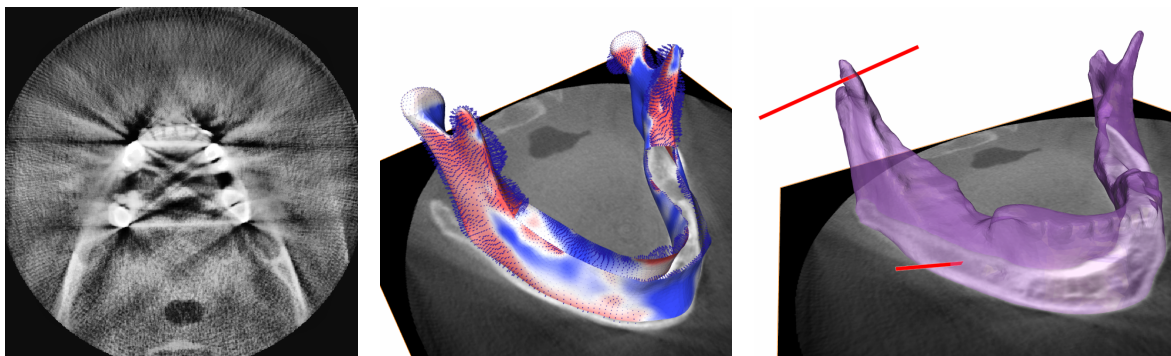


ABBILDUNG 2.28: Modellbasierte Segmentierung eines Unterkiefers aus Niedrigdosis-CT-Daten (NewTom DVT-Scanner).

teilung und Textur der zu segmentierenden Objekte geschehen. Ziel dieses Projektes ist die Entwicklung von Methoden zur Nutzung von solchem a-priori Wissen im Segmentierungsprozess.

Am ZIB wurde in den vergangenen Jahren ein Verfahren entwickelt, statistisches Vorwissen über die Variabilität von anatomischen Formen in den Segmentierungsvorgang einfließen zu lassen, siehe [7, 19]). Dazu werden parallel Verfahren zur quantitativen Analyse interindividueller anatomischer Variationen entwickelt (siehe S. 63). Die Aufgabe der Segmentierung liegt somit darin, die Freiheitsgrade eines statistischen Modells so zu bestimmen, dass es das zu segmentierende Objekt in den Bilddaten möglichst genau beschreibt. Das Verfahren wurde im Berichtszeitraum verbessert und erweitert. Neben der klinischen Anwendung – etwa bei der Behandlung von Craniosynostosen [10, 8] – begannen wir damit, neue Anwendungen im Bereich der MKG-Planung (siehe S. 2.2.3) zu erschließen: so sollen mit unserem Ansatz in Zukunft Unterkiefer aus Niedrigdosis-CT-Daten (Abbildung 2.28, siehe [9]) sowie Schädelknochen aus MRT-Daten segmentiert werden.

### Analyse der Knochenfeinstruktur

**Bearbeitet von:** Steffen Prohaska, Hans-Christian Hege

**Kooperationspartner:** Peter Fratzl, Peter Saporin und Richard Weinkamer Max-Planck-Institut für Kolloid- und Grenzflächenforschung, Golm; Gisela Beller, Wolfgang Gowin und Dieter Felsenberg, Zentrum für Muskel- und Knochenforschung Charité, Campus Benjamin Franklin; 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)

Die zweite Phase (2003 bis 2005) des Projekts „2D and 3D Quantification of Bone Structure and its Changes in Microgravity Condition by Measures of Complexity“ wurde erfolgreich abgeschlossen. Ein Gesamtüberblick über das Projekt findet sich in [4]. Aus Sicht der Visualisierung standen komplette Wirbelkörper in einer Auflösung von etwa  $40 \mu$ , die in einem Mikro-CT aufgenommen wurden, im Fokus. 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.

Unter anderem wurden komplette Wirbelkörper vor und nach einem Bruchtest aufgenommen, um Veränderungen in der Knochenfeinstruktur zu untersuchen. Mit Hilfe eines halb-automatischen Verfahrens gelang es, Mikro-Brüche aufzuspüren. Dabei werden in den beiden Mikro-CT-Aufnahmen manuell Landmarken gesetzt. Eine nachfolgende automatische Registrierung transformiert die Bilddaten in ein gemeinsames Koordinatensystem. Der Abstand zwischen den Oberflächen der beiden Knochenstrukturen weist auf Veränderungen hin, die wie in Abbildung 2.29 visualisiert werden können.

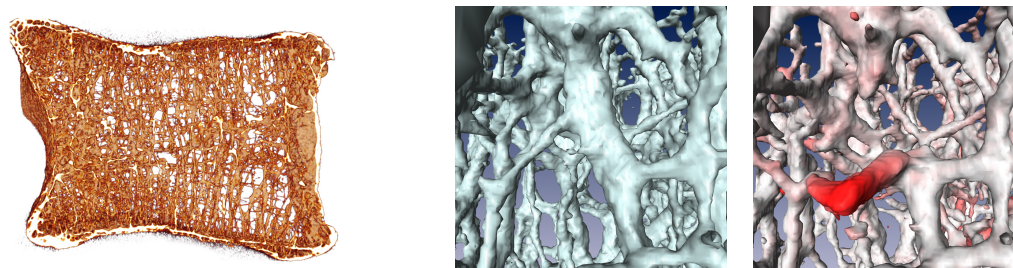


ABBILDUNG 2.29: Links: Schnitt durch eine Mikro-CT-Aufnahme eines Wirbelkörpers. Gesamtgröße des Datensatzes: ca. 8 GB bei einer Voxelgröße von  $37 \mu$ . Rechts: Knochenfeinstruktur vor und nach einem Bruchtest im Detail. Durch ein halb-automatisches Verfahren wurde ein Mikrobruch gefunden, der ganz rechts dargestellt ist.

### 3D-Rekonstruktion aus hochaufgelösten Serienschnitten

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

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

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

Das ZIB 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, schnelleren und qualitativ besseren Rekonstruktion von 3D-Pflanzenmodellen aus hochaufgelösten Serienschnitten zu entwickeln. Die Bilddaten sind aufgrund der manuellen und aufwendigen Präparation mit vielerlei Artefakten behaftet. Sie werden in mehreren aufeinanderfolgenden Schritten verarbeitet: Zusammensetzung und Alignierung der Schnittbilder, Bildsegmentierung in 2D oder 3D, Rekonstruktion der Außenfläche und der inneren Trennflächen, Glätten und Simplifizieren der resultierenden Polygonmodelle. Auch die Integration von Genexpressionsdaten und anderen Informationen in solche 3D-Modelle soll untersucht werden. Ein zusätzliches Problem ist die Größe der Datensätze, die die Größe des Hauptspeichers von herkömmlichen Rechnern häufig übersteigt, so dass *Out-of-Core*-Verfahren notwendig sind.

Alle Schritte zur Modellerstellung wurden im Rahmen des 3D-Visualisierungssystem Amira implementiert und erfolgreich zur Erstellung von 3D-Modellen von Gerstenkörnern in verschiedenen Entwicklungsstadien eingesetzt [2]. Der Schwerpunkt der Arbeiten im Jahr 2005 lag auf der Entwicklung von Methoden zur elastischen Registrierung von Bildstapeln (Abbildung 2.30). Ziel ist die nicht-linearen Verzerrungen der physikalischen Schnitte, verur-

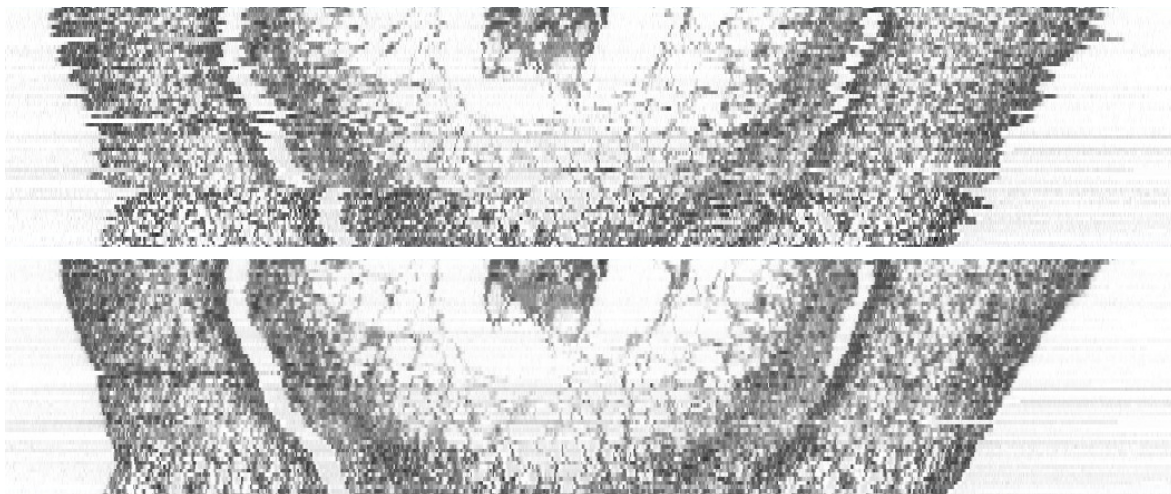


Abbildung 2.30: Registrierung eines Bildstapels eines Teils eines Gerstenkorns. Oben: starr registriert. Unten: zunächst starr, dann elastisch registriert. Daten: S. Gubatz, IPK Gatersleben

sacht durch die Schneide- und Glättungsprozesse, rechnerisch zu beheben. Die Verzerrungen verhindern, dass aufeinanderfolgende Schichten perfekt aufeinander passen, was zu einem unglatten Modell führt (s. Abbildung 2.30). Die Registrierung wird als Minimierung eines Funktionals modelliert, das aus einem Distanzmaß und einem Regularisierer auf Basis des elastischen Potentials des Verschiebungsfeldes besteht. Zur Lösung der resultierenden Navier-Lamé-Gleichungen wurde ein schneller Algorithmus [20] implementiert und verbessert, so dass die Methode robuster funktioniert wenn einzelne Bilder Defekte aufweisen, wie Risse, Falten oder extreme Helligkeitsunterschiede.

Die Methode iteriert über den ganzen Bildstapel bis der optimale Satz von Deformationen für jede Schicht gefunden wurde. In einer Iteration werden die Deformationen der Schichten unabhängig voneinander verbessert auf Basis des deformierten Stapels der letzten Iteration. Damit eignet sich das Verfahren für Parallelisierung und für die Verarbeitung von Out-of-Core-Datensätzen [3].

### **Integrierte Softwareumgebung für die computergestützte 3D-Operationsplanung bei muskuloskelettalen Erkrankungen**

**Bearbeitet von:** Detlev Stalling, Thomas Wenckebach, Hans Lamecker, Hans-Christian Hege

**Kooperationspartner:** Olaf Etmuss, Mercury Computer Systems; Markus Heller, Georg Duda, Norbert P. Haas, Charité, Campus Virchow-Klinikum

**Förderung:** Europäischer Fonds für regionale Entwicklung (EFRE)

Der künstliche Gelenkersatz der Hüfte ist ein Standardverfahren zur Behandlung degenerativer Gelenkerkrankungen. Allein in Deutschland werden jährlich ca. 120.000 Hüftendoprothesen implantiert. Obwohl bekannt ist, dass die Belastungen des Hüftgelenkes eine wesentliche Rolle für die langfristige Funktion und den Erfolg des künstlichen Gelenkersatzes spielen, stehen dem Chirurgen bei der Planung des Eingriffes derzeit keine validen Informationen zur erwarteten Gelenkbelastung zur Verfügung. Die computergestützte Planung soll daher helfen, den Erfolg der Behandlung zu verbessern. Dazu sollen die auftretenden Kräfte und Belastungen

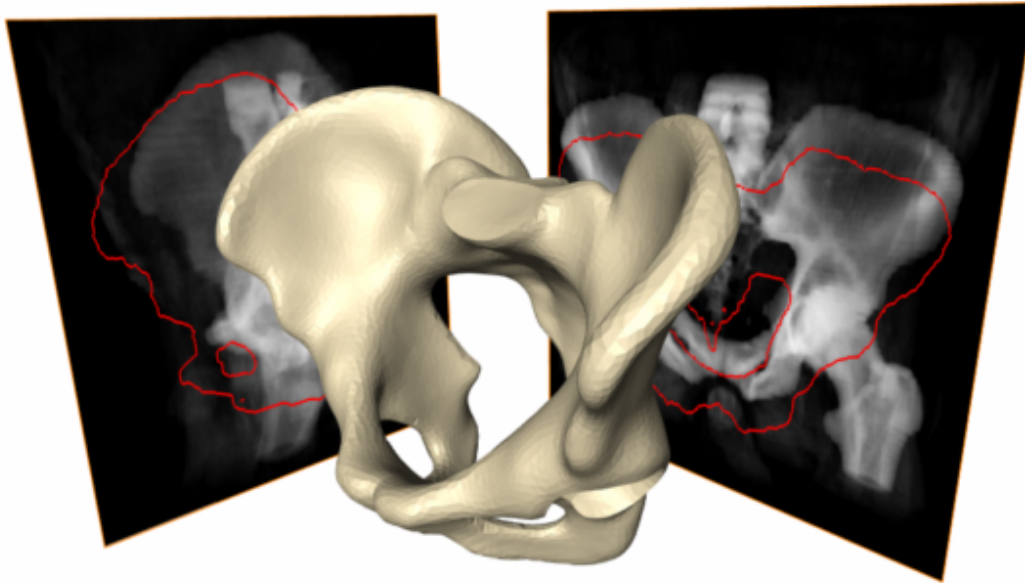


ABBILDUNG 2.31: Registrierung eines 3D-Formmodells mit zwei Röntgenbildern.

des Gelenkes vor und nach dem Eingriff mit Hilfe validierter biomechanischer Modelle berechnet werden, um eine möglichst optimale biomechanische Rekonstruktion des Hüftgelenkes für jeden Patienten gewährleisten zu können. Häufig liegt aber einer computergestützten Operationsplanung lediglich ein Satz von wenigen 2D-Röntgenbildern zugrunde. Die Herausforderung besteht somit darin, auf Basis solcher Daten Rückschlüsse auf die 3D-Anatomie des Patienten zu ziehen.

Zu diesem Zweck wurde ein Rekonstruktionsverfahren entwickelt, bei dem ein statistisches Modell des Beckenknochens mit gegebenen Röntgenbildern registriert wird [6]. Die Freiheitsgrade des Modells sind im Allgemeinen die statistischen Formparameter, seine Lage und Orientierung im Raum und die Position und Orientierung der Kamera. Die optimalen Werte werden durch Minimierung des Abstandes der Silhouetten des projizierten Modells und des Beckens in den Röntgenbildern bestimmt (siehe Abbildung 2.31). Das Verfahren wurde an 23 synthetisch erzeugten Datensätzen validiert. Die gemessenen Fehler liegen mit einer Größenordnung von wenigen Millimetern in einem Bereich, der erwarten lässt, dass evtl. bereits aus einer einzigen Projektion eine für die Berechnung der Belastungsbedingungen hinreichende Abschätzung der 3D-Geometrie möglich ist.

## Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

### Patientenspezifische Analyse zerebraler Aneurysmen

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

**Kooperationspartner:** Leonid Goubergrits, Klaus Affeld, Labor für Biofluidmechanik, Charité, Campus Mitte; Andreas Spuler, Neurochirurgische Klinik, Charité, Campus Berlin-Buch

In dem Berichtszeitraum wurden Vorarbeiten für ein Projekt zur patientenspezifische Analyse zerebraler Aneurysmen durchgeführt. Die Ursachen für eine spontane Ruptur eines zerebralen Aneurysmas sind bisher nicht ausreichend geklärt. Gewebeveränderungen, induziert durch die Wandschubspannung der Strömung des Blutes durch das Aneurysma, können das Risiko wesentlich beeinflussen. Diese Veränderungen können auch durch moderne bildgebende Verfahren nicht aufgelöst werden. In diesem Forschungsvorhaben wird von der Segmentierung der Aneurysmen, deren Geometrierekonstruktion bis zur Analyse der berechneten Blutdurchströmungen eine patientenspezifische Methodik zur Risikoanalyse zerebraler Aneurysmen entwickelt. Dazu wurde ein Förderantrag bei der DFG gestellt.

### Publikationen

- [1] I. Daubechies and G. Teschke. Variational image restoration by means of wavelets: simultaneous decomposition, deblurring and denoising. *Applied and Computational Harmonic Analysis*, 19(1):1-16, 2005.
- [2] V. J. Dercksen, C. Brüß, D. Stalling, S. Gubatz, U. Seiffert, H.-C. Hege: *Towards Automatic Generation of Biological 3-D Models on Basis of Serial Sections*. To be submitted to IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics, 2006.
- [3] V. J. Dercksen, S. Prohaska, H.-C. Hege: *Fast Cross-sectional Display of Large Data Sets*. Proc. of the Ninth IAPR Conference on Machine Vision Applications 2005, Tsukuba, Japan, S. 336-339, 2005.
- [4] ESA-MAP-Team AO-99-030. Assessment of bone structure and its changes in microgravity. In A. Wilson, editor, *SP-1290: Microgravity Applications Programme: Successful Teaming of Science and Industry*, pages 282–305. European Space Agency, 2005.
- [5] V. Lehmann and G. Teschke. A new intermittent clutter filtering algorithm for radar wind profiler. *under review*, 2006.
- [6] H. Lamecker, T. H. Wenckebach, H.-C. Hege, G. N. Duda, M. O. Heller: *Atlas-basierte 3D-Rekonstruktion des Beckens aus 2D-Projektionsbildern*. in: *Bildverarbeitung für die Medizin 2006: Algorithmen – Systeme – Anwendungen*, H. Handels et al. (eds), Springer, S. 26–30, 2006.
- [7] H. Lamecker, S. Zachow, H. Haberl, M. Stiller: *Medical Applications for Statistical Shape Models*. In: Weber, S. et al. (Hrsg.) *Computer Aided Surgery around the Head*, Fortschritt-Berichte VDI 17(258), S. 61, 2005.
- [8] H. Lamecker, S. Zachow, H.-C. Hege, M. Zöckler, H. Haberl: *Surgical Treatment of Craniosynostosis based on a Statistical 3D-Shape Model: First Clinical Application*. Accepted for Publication in: Lemke, HU et al. (Hrsg.) *Computer Assisted Radiology and Surgery*, Int. Congress Series, Elsevier, 2006.

- [9] H. Lamecker, S. Zachow, A. Wittmers, B. Weber, H.-C. Hege, B. Elsholtz, M. Stiller: *Automatic Segmentation of Mandibles in Low-Dose CT-Data*. Accepted for Publication in: Lemke, HU et al. (Hrsg.) *Computer Assisted Radiology and Surgery*, Int. Congress Series, Elsevier, 2006.
- [10] H. Lamecker, M. Zöckler, H. Haberl, S. Zachow, H.-C. Hege: *Statistical Shape Modeling for Craniostylosis Planning*. 2. Int. Conf. on Advanced Digital Technology in Head and Neck Reconstruction, Banff, Alberta, CA, 10.–13. März, S. 60, 2005.
- [11] A. Muschinski, V. Lehmann, L. A. Justen, and G. Teschke. Advanced radar wind profiling. *Meteorologische Zeitschrift*, 5(14):609–626, 2005.
- [12] H. Preissl, G. Teschke, and M. Zhariy. Detection and classification of uterine conatractions. *preprint*, 2005.
- [13] M. Rätsch, S. Romdhani, G. Teschke, and T. Vetter. Overcomplete Wavelet Approximation of a Support Vector Machine for Efficient Classification. *Springer Lecture Notes in Computer Science: Pattern Recognition: 27th DAGM Symposium, Vienna, Austria, August 31 – September 2005, Editors: Walter G. Kropatsch, Robert Sablatnig, Allan Hanbury*, page 351ff, 2005.
- [14] R. Ramlau and G. Teschke. A Tikhonov-Based Projection Iteration for Nonlinear Operator Equations with Sparsity Constraints. *under review*, 2005.
- [15] R. Ramlau and G. Teschke. Tikhonov Replacement Functionals for Iteratively Solving Nonlinear Operator Equations. *Inverse Problems*, 21:1571–1592, 2005.
- [16] G. Teschke. Multi-Frame Representations in Linear Inverse Problems with Mixed Multi-Constraints. *DFG-SPP-1114 preprint 90, under review*, 2005.
- [17] G. Teschke. Multi-Frames in Thresholding Iterations for Nonlinear Operator Equations with Mixed Sparsity Constraints. *DFG-SPP-1114 preprint 131, under review*, 2005.
- [18] G. Teschke. Operator Equations, Mixed Constraints, Frame Based Iterative Concepts and Application. *Habilitation thesis, Bremen*, 2005.
- [19] T. H. Wenckeback, H. Lamecker, H.-C. Hege: *Capturing Anatomical Shape Variability Using B-spline Registration*. Proc. Information Processing in Medical Imaging (IPMI'05), Gary E. Christensen and Milan Sonka (eds.), LNCS Vol. 3565, Springer, S. 578–590, 2005.
- [20] S. Wirtz, B. Fischer, J. Modersitzki, O. Schmitt: *Super-fast elastic registration of histologic images of a whole rat brain for three-dimensional reconstruction*. Proceedings of SPIE Vol. 5370, Medical Imaging, San Diego, pp. 328-334, 2004.

### 2.2.7 Nichtlineare Optimierung und optimale Steuerung

Nichtlineare Ansätze verfolgen wir zur Steuerung komplexer Systeme mit gewöhnlichen oder partiellen Differentialgleichungen. Bei funktionenraumbasierten Innere-Punkte-Methoden mit Blick auf Hyperthermieplanung und im Projekt zur Betriebsplanung in Trinkwasserversorgungsnetzen ist die adäquate Behandlung der Differentialgleichungen wesentlich. Charakteristisch für das letztgenannte Projekt ist zusätzlich die Komplexität, die das 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 bezüglich der Zeit, die mit Sparse-Solvern zur Ausnutzung der Netztopologie gekoppelt werden. Bei funktionenraumbasierten Innere-Punkte-Methoden setzen wir exakte Steuerungselimination und einen inexakten Newton-Pfadverfolgungsalgorithmus mit adaptiver Mehrgitter-Methode in der innersten Schleife ein.

### **Funktionenraumbasierte Innere-Punkte-Methoden**

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

**Kooperationspartner:** F. Tröltzsch, U. Prüfert, TU Berlin; R. Griesse, RICAM Linz; M. Diehl, IWR Heidelberg

**Förderung:** DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt A1

Das Verständnis von funktionenraumbasierten Innere-Punkte-Methoden wurde weiter vertieft. Der Schwerpunkt wurde dabei auf primale Methoden gesetzt, die im Vergleich zu primal-dualen Verfahren ein besseres Diskretisierungsverhalten zeigen und im Funktionenraum oft überlegene theoretische Eigenschaften besitzen.

Die im letzten Jahr begonnene Untersuchung der *steuerungsreduzierten Inneren-Punkte-Methode* wurde fortgesetzt. Dabei wurden eine Reihe analytischer Resultate und algorithmische Fortschritte erzielt. In [6] wurde die superlineare Konvergenz dieser Methode bewiesen. Außerdem konnte in der Dissertation [7] der theoretische Rahmen für Innere-Punkte-Methoden im Funktionenraum erweitert und flexibilisiert werden. Darüber hinaus wurden die Diskretisierungsfehlerabschätzungen verfeinert, ein adaptiver Multilevel-Algorithmus entwickelt und im Rahmen des Finite-Elemente-Pakets JCMSolve/KASKADE implementiert. Er erlaubt die Lösung von steuerungsbeschränkten Optimalsteuerungsproblemen in Rechenzeiten, die oft nicht wesentlich höher sind als die des letzten Newton-Schritts. Insbesondere die Verwendung von quadratischen finiten Elementen (vgl. Abbildung 2.32) führt zu einer effizienten Lösung des Problems bis auf hohe Genauigkeiten.

Weil Optimierungsprobleme vielfach von Modellparametern abhängen, stellt sich die Frage nach der Parameterabhängigkeit der Lösung. In Innere-Punkte-Methoden hängt auch die regularisierte Approximation von den Parametern ab. Es wurde daher begonnen, den Zusammenhang zwischen den Sensitivitäten der exakten Lösung und denen ihrer IP-Approximation zu untersuchen. Für steuerungsbeschränkte Probleme stellt sich dabei heraus, dass die IP-Sensitivitäten deutlich langsamer konvergieren als die IP-Lösungen selbst. Insbesondere liegt im allgemeinen keine Konvergenz in der  $L_\infty$ -Norm vor [5]. Dies liegt daran, dass die exakten Sensitivitäten typischerweise Unstetigkeiten entlang der Ränder der aktiven Mengen aufweisen, die IP-Sensitivitäten jedoch stetig sind.

Anfang des Jahres wurde eine prototypische Implementierung zur Berechnung der optimalen Antenneneinstellungen bei der Hyperthermie erstellt. Die Schwierigkeit des Problems (Zustandsbeschränkungen, Nichtkonvexität) erfordert allerdings weitere theoretische und algorithmische Vorarbeiten, um die Robustheit und die Effizienz des Verfahrens zu steigern.

Aus diesem Grund wurde gegen Ende des Berichtszeitraums begonnen, die spezielle Struktur semi-infiniten Optimierungsprobleme zu untersuchen, da viele Anwendungsprobleme nur endlich viele Steuergrößen aufweisen. Dies trifft auch für das Hyperthermie-Therapieplanungs-

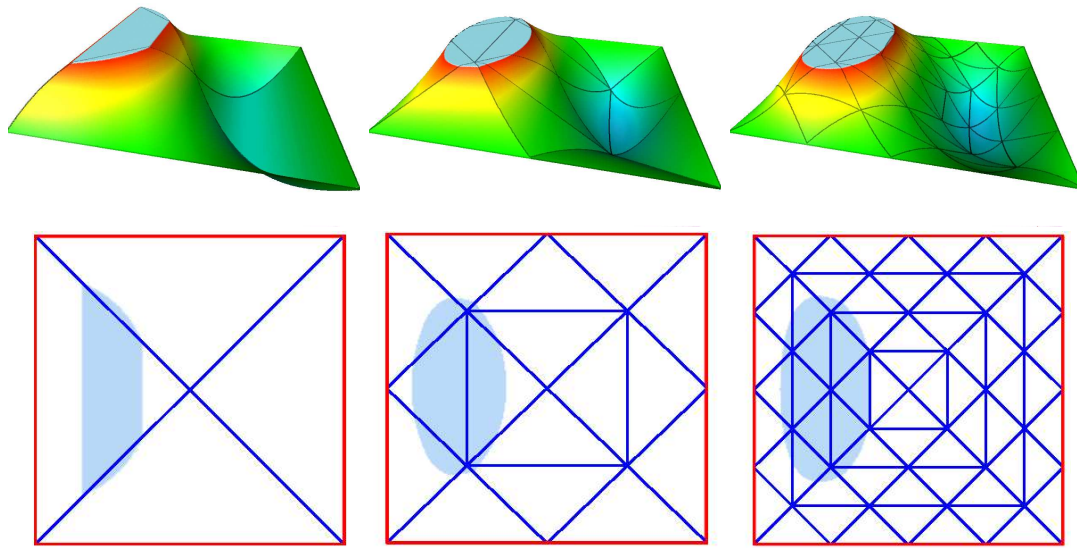


ABBILDUNG 2.32: Oben: Optimale Steuerung berechnet mit quadratischen finiten Elementen auf drei verschiedenen Gittern. Unten: Aktive Mengen. Die Darstellung der aktiven Mengen ist unabhängig vom Gitter.

problem zu. Ein erstes Resultat ist, dass bei der Verwendung integrierter Barrierefunktionen die Wahl nicht auf  $-\log(x)$  fällt, sondern von der Raumdimension der Zustandsbeschränkungen abhängt.

### 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 technische, physikalische, hygienische und vertragliche Einschränkungen zu berücksichtigen. Die variablen Kosten setzen sich zusammen aus Energiekosten zur Förderung und Aufbereitung des Wassers sowie Kosten für Betriebsmittel und Grundwasserentnahme.

Projektziel war die Entwicklung eines Optimierungs-Moduls und dessen Implementierung unter GAMS zur Einbindung in das neue Betriebsleitsystem der Berliner Wasserbetriebe. Dies erfolgte in Zusammenarbeit mit der ABB Utilities GmbH.

Die mathematische Modellierung führt auf ein sehr großes nichtlineares Optimierungsproblem mit 1.481 Netzknoten, 1.935 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 [2, 3].

Im Berichtsjahr wurde das zuvor entwickelte Optimierungsmodul ins Betriebsleitsystem der Berliner Wasserbetriebe integriert; seither wird es routinemäßig für die Tagesplanung eingesetzt. Weiter wurde für das hydraulische Netzmodell in DAE-Form eine allgemeine mathematische Theorie entwickelt – insbesondere topologische Kriterien, die die Lösbarkeit mit Index 1 unter schwachen Regularitätsannahmen garantieren [9]. Eine Verallgemeinerung der Ergebnisse für den kompressiblen Fall (Gasnetze [4, 8]) ist in Arbeit.

### 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] J. Burgschweiger, B. Gnädig und M. C. Steinbach, *Nonlinear Programming Techniques for Operative Planning in Large Drinking Water Networks*, Report 05-31, ZIB, 2005.
- [3] J. Burgschweiger, B. Gnädig und M. C. Steinbach, *Optimierte Tagesplanung im Berliner Trinkwassernetz*, OR News, 26 (2006), 6–9.
- [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] R. Griese und M. Weiser, *On the Interplay Between Interior Point Approximation and Parametric Sensitivities in Optimal Control* *Topological Index Criteria in DAE for Water Networks*, Report 05-44, ZIB, 2005.
- [6] A. Schiela und M. Weiser, *Superlinear Convergence of the Control Reduced Interior Point Method for PDE Constrained Optimization.*, Report 05-15, ZIB, 2005.
- [7] A. Schiela, *The Control Reduced Interior Point Method – A Function Space Oriented Algorithmic Approach*, Doktorarbeit, FU Berlin (in Vorbereitung).
- [8] M. C. Steinbach, *On PDE Solution in Transient Optimization of Gas Networks*, J. Comput. Appl. Math., erscheint 2006.
- [9] M. C. Steinbach, *Topological Index Criteria for DAE in Water Networks*, Report 05-49, ZIB, 2005.

### 2.2.8 Ganzzahlige Optimierung

Die ganzzahlige Optimierung beschäftigt sich mit Problemen, bei 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 und Logistik 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 zu 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 so weit wie möglich mittels eines allgemeinen, von der Problemstruktur unabhängigen Algorithmus lösen zu können.

In diesen 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.
- *MIPLIB*  
ist eine Bibliothek mit Testinstanzen für MIP-Löser.
- *Symmetrien in der ganzzahligen linearen Optimierung* behandelt die besonderen Schwierigkeiten, die bei der Lösung hochgradig symmetrischer ganzzahliger Optimierungsprobleme auftreten.
- *Unzulässige lineare Ungleichungssysteme* treten in einigen Anwendungen auf und erfordern spezielle Algorithmen zur Analyse der Unzulässigkeit und zum Auffinden von maximal-zulässigen Teilsystemen.

Des weiteren wird innerhalb des Schwerpunkts die folgende Software entwickelt:

- *Modellierungssprache Zimpl*  
beschleunigt die Umsetzung vom mathematischen Modell zur Eingabe für MIP-Löser (siehe Abschnitt 6.3).
- *Basisverifizierer perPlex*  
erlaubt es, exakte Optimallösungen von linearen Programmen zu bestimmen (siehe Abschnitt 6.3).
- *LP-Löser SoPlex*  
dient zum Lösen von linearen Programmen, die unter anderem bei der Lösung von gemischt-ganzzahligen Programmen als Unterprobleme auftreten (siehe Abschnitt 6.3).
- *CIP-Framework SCIP*  
dient zum Lösen von gemischt-ganzzahligen Programmen und „Constraint Integer Programs“ (CIPs) und kann als Branch-Cut-and-Price-Framework eingesetzt werden (siehe Abschnitt 6.3).

## 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 *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.

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 hier 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 funktionell 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.

Die bereits in den Vorjahren begonnene Integration von MIP- und CP-Techniken innerhalb des Frameworks SCIP [1] wurde im Berichtszeitraum fortgeführt. Mit SCIP implementierte Algorithmen können auf einfache Weise von den komplementären Stärken beider Techniken profitieren. Insbesondere enthält SCIP die notwendigen Komponenten, um als vollwertiger MIP-Löser und als Branch-Cut-and-Price-Framework eingesetzt zu werden. SCIP wird bereits in mehreren Projekten des ZIB sowie in Projekten der TU Berlin, der TU Darmstadt und der TU Chemnitz verwendet. Es ist seit diesem Jahr für akademische Zwecke frei im Quellcode erhältlich auf der Webseite <http://scip.zib.de>.

Neben der ausführlichen Untersuchung von Branching-Regeln zur Aufteilung eines MIP in Teilprobleme [4] lag der Fokus im Berichtsjahr auf der Implementierung und Analyse von Preprocessing-Techniken, Primalheuristiken und Schnittebenenverfahren. Im Preprocessing wurde das *Probing* sowie eine verbesserte Redundanzprüfung implementiert. Außerdem werden die im Probing gesammelten Informationen verwendet, um Knapsack-Bedingungen zu verschärfen. Zum schnelleren Auffinden von zulässigen Lösungen wurden Erweiterungen bereits vorhandener Primalheuristiken sowie die Heuristik *Octane* [7] und verschiedene Verbesserungsheuristiken (RINS [11], Local Branching [14], Crossover) innerhalb von SCIP implementiert. Außerdem konnte die sogenannte *Feasibility Pump* [13, 8] verbessert werden [3].

Im Bereich der Schnittebenen wurden Separierungsmethoden und Datenstrukturen für *Clique Cuts* und *Implied Bound Cuts* entwickelt. Die bereits vorhandenen Separierer für *Knapsack Cover Cuts* und *Complemented Mixed Integer Rounding Cuts* wurden verbessert. Als neuartige Methode zur Erzeugung von zulässigen Ungleichungen, die als Schnittebenen eingesetzt werden können, wurde die *Konfliktanalyse* in die Welt der gemischt-ganzzahligen Programmierung übertragen. Diese wird seit langem erfolgreich bei der Lösung von Satisfiability-

Problemen (SAT) verwendet, um aus unzulässigen Teilproblemen innerhalb des Suchbaumes Informationen zu generieren, die später die Suche beschleunigen können. Die Übertragung der Konflikt-Analyse auf gemischt-ganzzahlige Programmierung [2] ist ein weiterer Schritt zur Integration von CP- und SAT-Techniken in den MIP-Bereich.

### 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 Beispiel dafür stellen stabile Mengen in Graphen dar. Eine stabile Menge ist eine Menge paarweise nicht benachbarter Knoten des Graphen. Wenn die Bedingungen zwischen binären Variablen in ganzzahligen linearen Programmen „Stabilität“ in einem „Konfliktgraphen“ erfordern, können gültige Ungleichungen für das Stabile-Mengen-Polytop ebenfalls für solche allgemeine Probleme gewinnbringend eingesetzt werden. So werden beispielsweise Clique-Ungleichungen von heutigen Lösern standardmäßig erkannt und – sofern geeignet – eingesetzt.

Sobald die binären Variablen jedoch durch ganzzahlige Größen ersetzt werden, haben die Löser Schwierigkeiten, ähnliche zugrundeliegende Strukturen zu erkennen und auszunutzen. In diesem Projekt beschäftigen wir uns daher mit ganzzahligen Verallgemeinerungen grundlegender 0-1-Probleme. Eine Untersuchung der polyedrisch-kombinatorischen Struktur des Stabile-Multimengen-Polytops wurde positiv abgeschlossen und brachte sowohl theoretische als auch praktische Erkenntnisse (vgl. [15, 16]).

Das wichtigste Resultat dieser Studie, die Verstärkung des Stabile-Multimengen-Polytops mit Hilfe verallgemeinerten Kreis-Ungleichungen, motivierte eine weiterführende Studie zu sogenannten  $\{0, \frac{1}{2}\}$ -Schnittebenen für allgemeine ganzzahlige Programme. Caprara und Fischetti [10] führen die  $\{0, \frac{1}{2}\}$ -Schnittebenen als spezielle Chvátal-Gomory-Schnittebenen ein. Die  $\{0, \frac{1}{2}\}$ -Schnittebenen können als eine Oberklasse der verallgemeinerten Kreis-Ungleichungen betrachtet werden.

Die Separierung der am stärksten verletzten  $\{0, \frac{1}{2}\}$ -Schnittebene kann selbst als ganzzahliges lineares Programm formuliert werden. Eine Rechenstudie auf den Instanzen der MIP-LIB 2003 [5] konnte das Verbesserungspotential der  $\{0, \frac{1}{2}\}$ -Schnittebenen zur Reduktion der Anzahl an Branch-and-Bound-Knoten aufzeigen, allerdings wurde durch diese exakten Separierungen der Lösungsprozess insgesamt erheblich verlangsamt [17]. Die analoge Schlussfolgerung wurde kürzlich auch für den gleichen Ansatz zur Optimierung über den ersten Chvátal-Abschluss gezogen [12].

Durch den Einsatz verbesserter Methoden zum Preprocessing konnte dieser nachteilige Laufzeiteffekt 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. Gegenwärtig untersuchen wir Möglichkeiten, durch Identifizierung und Charakterisierung von Teilklassen effizient separierbarer Ungleichungen einen guten Kompromiss zwischen Separierungsdauer und -effektivität zu erzielen [17].

### MIPLIB 2003

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

**Kooperationspartner:** Alexander Martin, Technische Universität Darmstadt

Um den Bedarf nach Zugriff auf interessante gemischt-ganzzahlige Programme (MIP, Mixed Integer Program) zu bedienen, entwarfen Bixby, Boyd und Indovina 1992 die MIPLIB, eine Bibliothek elektronisch verfügbarer Instanzen. Durch die Fortschritte bei den MIP-Lösern wurde es später notwendig, die Bibliothek zu überarbeiten, obsolet gewordene Probleme zu entfernen und neue, schwierigere hinzuzufügen. Dies wurde 1996 von Bixby, Ceria, McZeal und Savelsbergh [9] durchgeführt.

Die MIPLIB ist inzwischen zu einem Standard-Test-Set für den Vergleich von MIP-Lösern geworden.

In Absprache mit den bisherigen Betreuern ist die MIPLIB 2003 an das ZIB gekommen 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.

Im Jahre 2004 wurde eine Veröffentlichung zur neuen MIPLIB geschrieben, die bei Operation Research Letters eingereicht und 2005 akzeptiert wurde.

### Symmetrien in der ganzzahligen linearen Optimierung

**Bearbeitet von:** Martin Grötschel, Volker Kaibel, Marc Pfetsch

**Kooperationspartner:** Andreas Loos, TU Berlin

**Förderung:** DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt B12 (ab 01.06.2006)

Symmetrien in der Formulierung ganzzahliger linearer Programme (IP) können deren praktische Lösbarkeit erheblich beeinträchtigen. Ein klassisches Beispiel liefert das Knotenfärbungsproblem, bei dem in einem gegebenen Graphen die Knoten mit möglichst wenigen Farben so gefärbt werden sollen, dass adjazente Knoten unterschiedliche Farben erhalten. Dies stellt z. B. eine (grobe) Abstraktion von Frequenzzuweisungsproblemen in der Telekommunikation dar, wobei die Farben verschiedenen Frequenzen, die Knoten Sendern und die Kanten Interferenz bei Nutzung der gleichen Frequenz entsprechen. Eine natürliche Modellierung dieses Problems verwendet Binärvariablen, die für jede Kombination von Knoten  $v$  und Farbe  $c$  anzeigen, ob  $v$  mit  $c$  gefärbt wird. Diese Formulierung weist insofern Symmetrie auf, dass man aus jeder Lösung durch Permutation der Farben viele „andere“ Lösungen (einen *Orbit*) erhält, welche die gleiche Struktur und insbesondere die gleiche Anzahl von Farben haben.

Diese Art von Symmetrie erschwert die Arbeit von IP-Lösern auf zweierlei Art. Zum einen wird der Suchraum durch die Permutationen unnötig groß. Es ist für (implizit) enumerative Verfahren zunächst nicht zu erkennen, ob ein Teil des Suchraums nicht exploriert werden muss, weil ein strukturell gleicher Teil bereits zuvor untersucht wurde (z. B. in Branch-and-bound-Algorithmen). Zum anderen sind die dualen Schranken, welche man aus der LP-Relaxierung solcher symmetrischen Modelle berechnen kann, in vielen Fällen sehr schwach.

In zahlreichen Projekten am ZIB und im MATHEON wurden in den vergangenen Jahren IP-Modelle entwickelt, die solche oder ähnliche Symmetrien aufweisen. Beispiele sind neben der erwähnten Frequenzzuweisung die Linienplanung im öffentlichen Nahverkehr, Fahrplanerstellung und Chip-Verifikation. Wir haben uns daher entschlossen, in einem eigenständigen Projekt die Struktur symmetrischer IPs und Werkzeuge zum Umgang mit ihnen zu behandeln.

Dabei wollen wir zum einen von Margot entwickelte Methoden aus der rechnergestützten Gruppentheorie [18, 19] zum Einsatz bringen und diese zum anderen mit polyedrischen Untersuchungen und der Entwicklung einer speziellen Schnittebentechnologie komplettieren. Ziel des Projekts ist es, ein tieferes Verständnis symmetrischer IP-Modelle zu entwickeln. Es sollen Software-Module für SCIP [1] entwickelt werden, die zur konkreten Problemlösung im Rahmen der genannten Anwendungen beitragen und als Teil des SCIP-Pakets verfügbar gemacht werden.

Im Berichtszeitraum haben wir bereits intensiv mit den polyedrischen Untersuchungen begonnen. Unser Hauptergebnis ist eine vollständige (irredundante) Ungleichungsbeschreibung der konvexen Hülle aller 0/1-Matrizen mit genau einer Eins pro Zeile (Zuordnungs-Modell), deren Spalten lexikographisch sortiert sind – ein Spezialfall der von uns im Rahmen dieses Projekts eingeführten *Orbitope*. Repräsentantensysteme, welche aus jedem Orbit von Lösungen ein lexikographisch maximales Element enthalten, stehen im Zentrum der meisten bekannten Strategien zur Symmetriebrechung. Unser Resultat zeigt in gewissem Sinne, wie man die Lösungsmenge bestmöglich durch Hinzufügen von weiteren Ungleichungen auf ein solches Repräsentantensystem verkleinern kann. Derzeit erforschen wir unter anderem die unmittelbare praktische Relevanz der Ergebnisse für das Knotenfärbungsproblem.

### Unzulässige lineare Ungleichungssysteme

**Bearbeitet von:** Marc Pfetsch

**Kooperationspartner:** Edoardo Amaldi, Politecnico di Milano, Italien

In diesem Projekt soll die grundlegende (kombinatorische) Struktur über den reellen Zahlen unzulässiger linearer Ungleichungssysteme  $Ax \leq b$  untersucht werden, wobei  $A$  eine reelle  $m \times n$  Matrix ist und  $b$  ein  $m$ -dimensionaler Vektor.

Ein wesentliches Problem in diesem Zusammenhang ist das *Maximum Feasible Subsystem Problem* (MAXFS), in dem für ein gegebenes unzulässiges System  $Ax \leq b$  ein zulässiges Teilsystem maximaler Kardinalität zu finden ist. Dieses NP-schwere kombinatorische Optimierungsproblem hat viele interessante Anwendungsgebiete, z. B. bei der Klassifikation von Punkten durch Hyperebenen und bei der Analyse von unzulässigen linearen Programmen. Aufbauend auf [20] haben wir einen Branch-and-Cut-Algorithmus zur Lösung von MAXFS entwickelt und implementiert [21]. Der theoretische Unterbau wurde in [6] entwickelt. Die Implementierung basiert auf dem am ZIB entwickelten Branch-and-Cut-Framework SCIP [1]. Die dort entwickelten Methoden tragen entscheidend zu einer hohen Performance unseres Codes bei. Gleichzeitig war die Implementierung eine der ersten, die SCIP als Framework benutzten.

In einem stark verwandten Problem soll ein möglichst kleines unzulässiges Teilsystem gefunden werden. Dieses Problem hat Verbindungen zur Approximationstheorie, z. B. zur möglichst effizienten Speicherung von Bilddaten. Hierbei soll ein (fouriertransformiertes) Bild bezüglich eines großen linearen Erzeugendensystems dargestellt werden (z. B. Wavelets), wobei die Anzahl der Nicht-Null-Einträge minimal sein soll. Wenn man dabei kleine Abweichungen in der Darstellung erlaubt und das Erzeugendensystem passend wählt, kann man Bilder mit deutlich weniger (von Null verschiedenen) Koeffizienten darstellen. Stand der Technik ist derzeit die Approximation mit Hilfe linearer Programme. Wir hoffen, durch die Behandlung des oben beschriebenen kombinatorischen Optimierungsproblems weitere Effizienzsteigerungen erzielen zu können.

Eine andere Anwendung, bei der ein möglichst kleines unzulässiges Teilsystem zu finden ist,



tritt bei der Konfliktanalyse innerhalb gemischt-ganzzahliger Programme auf [2]. Hierbei werden unzulässige lineare Programme innerhalb des Branch-and-bound-Baums untersucht, um gültige Ungleichungen abzuleiten, die im weiteren Verlauf des Algorithmus nützlich sein können.

### Publikationen

- [1] T. Achterberg, *SCIP – a framework to integrate Constraint and Mixed Integer Programming*, Report 04-19, ZIB, 2004.
- [2] T. Achterberg, *Conflict Analysis in Mixed Integer Programming*, Report 05-19, ZIB, 2005.
- [3] T. Achterberg und T. Berthold, *Improving the Feasibility Pump*, Report 05-42, ZIB, 2005.
- [4] T. Achterberg, T. Koch und A. Martin, *Branching rules revisited*, OR Lett. **33** (2005), 42–54.
- [5] T. Achterberg, T. Koch und A. Martin, *MIPLIB 2003*, erscheint in: OR Lett.
- [6] E. Amaldi, M. E. Pfetsch und L. E. Trotter, jr., *On the maximum feasible subsystem problem, IISs, and IIS-hypergraphs*, Math. Programming **95** (2003), Nr. 3, 533–554.
- [7] E. Balas, S. Ceria, M. Dawande, F. Margot und G. Pataki, *OCTANE: A new heuristic for pure 0-1 programs*, Operations Res. **49** (2001), Nr. 2, 207–225.
- [8] L. Bertacco, M. Fischetti und A. Lodi, *A feasibility pump heuristic for general mixed-integer problems*, Techn. Ber. OR/05/5, DEIS – Università di Bologna, Italien, 2005.
- [9] R. E. Bixby, S. Ceria, C. M. McZeal und M. W. Savelsbergh, *An updated mixed integer programming library: MIPLIB 3.0*, Optima (1998), Nr. 58, 12–15.
- [10] A. Caprara und M. Fischetti,  $\{0, \frac{1}{2}\}$ -Chvátal-Gomory cuts, Math. Programming **74** (1996), 221–235.
- [11] E. Danna, E. Rothberg und C. Le Pape, *Exploring relaxation induced neighborhoods to improve MIP solutions*, Math. Programming **102** (2005), Nr. 1, 71–90.
- [12] M. Fischetti und A. Lodi, *Optimizing over the first Chvátal closure*, Proc. Integer Programming and Combinatorial Optimization, IPCO XI, Lecture Notes in Computer Science, Bd. 3509, Springer-Verlag, 2005, S. 12–22.
- [13] M. Fischetti, F. Glover und A. Lodi, *The feasibility pump*, Math. Programming **104** (2005), Nr. 1, 91–104.
- [14] M. Fischetti und A. Lodi, *Local branching*, Math. Programming **98** (2003), Nr. 1-3, 23–47.
- [15] A. Koster und A. Zymolka, *Stable Multi-Sets*, Math. Methods Oper. Res. **56** (2002), Nr. 1, 45–65.
- [16] A. Koster und A. Zymolka, *On cycles and the stable multi-set polytope*, Discrete Optim. **2** (2005), Nr. 3, 241–255.

- [17] A. Koster, A. Zymolka und M. Kutschka, *Separation of  $\{0, \frac{1}{2}\}$ -cuts*, in Vorbereitung, 2006.
- [18] F. Margot, *Pruning by isomorphism in branch-and-cut*, Math. Programming **94** (2002), Nr. 1, 71–90.
- [19] F. Margot, *Small covering designs by branch-and-cut*, Math. Programming **94** (2003), Nr. 2–3, 207–220.
- [20] M. E. Pfetsch, *The maximum feasible subsystem problem and vertex-facet incidence of polyhedra*, Dissertation, TU Berlin, 2002.
- [21] M. E. Pfetsch, *Branch-And-Cut for the Maximum Feasible Subsystem Problem*, Report 05-46, ZIB, 2005.

### 2.2.9 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. Bei der Entwicklung praxistauglicher Online-Algorithmen müssen außerdem oft *Echtzeit-Anforderungen* berücksichtigt werden: Der Algorithmus muss innerhalb einer garantierten Antwortzeit eine gültige Lösung liefern.

Zur theoretischen Beurteilung von Online-Algorithmen hat sich die von Sleator und Tarjan [20] eingeführte *kompetitive Analyse* als eines der Standardmittel durchgesetzt (siehe [4, 6]). Die Modifikation und Erweiterung der kompetitiven Analyse sowie die Entwicklung geeigneter anderer Bewertungskriterien ist ein aktuelles Forschungsthema in der Online-Optimierung [2, 5], mit dem wir uns im Projekt *Kombinatorische Online-Planung* beschäftigen.

Ein wichtiges Anwendungsgebiet der Online-Optimierung sind Planungsprobleme im Transportwesen und in der innerbetrieblichen Logistik. Typischerweise sind hier Online-Aspekt (zukünftige Transportaufträge sind unbekannt) und Echtzeit-Aspekt (kurze Rechenzeiten für hohen Durchsatz) stark ausgeprägt. Ein möglicher Ansatz zur Behandlung dieser Probleme ist der Einsatz 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.

Online-Transportaufgaben mit Echtzeit-Anforderungen treten auch bei der Planung von Einsatzfahrzeugen auf, wie etwa bei der Zuordnung von Pannenhelfern zu liegengelassenen Kraftfahrzeugen. Da künftige Pannen unbekannt sind, muss eine Planung auf Basis bekannter Daten strategisch gute Entscheidungen liefern, um Engpässe in der Zukunft zu vermeiden. Damit haben wir uns im Projekt *Online-Disposition von Fahrzeugen* befasst.

Im Projekt *Stabilität, Sensitivität und Robustheit in kombinatorischer Online-Optimierung* ist das Ziel, generelle Eigenschaften guter Offline-Optimierungsprobleme zur Reoptimierung in Online-Algorithmen zu bestimmen.

## Kombinatorische Online-Planung

**Bearbeitet von:** Martin Grötschel, Benjamin Hiller

**Kooperationspartner:** Sven O. Krumke, TU Kaiserslautern; Tjark Vredeveld, Universiteit Maastricht, Niederlande

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

Das Standardwerkzeug zur theoretischen Bewertung von Online-Algorithmen, die *kompetitive Analyse* [20], 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 sehr stark Wissen über die Funktionsweise des Online-Algorithmus verwandt. Um diesen Nachteil für den Online-Algorithmus abzuschwächen, führten Ben-David et al. in [3] die *randomisierte kompetitive Analyse* ein, d. h. sie betrachteten *randomisierte* Online-Algorithmen. Dadurch wird das „schlechte“ Verhalten auf einer Worst-case-Eingabe zu *einem* möglichen Verhalten. Dieser Ansatz hat sich als eine Alternative zur herkömmlichen kompetitiven Analyse etabliert (siehe [4, 6]).

Im Moment konzentrieren wir uns in diesem Projekt auf den „umgekehrten“ Ansatz: Statt randomisierter Algorithmen auf beliebigen Eingaben betrachten wir deterministische Algorithmen auf *zufälligen* Eingaben. Dem liegt die Überlegung zugrunde, dass reale Instanzen sich oft aus ungewissen Ereignissen ergeben. Das Interesse gilt also nicht dem schlechtesten Fall, sondern dem *Durchschnittsfall* (Average-case-Analyse). In diesem Modell können auch Aussagen bzgl. der „typischen“ Performance interessant sein, also die Untersuchung der Performance mit *hoher Wahrscheinlichkeit*.

Das durch eine Kommissionierungsanwendung motivierte *Online Bin Coloring* ist ein Problem, für das die kompetitive Analyse Aussagen liefert, die vom praktischen Standpunkt unbrauchbar sind. Ein trivialer, offensichtlich ungünstiger Algorithmus hat ein besseres Kompetitivitätsverhältnis als ein greedy-artiger Algorithmus, der die Ressourcen viel besser ausnutzt [17]. Auch randomisierte Algorithmen können nicht wesentlich besser sein als der triviale Algorithmus.

Dies steht in scharfem Kontrast zu Simulationen auf zufälligen Eingaben, bei denen der Greedy-Algorithmus deutlich besser abschneidet [16]. Wir haben mit einer probabilistischen Analyse begonnen, die diese Diskrepanz erklären soll. Wir untersuchen, *wie lange* verschiedene Algorithmen (mit hoher Wahrscheinlichkeit) gute Ergebnisse liefern. Die Arbeitsweise einer großen Klasse von Bin-Coloring-Algorithmen kann durch relativ einfache Markovketten beschrieben werden. Wir konnten zwei Algorithmen hinsichtlich ihrer „wahrscheinlichen Laufzeit“ miteinander vergleichen und haben empirisch festgestellt, dass der greedy-artige dem trivialen Algorithmus bei diesem Kriterium überlegen ist.

Für das *Online-Optical-Call-Admission*-Problem konnten Gassner und Krumke [9] ein besseres klassisches Kompetitivitäts-Resultat erzielen, als es bisher bekannte Techniken ermöglichten [1].

## 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*, eine begonnene Transportfahrt endet also ohne Zwischenstops stets in der Zieletage. Zur Steuerung derartiger Systeme werden in der Praxis oft „Standard-Steuerungen“ wie FI-FO 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 [10]). Ein derart gesteuertes System kann bei gleichen Anforderungen in der Regel kleiner dimensioniert werden (vgl. Abbildung 2.33).

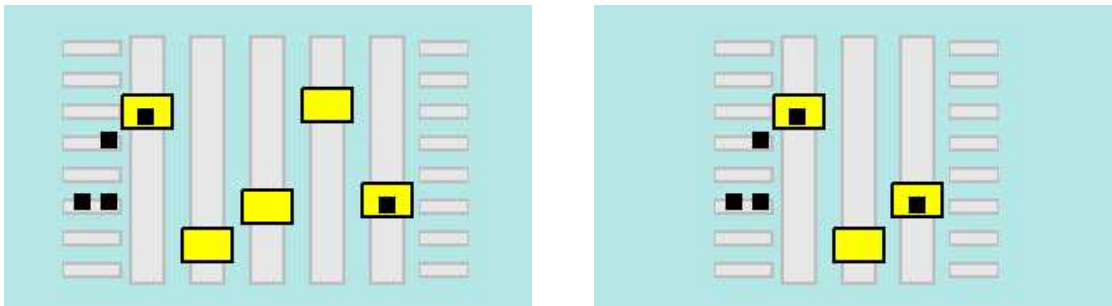


ABBILDUNG 2.33: Lastaufzugsysteme mit Einzelplatz-Aufzügen. Durch Verwendung einer mathematisch optimierten Steuerung (rechts) lassen sich Aufzüge gegenüber einer Standard-Steuerung (links) einsparen.

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 2.34) mit mehreren Aufzügen mit Hilfe eines integrierten Reoptimierungsalgorithmus in Echtzeit steuern [7]. Integriert bedeutet dabei, dass der Algorithmus die Zuordnung (von Aufträgen zu Aufzügen) und die Abarbeitungsreihenfolge (von Aufträgen durch einen Aufzug) gleichzeitig betrachtet.

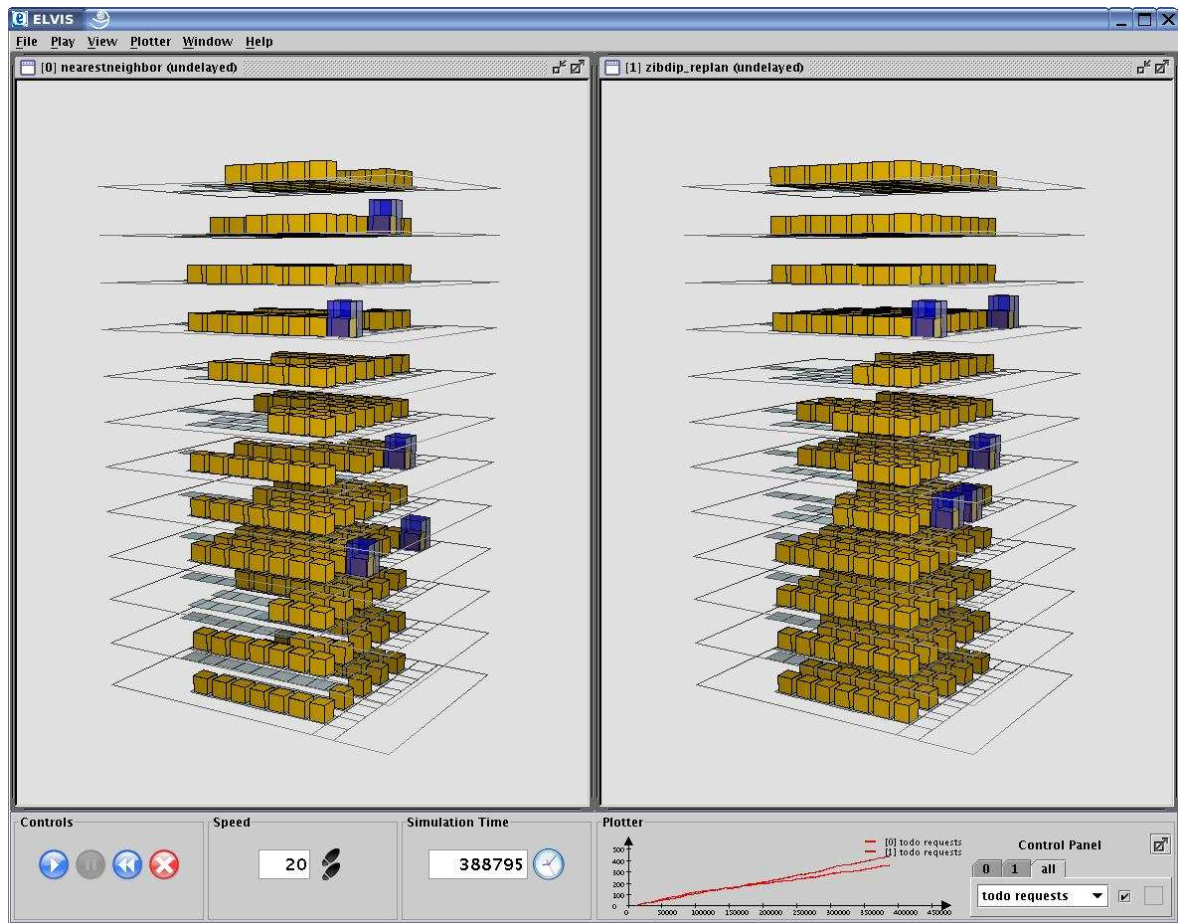


ABBILDUNG 2.34: Zwei Lastaufzugssysteme im Vergleich. Die Darstellung ist der am ZIB entwickelten Visualisierung ELVIS des Simulationssystems entnommen.

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 zeigen, dass die Systeme dadurch ohne Leistungseinbußen kleiner dimensioniert werden können. Für eine ausführliche Zusammenstellung der gesammelten Resultate sei auf [8] 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.

## Online-Disposition von Fahrzeugen

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

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

Das Ziel dieses Projektes war, ein Online-Dispatching-Verfahren zu entwickeln, das bei der Berechnung einer *Echtzeit*-Einsatzplanung für die Pannenhilfsfahrzeuge des ADAC verwendet werden kann. Der ADAC verfügt über eine heterogene Flotte von mehr als 1.600 Fahrzeugen, deren geographische Positionen jederzeit mit Hilfe von GPS genau lokalisiert werden können. 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 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.

Wir haben ein echtzeittaugliches Spaltengenerierungsverfahren entwickelt, das einen Schnappschuss (eine Instanz des Offline-Problems, die alle gerade bekannten Daten enthält) in ca. 10 Sekunden fast optimal löst. Dieses kommt in einem *Reoptimierungsalgorithmus* zum Einsatz: Bei Bekanntwerden neuer Information wird eine Lösung für den aktuelle Schnappschuss berechnet und als neuer Plan verwendet.

Intensive Simulationen zeigten die Eignung unseres Verfahrens [11, 19]. Dieses wird bereits seit Ende 2002 vom ADAC in einer Pannenhilfezentrale im Testbetrieb eingesetzt. Dabei zeigte sich ein viel höheres Auftragsaufkommen, als es die ursprünglich untersuchten Daten aufwiesen. 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 Evaluation der Hochlastvarianten mit unserem Simulationssystem zeigte klare Unterschiede zwischen den verschiedenen Varianten. Es erwies sich als günstig, möglichst viele Aufträge zu berücksichtigen [15] und nur wenige, geschickt implizit zu wählende Aufträge vorerst zu ignorieren. Dies bedeutet, dass es trotz unvollständiger Information sinnvoll ist, in die Zukunft zu planen.

Aufgrund unserer Ergebnisse haben wir dem ADAC die beste Variante empfohlen, die zwischenzeitlich auch von IPS implementiert wurde. Das neue Verfahren kommt zur Zeit in vier von fünf Pannenhilfezentralen zum Einsatz. Die Arbeit an einem speziellen Verfahren für den ADAC ist damit zunächst einmal abgeschlossen.

### 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 (ADAC); Hermes Technischer Kundendienst; DFG-Graduiertenkolleg „Stochastische Modellierung und quantitative Analyse großer Systeme in den Ingenieurwissenschaften“; DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekte B7, B11, C3, C5, 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 kombinatorischen 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 unter den gleichen Nebenbedingungen dieselbe Zielfunktion wie im Online-Problem, benutzt aber nur die jeweils verfügbaren Input-Daten. Dieses kann jedoch zu unerwünschten Ergebnissen führen [12].

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

Eines der 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.

Um ein Gefühl für eine sinnvolle Terminvergabe zu bekommen, wurden im Berichtszeitraum verschiedene derartige Probleme, die aus einer Online-Terminplanung und der nachgelagerten Optimierung eines Offline-Problems bestehen, mittels kompetitiver Analyse untersucht (vgl. [14, 13]). Für die Minimierung der Gesamtkosten aller Tage liefert ein Online-Algorithmus, der versucht, durch Auftragsbündelung Synergieeffekte zu erzielen, jeweils die besten Gütegarantien.

Außerdem haben wir eine Formulierung dieses Problems als Markov-Entscheidungs-Problem (MDP) entwickelt, wodurch insbesondere Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf zukünftigen Ereignissen berücksichtigt werden können. Über eine Formulierung als LP lassen sich im Erwartungswert optimale Strategien prinzipiell berechnen. Aufgrund der sehr großen Zahl von Zuständen bei realistischen Problemen kann das zugehörige LP jedoch nicht direkt gelöst werden. Wir haben ein neues auf Spaltengenerierung basierendes Verfahren (*Lokale Politikevaluierung*) entwickelt und implementiert, das es ermöglicht, *in einem Zustand* die erwarteten optimalen Kosten oder die erwarteten Kosten einer gegebenen Steuerung (oder Strategie) zu approximieren (siehe [13]). Damit erhalten wir eine Schranke für den relativen Fehler der Steuerung. Auf theoretischer Seite konnte gezeigt werden, 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

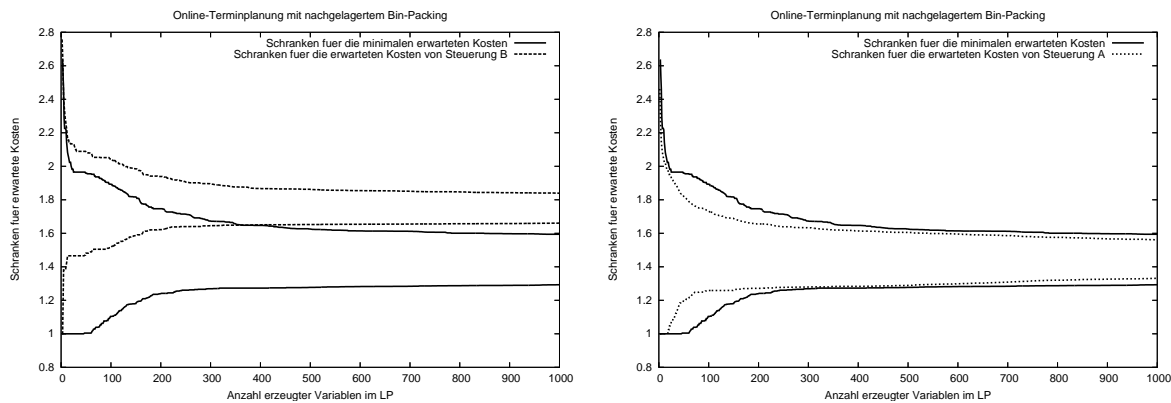


ABBILDUNG 2.35: Verlauf der Approximation für die erwarteten Optimalkosten und die erwarteten Kosten von zwei Steuerungen in einem festen Zustand.

Zuständen im MDP. Abbildung 2.35 zeigt für einen festen Zustand den Verlauf der oberen und unteren Schranken für die erwarteten Kosten zweier Steuerungen und für die erwarteten optimalen Kosten in Abhängigkeit von der Anzahl an LP-Variablen. Im zugehörigen MDP (nachgelagertes Bin-Packing) gibt es insgesamt mehr als  $10^9$  Zustände und die tatsächlichen Optimalkosten sind unbekannt. Während der linke Teil der Graphik zeigt, dass die betrachtete Steuerung nicht optimal ist, belegt der rechte Teil, dass die zweite Steuerung vermutlich annähernd optimal ist.

Allgemein erhoffen wir mit Hilfe der Lokalen Politikevaluierung die Eignung von Hilfsproblemen besser beurteilen zu können. Diese Informationen werden insbesondere helfen, das Hilfsproblem anzupassen, um besseres Online-Verhalten zu erzielen.

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

## Publikationen

- [1] B. Awerbuch, Y. Azar und S. A. Plotkin, *Throughput-competitive online routing*, Proc. 34th Annual IEEE Symposium on the Foundations of Computer Science, 1993, S. 32–40.
- [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*, Proc. 44th Annual IEEE Symposium on Foundations of Computer Science, 2003, S. 462–471.
- [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*, Proc. 14th Annual International Symposium on Algorithms and Computation, Lecture Notes in Computer Science, Bd. 2906, Springer, 2003, S. 605–614.
- [6] A. Fiat und G. J. Woeginger (Hg.), *Online algorithms: The state of the art*, Lecture Notes in Computer Science, Bd. 1442, Springer, 1998.
- [7] P. Friese, *Echtzeitsteuerung von Multi-Server-Transportsystemen mit Reoptimierungsalgorithmen*, Diplomarbeit, Technische Universität Berlin, 2003.
- [8] P. Friese und J. Rambau, *Online-Optimization of Multi-Elevator Transport Systems with Reoptimization Algorithms based on Set-Partitioning Models*, erscheint in: Discrete Appl. Math., Special Issue for the Latin American Conference on Combinatorics, Graphs and Applications (LACGA 2004)
- [9] E. Gassner und S. O. Krumke, *Deterministic online optical call admission revisited*, Proc. 3rd Workshop on Approximation and Online Algorithms (T. Erlebach und G. Persiano, Hg.), Lecture Notes in Computer Science, Bd. 3879, Springer, 2006, S. 190–202 (english).
- [10] M. Grötschel, S. O. Krumke und J. Rambau (Hg.), *Online optimization of large scale systems*, Springer, Berlin Heidelberg New York, 2001.
- [11] 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, Hg.), Springer, 2002, S. 168–173.
- [12] D. Hauptmeier, S. O. Krumke und J. Rambau, *The online dial-a-ride problem under reasonable load*, Proc. 4th Italian Conference on Algorithms and Complexity (G. C. Bongiovanni, G. Gambosi und R. Petreschi, Hg.), Lecture Notes in Computer Science, Bd. 1767, Springer, 2000, S. 125–136.
- [13] S. Heinz, *Policies for online target date assignment problems: Competitive analysis versus expected performance*, Diplomarbeit, Technische Universität Berlin, 2005.
- [14] S. Heinz, S. O. Krumke, N. Megow, J. Rambau, A. Tuchscherer und T. Vredeveld, *The online target date assignment problem*, Proc. 3rd Workshop on Approximation and Online Algorithms (T. Erlebach und G. Persiano, Hg.), Lecture Notes in Computer Science, Bd. 3879, Springer, 2003, S. 230–243.
- [15] B. Hiller, S. O. Krumke und J. Rambau, *Reoptimization gaps versus model errors in online-dispatching of service units for ADAC*, Discrete Appl. Math., Special Issue for the Latin American Conference on Combinatorics, Graphs and Applications (LACGA 2004), to appear. Available as Report 04-17, ZIB, 2004.
- [16] A. Höft, *Online-Optimierung einer halbautomatischen Glückwunschkartenkommisionierungsanlage*, Diplomarbeit, Technische Universität Berlin, 2001.
- [17] S. O. Krumke, W. E. de Paepe, L. Stougie und J. Rambau, *Online bin coloring*, Proc. 9th Annual European Symposium on Algorithms (F. M. auf der Heide, Hg.), Lecture Notes in Computer Science, Bd. 2161, 2001, S. 74–84.

- [18] S. O. Krumke, L. Laura, M. Lipmann, A. Marchetti-Spaccamela, W. 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*, Proc. 5th International Workshop on Approximation Algorithms for Combinatorial Optimization, Lecture Notes in Computer Science, Bd. 2462, Springer, 2002, S. 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*, Proc. 10th Annual European Symposium on Algorithms (R. H. Möhring und R. Raman, Hg.), Lecture Notes in Computer Science, Bd. 2461, Springer, 2002, S. 637–648.
- [20] D. D. Sleator und R. E. Tarjan, *Amortized efficiency of list update and paging rules*, Comm. ACM **28** (1985), Nr. 2, 202–208.

### 2.2.10 Diskrete Strukturen

Zur Modellierung und Lösung von kombinatorischen Optimierungsaufgaben sind strukturelle und algorithmische Grundlagen der Diskreten Mathematik von großer Bedeutung. Wir arbeiten daher an einer Reihe von ausgewählten Themen, die nicht unmittelbar aus Aufgabenstellungen konkreter Anwendungsprojekte motiviert sind. Dies trägt dazu bei, das Fundament unserer Projektarbeit mittel- und langfristig zu sichern.

Im Berichtszeitraum haben wir in diesem Schwerpunkt unser Arbeitspektrum erweitert. Es kamen Projekte über die Struktur von 0/1-Polytopen, über randomisierte Netzwerkalgorithmen, über kardinalitätsbeschränkte Kreise und Wege, sowie über diskrete Morse-Funktionen hinzu.

In diesem Schwerpunkt führen wir außerdem Projekte zur Verbreitung des Wissens über diskrete Strukturen in Schule, Universität und Industrie durch. Ein Höhepunkt war dabei der Workshop *Combinatorial Optimization at Work* mit über 100 Teilnehmern, darunter mehr als 50 von außerhalb Berlins. In diesem zweiwöchigen Intensivkurs wurde an konkreten Industrieprojekten die Methodik zur Lösung von Anwendungsproblemen im Bereich der Optimierung von der Datenerfassung über die Modellierung, die mathematische Analyse und den Algorithmenentwurf bis hin zur Softwareentwicklung gelehrt. Außerdem wurde das Schul-Buchprojekt *Mathematik erleben – kombinatorische Optimierung lehren und lernen* entscheidend vorangetrieben.

Eine Auswahl der in diesem Jahr erzielten wissenschaftlichen Resultate:

- Der Imperfektheitsindex von  $p$ -,  $t$ -, und rang-perfekten Graphen kann beliebig groß werden.
- Es wurden verbesserte untere Schranken an die Baumweite von Graphen mittels des „Vernetzungsgrads“ bestimmt.
- Mittels Computer-Rechnungen wurde gezeigt, dass alle eckenminimalen Triangulierungen der orientierbaren Fläche vom Geschlecht Zwei realisierbar sind.
- Die ersten IP-Formulierungen allgemeiner kardinalitätsbeschränkter Kreis- und Wegeproblemen mit facettendefinierenden Ungleichungen wurden gefunden.
- Die Verschärfung einer wichtigen Vermutung von Mihail und Vazirani über die Kantenexpansion der Graphen von 0/1-Polytopen auf die Eckenexpansion wurde widerlegt.

- Es gelang, Schranken an die Laufzeit der „Random-Edge“-Variante des Simplex-Algorithmus für dreidimensionale LPs und für LPs auf Würfeln beliebiger Dimension herzuleiten.
- Ein Branch-and-Cut-Algorithmus zur Berechnung von optimalen Morse-Matchings in der kombinatorischen Topologie wurde entwickelt.

### Stabile Mengen und perfekte Graphen

**Bearbeitet von:** Martin Grötschel, Arie Koster

**Kooperationspartner:** Annegret Wagler, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg

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

Ein Graph heißt *perfekt*, wenn für jeden seiner induzierten Untergraphen (einschließlich seiner selbst) die Cliques- und die Färbungszahl übereinstimmen. Die Bedeutung der Klasse der perfekten Graphen liegt darin, dass auf ihr grundlegende Probleme wie z. B. das *Stabile-Mengen-Problem*, das *Maximum-Clique-Problem* und das *Knotenfärbungsproblem* polynomial lösbar sind [25].

Eine Möglichkeit zur Charakterisierung perfekter Graphen bietet das *Stabile-Mengen-Polytop*  $\text{STAB}(G)$ , also die konvexe Hülle der Inzidenzvektoren aller stabilen Mengen des Graphen  $G$ . Mit  $\text{QSTAB}(G)$  wird die *Clique-Relaxierung* von  $\text{STAB}(G)$  bezeichnet, also die Menge aller nicht-negativen Vektoren  $x$ , bei denen für jede Clique in  $G$  die Summe der zugehörigen Komponenten von  $x$  höchstens Eins ist. Ein Graph ist genau dann perfekt, wenn  $\text{STAB}(G) = \text{QSTAB}(G)$  ist.

Der Perfektheitsbegriff ist auf verschiedene Weisen verallgemeinert worden. Eine Möglichkeit ist, in der Charakterisierung via „ $\text{STAB}(G) = \text{QSTAB}(G)$ “ Verschärfungen der Cliques-Relaxierung zu verwenden. Auf diese Art sind z. B. die *t-perfekten* oder *rang-perfekten* Graphen definiert.

Zwei Maße für die Imperfektheit eines Graphen sind der Imperfektheitsgrad und der Imperfektheitsindex. Der *Imperfektheitsgrad* eines Graphen  $G$  (eingeführt von Gerke und McDiarmid [21, 22]) ist definiert als

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

Der Imperfektheitsgrad eines Graphen entspricht also dem Faktor, um den  $\text{STAB}(G)$  ausgedehnt werden muss, um  $\text{QSTAB}(G)$  zu enthalten. Ausschließlich für perfekte Graphen ist der Imperfektheitsgrad genau Eins, für alle imperfekten Graphen jedoch echt größer als Eins.

Alternativ dazu wurde von Aguilera et al. [1] der *Imperfektheitsindex* eines Graphen definiert als

$$\text{imp}_I(G) = \min\{|J| : \text{QSTAB}(G - J) = \text{STAB}(G - J)\},$$

wobei  $J$  eine Teilmenge der Knoten von  $G$ , und  $G - J$  der Untergraph von  $G$  ist, der durch Weglassen der Knoten in  $J$  entsteht. Der Imperfektheitsindex misst also die minimale Anzahl von Knoten, die weggelassen werden müssen, damit ein perfekter Graph übrigbleibt. Entsprechend ist der Imperfektheitsindex Null für alle perfekten Graphen und mindestens Eins für alle imperfekten Graphen.

Im Berichtszeitraum haben wir den Imperfektheitsgrad und den Imperfektheitsindex für über die perfekten Graphen hinausgehende Graphenklassen studiert [41]: Für die Klasse der *p-perfekten* Graphen konnten wir zeigen, dass der Imperfektheitsgrad durch  $\frac{5}{4}$  beschränkt ist.

Der Imperfektheitsindex kann allerdings beliebig groß werden. Dieses zweite Resultat konnte u. a. auch für *t-perfekte* und *rang-perfekte* Graphen gezeigt werden. Lediglich für *minimal imperfekte*, *fast-bipartite* und *fast-perfekte* Graphen ist der Imperfektheitsindex durch Eins begrenzt, wobei die Klasse der fast-perfekten Graphen definiert ist als Graphen mit  $imp_I(G) \leq 1$ . Für diese Klasse konnten wir schließlich den Imperfektheitsgrad durch zwei beschränken.

## Baumweite und Kombinatorische Optimierung

**Bearbeitet von:** Arie Koster

**Kooperationspartner:** Hans Bodlaender, Thomas Wolle, Universität Utrecht, Niederlande; Alexander Grigoriev, Stan van Hoesel, Universität Maastricht, Niederlande; Illya Hicks, Texas A & M University, USA

Analog zu den perfekten Graphen gilt für Graphen mit *beschränkter Baumweite*, dass viele NP-schwere kombinatorische Optimierungsprobleme auf solchen Graphen in polynomieller Zeit lösbar sind. Die Baumweite eines Graphen kennzeichnet das Maß seiner Ähnlichkeit zu einem Baum. Zusammenhängende Graphen mit Baumweite Eins sind genau die *Bäume*, während ausschließlich *serien-parallele Graphen* Baumweite Zwei haben können. Mit Hilfe dynamischer Programmierung ist etwa das gewichtete Stabile-Mengen-Problem auf Graphen mit beschränkter Baumweite in polynomieller Zeit lösbar (wobei die Baumweite allerdings als Konstante im Exponent der Laufzeit auftritt).

Ein äquivalenter Graphparameter ist die *Verzweigungsweite* (engl. *Branchwidth*) eines Graphen. Ein Graph hat genau dann beschränkte Baumweite, wenn seine Verzweigungsweite beschränkt ist. Die Anwendbarkeit der beiden Konzepte zur Lösung kombinatorischer Optimierungsprobleme wurde kürzlich in mehreren Studien belegt [2, 14, 40].

Im Berichtszeitraum wurden die Untersuchungen unterer Schranken für die Baumweite fortgesetzt. In [11] haben wir gezeigt, dass insbesondere das Maximum der minimalen Knotengrade über alle Minoren eine sehr wertvolle untere Schranke liefert, ihre Berechnung jedoch NP-schwer ist. In [42] wurden weitere, auf dem Grad der Knoten basierende untere Schranken in Hinblick auf ihre theoretische Komplexität und praktische Qualität analysiert. Eine Doktorarbeit [59] zu diesem Thema wurde erfolgreich abgeschlossen.

Ein Nachteil aller oben genannten unteren Schranken ist jedoch, dass sie auf (fast) planaren Graphen nachweisbar weit von der Baumweite entfernt bleiben. Deshalb wurde in einer neuen Studie der *Vernetzungsgrad* (engl. *Bramble-Number*) als untere Schranke für die Baumweite eines Graphen betrachtet [10] (für Definitionen verweisen wir auf diesen Artikel). Ein Graph hat genau dann Baumweite  $k$ , wenn der Vernetzungsgrad des Graphen  $k+1$  ist. Dies bedeutet, dass der Grad jeder *Bramble* eine untere Schranke für die Baumweite liefert. Zwei Algorithmen (für allgemeine und planare Graphen) zur Generierung von Brambles mit möglichst hohem Grad wurde entwickelt. Der Algorithmus für planare Graphen hat einen konstanten Approximationsfaktor sowohl für die Baumweite als auch für die Verzweigungsweite eines Graphen. Eine Rechenstudie belegt, dass für (fast) planare Graphen deutlich bessere untere Schranken erzielt werden konnten.

Zur Einführung in dieses relativ neue Gebiet wurde auf der jährlichen INFORMS-Tagung in San Francisco zusammen mit Illya Hicks ein Seminar zur Diskreten Optimierung mit Hilfe von Baum- und Verzweigungsweite von Graphen durchgeführt [28].

### Triangulierte Mannigfaltigkeiten

**Bearbeitet von:** Frank H. Lutz

**Kooperationspartner:** Anders Björner, KTH, Stockholm, Schweden; Jürgen Bokowski, TU Darmstadt; Ulrich Brehm, TU Dresden; Stefan Hougardy, HU Berlin; Michael Joswig, TU Darmstadt; Ekkehard G. Köhler, TU Berlin; Wolfgang Kühnel, Universität Stuttgart; Mariano Zelke, HU Berlin

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 [8, 9, 13, 32, 43, 46, 47, 48, 49, 50, 52, 53, 54]). Des Weiteren konnten Triangulierungen von Mannigfaltigkeiten auf wenigen Ecken vollständig enumeriert werden. Dies wurde beispielsweise für eckentransitive Triangulierungen auf bis zu 13 Ecken (in allen dabei möglichen Dimensionen) durchgeführt, wobei viele bekannte, aber auch einige interessante neue Beispiele entdeckt wurden [39]. Das hierzu entwickelte Enumerationsprogramm konnte u. a. auch zur Enumeration aller 42426 triangulierten 2-Mannigfaltigkeiten auf 10 Ecken eingesetzt werden [51].

Im Allgemeinen ist es 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 ecken-minimalen 10-Ecken-Triangulierungen der orientierbaren Fläche vom Geschlecht Zwei sind realisierbar, wobei 863 dieser Realisierungen „rein zufällig“ gefunden werden konnten (vgl. [12], [51]). Diese Flächen sowie auch Flächen vom Geschlecht 3 mit 10 Ecken konnten mittlerweile sogar mit minimalen Koordinaten realisiert werden [29, 30] (siehe Abbildung 2.36).

### Graphenfärbungen: Topologische untere Schranken

**Bearbeitet von:** Frank H. Lutz

**Kooperationspartner:** Péter Csorba, The University of Western Ontario, London, Ontario, Kanada

In seinem bemerkenswerten Beweis der Kneser-Vermutung im Jahr 1978 [45] 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 Simplicial- (oder Zell-)Komplex zugeordnet, dessen topologische Invarianten dann zur Berechnung der unteren Schranken herangezogen werden.

Für die in letzter Zeit intensiv studierten Hom-Komplexe von Lovász bewiesen Babson und Kozlov [4] die folgende Vermutung von Lovász: Ist für einen Graphen  $H$  der Hom-Komplex  $\text{Hom}(C_{2r+1}, H)$  für ein  $r \geq 1$   $k$ -zusammenhängend, so ist  $\chi(H) \geq k + 4$ .

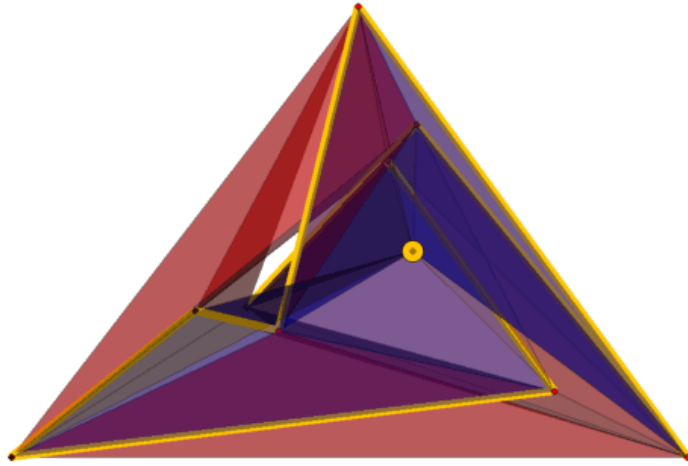


ABBILDUNG 2.36: Eine Fläche vom Geschlecht 3 mit 10 Ecken.

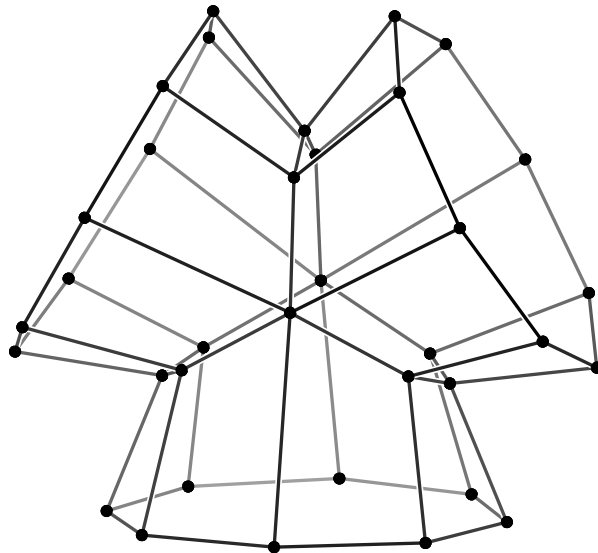


ABBILDUNG 2.37: Ein Ausschnitt aus der kubischen Fläche  $\text{Hom}(\overline{C}_6, K_4)$ .

In Zusammenarbeit mit Péter Csorba wurden in diesem Projekt jene Graphen  $G$  charakterisiert [15], für die die Komplexe  $\text{Hom}(G, K_n)$  Mannigfaltigkeiten sind. Diese *Graphenfärbungsmannigfaltigkeiten* erwiesen sich als eine sehr reichhaltige Klasse hochzusammenhängender, hochsymmetrischer Mannigfaltigkeiten. Insbesondere umfasst die Klasse Serien von Sphären und Produkten von Sphären sowie kubische Flächen (siehe beispielsweise den in Abbildung 2.37 dargestellten Ausschnitt der kubischen Fläche  $\text{Hom}(\overline{C}_6, K_4)$ ). Schultz [57] zeigte weiterhin eine Vermutung von Csorba, wonach die Hom-Komplexe  $\text{Hom}(C_5, K_n)$  homöomorph zu Stiefel-Mannigfaltigkeiten sind.

Unsere Vermutung, nach der  $\text{Hom}(\overline{C}_{2s}, K_r)$  homöomorph zu einer mehrfachen zusammenhängenden Summe von Kopien des Produktes von Sphären  $S^{r-1} \times S^{r-1}$  ist, konnten wir in [15] für  $r = s + 1$  und den weiteren Fall  $(s, r) = (3, 5)$  bestätigen.

### 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 für Informatik, Saarbrücken; DFG-Forschungszentrum MATHEON; Algorithmic Solutions Software GmbH, Saarbrücken; Geschwister-Scholl-Schule Tübingen; Herder-Oberschule Berlin; Romain-Rolland-Oberschule Berlin; Wieland-Herzfelde-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 zur Behandlung mancher realitätsnaher Probleme 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 Kooperationschulen

in Berlin und Tübingen bereits erprobt. Im Berichtszeitraum fanden weitere Unterrichtsversuche und Lehrerfortbildungen statt.

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 tritt im Sommer 2006 der neue Rahmenlehrplan in Kraft, der zwei Wahlmodule zur kombinatorischen Optimierung enthält. Zudem entstehen derzeit Schulbuchkapitel zu diesen Themen.

Der Schwerpunkt der Arbeiten im Berichtszeitraum lag in der Konzeption, Koordination und Durchführung eines Buchprojekts [31]. 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 2006 erscheinen.

### Kardinalitätsbeschränkte Kreis- und Wege-Polytope

**Bearbeitet von:** Rüdiger Stephan

Kreis- oder Wege-Polytope sind die konvexen Hüllen der Inzidenzvektoren von (gerichteten) Kreisen oder Wegen in Graphen (Digraphen). In den vergangenen Jahren sind einige Veröffentlichungen erschienen, in denen partielle lineare Beschreibungen dieser Polytope sowie spezieller kardinalitätsbeschränkter Kreis- und Wege-Polytope gegeben werden [5, 6, 7, 16, 26, 55]. So untersuchen beispielsweise Bauer et al. [7] ungerichtete Kreise der Kardinalität höchstens  $k$  und Hartmann und Özlük [26] gerichtete Kreise der Kardinalität genau  $k$ . Im Allgemeinen Fall können wir die Kardinalitätsbeschränkung durch eine streng monoton wachsende Sequenz  $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_m)$  von zulässigen Kardinalitäten beschreiben.

Im Berichtszeitraum stand das Polytop der kardinalitätsbeschränkten gerichteten Kreise  $P_C^{\mathbf{a}}(D_n)$  über einen vollständigen Digraphen mit  $n$  Knoten im Mittelpunkt der Untersuchungen. In [58] zeigen wir, dass viele Ungleichungen, die Facetten für die im vorigen Absatz genannten Polytope induzieren, auch facettendefinierende Ungleichungen für  $P_C^{\mathbf{a}}(D_n)$  sind oder in solche transformiert werden können, da die Graphenstrukturen, die diesen Ungleichungen zugrunde liegen, oftmals dieselben sind oder angepasst werden können.

Ferner besteht ein enger Zusammenhang zwischen *gerichteten* Kreis- und Wege-Polytopen. Bezeichnet man mit  $D'$  die Kontraktion eines Digraphen  $D$  durch Schrumpfung zweier Knoten  $s$  und  $t$  zu einem neuen Knoten, sagen wir  $u$ , so entspricht offenbar jeder  $(s, t)$ -Weg in  $D$  genau einem Kreis, der den Knoten  $u$  besucht, in  $D'$ . Darauf basierend lässt sich zeigen, dass im Allgemeinen

$$\dim P_C^{\mathbf{a}}(D') = \dim P_{(s,t)\text{-path}}^{\mathbf{a}}(D) + 1$$

gilt, falls  $D'$  ein vollständiger Digraph ist. Mit einem relativ einfachen Algorithmus kann man nun Facetten von  $P_{(s,t)\text{-path}}^{\mathbf{a}}(D)$  zu Facetten von  $P_C^{\mathbf{a}}(D')$  liften [58]. Daher ist es von Vorteil, die in der Vergangenheit nicht so gut untersuchten Wegopolytope zu analysieren [38].

Schließlich haben wir IP-Formulierungen für kardinalitätsbeschränkte Kreis- und Wege-Polytope gefunden, deren Klassen von Ungleichungen in der Regel Facetten definieren und in



polynomialer Zeit separierbar sind. Sie bestehen zum einen aus den Ungleichungen der vorgeschlagenen IP-Formulierungen für die entsprechenden Polytope ohne Kardinalitätsbeschränkung – also jenen Bedingungen, die sicherstellen, dass ein ganzzahliger Vektor Inzidenzvektor eines (gerichteten) Weges oder Kreises ist – und zum anderen aus einer adaptierten Form der *cardinality forcing inequalities* [24].

### Geometrie und Kombinatorik von 0/1-Polytopen

**Bearbeitet von:** Volker Kaibel

**Kooperationspartner:** Rafael Mechtel, Günter M. Ziegler, TU Berlin

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

Konvexe Hüllen von 0/1-Vektoren (0/1-Polytope) bilden das Rückgrat der Polyedrischen Kombinatorik. In den vergangenen vier Jahrzehnten hat die Arbeit an speziellen 0/1-Polytopen zu enormen Verbesserungen hinsichtlich der praktischen Lösbarkeit von kombinatorischen Optimierungsproblemen geführt. Das Ziel dieses Projekts ist, die Klasse der 0/1-Polytope besser zu verstehen und so hoffentlich allgemeine geometrische und kombinatorische Eigenschaften von 0/1-Polytopen für konkrete kombinatorische (Optimierungs-)Probleme nutzbar zu machen.

Unser Hauptresultat über zufällige 0/1-Polytope beschreibt ein Phasenübergangs-Phänomen der Anzahl der  $k$ -dimensionalen Seiten (für konstante  $k$ ). Für jedes feste  $k$  existiert ein bestimmter Schwellwert-Exponent  $\tau_k$ , so dass in einem zufälligen 0/1-Polytop mit mehr (bzw. weniger) als  $2^{(\tau_k \pm \varepsilon)d}$  Ecken fast keine (bzw. fast alle)  $(k + 1)$ -elementigen Teilmengen von Ecken eine  $k$ -dimensionale Simplexseite bilden. Zentral für den Beweis dieses Resultats ist die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Baryzentren von zufälligen Teilmengen von 0/1-Vektoren.

Während für allgemeine (simpliciale) Polytope die Fragen nach den extremalen Anzahlen von Seitenflächen vollständig gelöst sind, gibt es bisher keine analogen Ergebnisse für 0/1-Polytope. Wir konnten in [35] beweisen, dass die minimale Anzahl  $f(d, n)$  von Facetten und der minimale Durchschnittsgrad  $g(d, n)$  von  $d$ -dimensionalen 0/1-Polytopen mit  $n$  Ecken die folgenden Ungleichungen erfüllen:  $f(d, n) \leq 3d$  (sogar:  $f(d, n) = d + o(d)$  für  $n = 2^{o(d)}$ ) und  $g(d, n) \leq d + 8$ .

Mihail und Vazirani vermuteten, dass die Graphen von 0/1-Polytopen stets exzellente Kanten-Expansionseigenschaften haben: Jede Teilmenge  $S$  von höchstens der Hälfte aller Ecken eines 0/1-Polytops sei über wenigstens  $|S|$  Kanten mit ihrem Komplement verbunden. Ein Beweis dieser Vermutung würde weitreichende Folgen für zahlreiche offene Probleme in der Theorie des randomisierten approximativen Zählens haben. Im Berichtszeitraum ist es uns gelungen, die (deutliche) Verschärfung dieser Vermutung auf die Ecken-Expansion zu widerlegen [23].

### Randomisierte Methoden in der Netzwerk-Optimierung

**Bearbeitet von:** Volker Kaibel, Matthias Peinhardt

**Kooperationspartner:** Bernd Gärtner, ETH Zürich, Schweiz; Micha Sharir, Tel Aviv University, Israel; Rafael Mechtel, Günter M. Ziegler, TU Berlin; DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt C6

**Förderung:** DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt B11

Netzwerke gehören zu den grundlegenden Modellierungswerkzeugen in den Anwendungen der Diskreten Mathematik, beispielsweise in den Schwerpunkten *Telekommunikation*, *Verkehr* und *Produktion und Logistik*. In diesem Projekt untersuchen wir algorithmische Netzwerk-

Probleme, insbesondere unter dem Aspekt des Einflusses von Zufall auf das Design und auf die (Laufzeit-)Analyse von Verfahren.

Ein Kernproblem in verschiedenen Algorithmen der Netzwerk-Optimierung ist das *Bottleneck-Shortest-Path Problem*, *BSP*, welches danach fragt, in einem mit Kantenkapazitäten versehenen Netzwerk einen Weg zwischen zwei vorgeschriebenen Knoten zu finden, dessen minimale Kantenkapazität möglichst groß ist. Dieses Problem ist eng verwandt mit dem Finden eines kürzesten Wegs (*Shortest-Path Problem*, *SPP*). In der Tat waren bisher die besten bekannten Algorithmen für das BSP Adaptionen von Verfahren für das SPP. Unser Hauptresultat ist der erste Algorithmus für das BSP (für den gerichteten Fall), der schneller ist als alle bekannten SP-Algorithmen [37].

Auch für die Netzwerk-Optimierung sind Theorie und Praxis der Linearen Programmierung von fundamentaler Bedeutung. Eine wichtige Frage ist, ob Randomisierung hilft, den Simplex-Algorithmus beweisbar effizient zu machen. Neben einer Analyse dreidimensionaler LPs, die beweist, dass die *Random-Edge-Pivot-Regel* hier die beste Laufzeit unter den bekannten Regeln liefert [36], konnten wir erstmals nicht-triviale obere Schranken für die Laufzeit dieser Variante des Simplex-Verfahrens auf Würfeln beliebiger Dimension bestimmen [18].

Weitere Arbeitsthemen waren die Untersuchung eines verallgemeinerten Flussproblems, das für die Online-Strategie-Bewertung mittels Markov-Entscheidungsproblemen wichtig ist [27], das bipartite Matching-Problem unter dem Gesichtspunkt der „Smoothed Analysis“ und die Graphen-Struktur von Transport-Polytopen.

Im Berichtszeitraum haben beide Projektmitglieder intensiv in der Organisation der *Eleventh Conference on Integer Programming and Combinatorial Optimization* (IPCO XI) an der TU Berlin gewirkt.

## Diskrete Morse-Funktionen

**Bearbeitet von:** Marc Pfetsch

**Kooperationspartner:** Michael Joswig, TU Darmstadt

Diskrete Morse-Funktionen wurden von Forman [17] als diskretes Analogon zur klassischen glatten Morse-Theorie eingeführt. Sie haben vielfältige Anwendungen, z. B. in der (topologischen) Kombinatorik, siehe beispielsweise Babson, Björner, Linusson, Shareshian und Welker [3]. Einige Kompressionsalgorithmen für triangulierte Modelle berechnen implizit eine diskrete Morse-Funktion, siehe Lewiner, Lopes und Tavares [44]. Die wesentlichen Eigenschaften diskreter Morse-Funktionen für einen simplizialen Komplex  $\Delta$  lassen sich durch sogenannte *Morse-Matchings* beschreiben, d. h. *Matchings* im Hasse-Diagramm von  $\Delta$ , so dass die folgende Azyklizitätsbedingung erfüllt ist: Wenn die Orientierung aller Kanten des Matchings umgedreht wird, so ist der resultierende gerichtete Graph *azyklisch*. Ein Beispiel ist in Abbildung 2.38 zu sehen.

Forman [17] leitete die folgende Schlüsseleigenschaft von Morse-Matchings her: Ein simplizialer Komplex  $\Delta$  kann mit Hilfe eines Morse-Matchings auf einen Zellkomplex deformiert (kollabiert) werden, so dass für jede *kritische* Seite von  $\Delta$  (das heißt, eine Seite, die nicht inzident zu einer Kante des Morse-Matchings ist) genau eine Zelle entsteht. Je weniger kritische Seiten also ein Morse-Matching besitzt, desto kleiner wird der entstehende Zellkomplex. Man ist daher an optimalen Morse-Matchings interessiert, d. h. Morse-Matchings maximaler Kardinalität – dies ist äquivalent zur Minimalität der Anzahl kritischer Seiten.

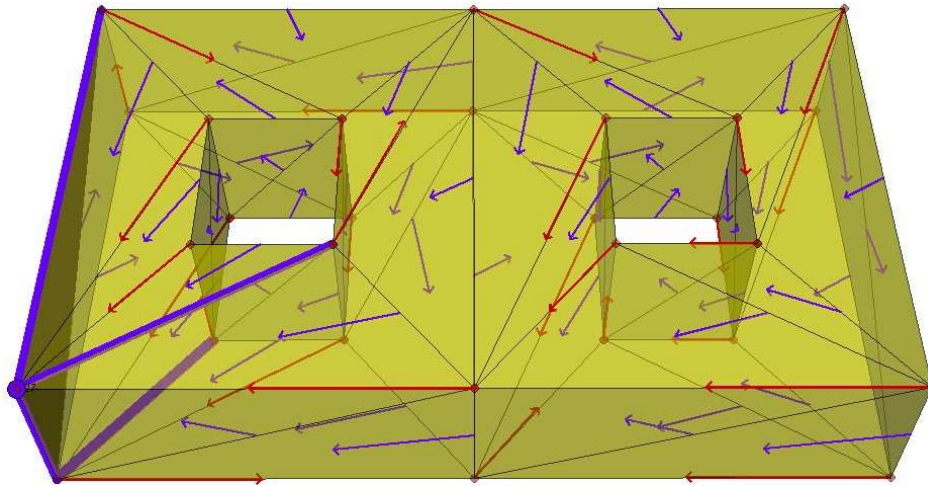


ABBILDUNG 2.38: Triangulierung eines Doppeltorus mit eingezeichnetem Morse Matching. Die Pfeile geben Matchings an (von der nieder- zur höher-dimensionalen Seite). Das Morse Matching besitzt ein kritisches Dreieck (links, dunkel eingezeichnet), eine kritische Ecke (links) und vier kritische Kanten (fett eingezeichnet). Das Bild wurde mit Hilfe von `polymake` und `JavaView` [56] erstellt.

Ziel dieses Projekts ist die Entwicklung von Methoden zur Berechnung möglichst guter Morse-Matchings in obigem Sinne, was auf ein kombinatorisches Optimierungsproblem führt. Im Berichtszeitraum haben wir einen Branch-and-Cut-Algorithmus hierfür entwickelt [33, 34]. Zunächst konnten wir beweisen, dass es NP-schwer ist, ein optimales Morse-Matching zu berechnen. Es stellte sich jedoch bei dem Großteil der vorliegenden Instanzen heraus, dass die untere Schranke, welche man durch die sogenannten Betti-Zahlen erhält, scharf ist. Dies hat zur Konsequenz, dass es genügt, eine optimale Lösung zu *finden*. Eine solche konnten wir in der Regel mit einer Heuristik von Forman [17] finden. In den Fällen, in denen die Schranke nicht scharf ist, konnten wir mit dem Branch-and-Cut-Algorithmus kleinere bis mittelgroße Instanzen optimal lösen. Die oben genannte Heuristik sowie einige nützliche Visualisierungsmethoden haben wir in der neuen `polymake` Version 2.2 verfügbar gemacht [19, 20].

In der Zukunft soll der bisherige Ansatz verfeinert werden, damit auch größere Instanzen (in denen die „Betti-Schranke“ nicht scharf ist) optimal gelöst werden können. Weiterhin wollen wir Approximationsalgorithmen untersuchen.

## Publikationen

- [1] N. E. Aguilera, M. S. Escalante und G. L. Nasini, *A generalization of the perfect graph theorem under the disjunctive index*, *Math. Oper. Res.* **27** (2002), 460–469.
- [2] J. Alber, F. Dorn und Rolf Niedermeier, *Experimental evaluation of a tree decomposition based algorithm for vertex cover on planar graphs*, *Discrete Appl. Math.* **145** (2005), 210–219.
- [3] E. Babson, A. Björner, S. Linusson, J. Shareshian und V. Welker, *Complexes of not  $i$ -connected graphs*, *Topology* **38** (1999), 271–299.

- [4] E. Babson und D.N. Kozlov, *Proof of the Lovász Conjecture*, Preprint, 37 Seiten, 2004, arXiv:math.CO/0402395v3, erscheint in: Ann. Math.
- [5] E. Balas und M. Oosten, *On the cycle polytope of a directed graph*, Networks **36** (2000), 34–46.
- [6] P. Bauer, *A Polyhedral Approach to the Weighted Girth Problem*, Aachen 1995.
- [7] P. Bauer, J. T. Linderoth und M. W. P. Savelsbergh, *A branch and cut approach to the cardinality constrained circuit problem*, Math. Programming, Ser. A **91** (2002), 307–348.
- [8] A. Björner und F. H. Lutz, *Simplicial manifolds, bistellar flips and a 16-vertex triangulation of the Poincaré homology 3-sphere*, Exp. Math. **9** (2000), 275–289.
- [9] 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 Models No. 2003.04.001 (2003), online<sup>2</sup> verfügbar.
- [10] H. L. Bodlaender, A. Grigoriev und A. M. C. A. Koster, *Treewidth lower bounds with brambles*, Proc. 13th Annual European Symposium on Algorithms, ESA2005 (G. S. Brodal and S. Leonardi, Hg.), Lecture Notes in Computer Science, vol. 3669, Springer-Verlag, 2005, pp. 391–402.
- [11] H. L. Bodlaender, A. M. C. A. Koster und T. Wolle, *Contraction and treewidth lower bounds*, erscheint in: J. Graph Algorithms Appl.
- [12] J. Bokowski, *On heuristic methods for finding realizations of oriented matroids*, Preprint, 4 Seiten, 2006.
- [13] U. Brehm und F. H. Lutz, *Triangulations of Seifert manifolds*, in Vorbereitung.
- [14] W. Cook und P. D. Seymour, *Tour merging via branch-decomposition*, INFORMS J. Comput. **15** (2003), 233–248.
- [15] P. Csorba und F. H. Lutz, *Graph coloring manifolds*, Report 06-11, ZIB, 2005, arXiv:math.CO/0510177.
- [16] G. Dahl und L. Gouveia, *On the directed hop-constrained shortest path problem*, Oper. Res. Lett. **32** (2004), 15–22.
- [17] R. Forman, *Morse theory for cell-complexes*, Advances in Math. **134** (1998), 90–145.
- [18] B. Gärtner und V. Kaibel, *Two New Bounds for the Random-Edge Simplex Algorithm*, Report 05-14, ZIB, 2005.
- [19] E. Gawrilow und M. Joswig, *polymake: a framework for analyzing convex polytopes*, Polytopes – Combinatorics and Computation (G. Kalai und G. M. Ziegler, Hg.), DMV Seminar, Bd. 29, Birkhäuser, Basel, 2000, 43–74.
- [20] E. Gawrilow und M. Joswig, *polymake Version 2.2*, <http://www.math.tu-berlin.de/polymake>, 2004, Mit Beiträgen von T. Schröder und N. Witte.

---

<sup>2</sup><http://www.eg-models.de/2003.04.001>

- 
- [21] S. Gerke und C. McDiarmid, *Graph imperfection I*, J. Combinatorial Theory Ser. B **83** (2001), 58–78.
- [22] S. Gerke und C. McDiarmid, *Graph imperfection II*, J. Combinatorial Theory Ser. B **83** (2001), 79–101.
- [23] R. Gillmann und V. Kaibel, *A class of 0/1-polytopes with exponentially small vertex-expansion*, in Vorbereitung.
- [24] M. Grötschel, *Cardinality homogeneous set systems, cycles in matroids, and associated polytopes*, in M. Grötschel (Hg.): *The sharpest cut: the impact of Manfred Padberg and his work*, MPS-SIAM, 2004, 99–120.
- [25] M. Grötschel, L. Lovász und A. Schrijver, *The ellipsoid method and its consequences in combinatorial optimization*, *Combinatorica* **1** (1981), 169–197.
- [26] M. Hartmann und Ö. Özlük, *Facets of the  $p$ -cycle polytope*, *Discrete Appl. Math.* **112** (2001), 147–178.
- [27] S. Heinz, V. Kaibel, M. Peinhardt, J. Rambau und A. Tuchscherer, *Relative policy evaluation in constant-degree Markov decision processes*, in Vorbereitung.
- [28] I. V. Hicks, A. M. C. A. Koster und E. Kolotoğlu, *Branch and tree decomposition techniques for discrete optimization*, TutORials 2005 (J. Cole Smith, Hg.), INFORMS Tutorials in Operations Research Series, INFORMS Annual Meeting, 2005, 1–29.
- [29] S. Hougardy, F. H. Lutz und M. Zelke, *Polyhedra of genus 2 with 10 vertices and minimal coordinates*, Report 06–12, ZIB, 2005, arXiv:math.MG/0507592.
- [30] S. Hougardy, F. H. Lutz und M. Zelke, *Polyhedra of genus 3 with 10 vertices and minimal coordinates*, Report 06-13, ZIB, 2005.
- [31] S. Hußmann, B. Lutz-Westphal *Mathematik erleben - Kombinatorische Optimierung lehren und lernen*, Vieweg (erscheint 2006)
- [32] M. Joswig und F. H. Lutz, *One-point suspensions and wreath products of polytopes and spheres*, J. Combinatorial Theory Ser. A **110** (2005), 193–216.
- [33] M. Joswig und M. E. Pfetsch, *Computing optimal Morse matchings*, Report 04-37, ZIB, 2004.
- [34] M. Joswig und M. E. Pfetsch, *Computing optimal Morse matchings*, *SIAM J. Discrete Math.* **20** (2006), 11–25.
- [35] V. Kaibel und R. Mechtel, *Reflux-initial 0/1-polytopes*, erscheint in: J. Combinatorial Theory Ser. A.
- [36] V. Kaibel, R. Mechtel, M. Sharir und G. M. Ziegler, *The simplex algorithm in dimension three*, *SIAM J. Comput.* **34** (2005), 475–497.
- [37] V. Kaibel und M. Peinhardt, *The bottleneck-shortest path problem*, in Vorbereitung.
- [38] V. Kaibel und R. Stephan, *Facets of the  $p$ -path polytope*, in Vorbereitung.

- [39] E. G. Köhler und F. H. Lutz, *Triangulated Manifolds with Few Vertices: Vertex-Transitive Triangulations I*, Report 06-09, ZIB, 2005, arXiv:math.GT/0506520.
- [40] A. M. C. A. Koster, S. P. M. van Hoesel und A. W. J. Kolen, *Solving partial constraint satisfaction problems with tree decomposition*, Networks **40** (2002), 170–180.
- [41] A. M. C. A. Koster und A. K. Wagler, *Comparing Imperfection Ratio and Imperfection Index for Graph Classes*, Report 05-50, ZIB, 2005.
- [42] A. M. C. A. Koster, T. Wolle und H. L. Bodlaender, *Degree-based treewidth lower bounds*, Proc. 4th International Workshop on Experimental and Efficient Algorithms WEA 2005 (Sotiris E. Nikolettseas, Hg.), Lecture Notes in Computer Science, vol. 3503, Springer-Verlag, 2005, 101–112.
- [43] W. Kühnel und F. H. Lutz, *A census of tight triangulations*, Periodica Math. Hung. **39** (1999), 161–183.
- [44] T. Lewiner, H. Lopes und G. Tavares, *Applications of Forman’s discrete Morse theory to topology visualization and mesh compression*, IEEE Trans. Vis. Comput. Graph. **10** (2004), 499–508.
- [45] L. Lovász, *Kneser’s conjecture, chromatic number, and homotopy*, J. Comb. Theory, Ser. A **25** (1978), 319–324.
- [46] 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), online<sup>3</sup> verfügbar.
- [47] F. H. Lutz, *Vertex-minimal not vertex-decomposable balls*, Electronic Geometry Models No. 2003.06.001 (2004), online<sup>4</sup> verfügbar.
- [48] F. H. Lutz, *Small examples of non-constructible simplicial balls and spheres*, SIAM J. Discrete Math. **18** (2004), 103–109.
- [49] F. H. Lutz, *Triangulated Manifolds with Few Vertices: Geometric 3-Manifolds*, Report 03–36, ZIB, 2003, arXiv:math.GT/0311116.
- [50] F. H. Lutz, *Triangulated Manifolds with Few Vertices: Centrally Symmetric Spheres and Products of Spheres*, Report 04–11, ZIB, 2004, arXiv:math.MG/0404465.
- [51] F. H. Lutz, *Enumeration and random realization of triangulated surfaces*, Report 06-07, ZIB, 2005, arXiv:math.CO/0506316.
- [52] F. H. Lutz, *Triangulated Manifolds with Few Vertices: Combinatorial Manifolds*, Report 06-08, ZIB, 2005, arXiv:math.CO/0506372.
- [53] F. H. Lutz, *Combinatorial 3-manifolds with 10 vertices*, Report 06–14, ZIB, 2006.
- [54] F. H. Lutz, *The Manifold Page*, online<sup>5</sup>, 1999–2006.

---

<sup>3</sup><http://www.eg-models.de/2003.05.004>

<sup>4</sup><http://www.eg-models.de/2003.06.001>

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

- [55] V. H. Nguyen und J.-F. Maurras, *On the linear description of the  $k$ -cycle polytope*, Int. Trans. Oper. Res. **8** (2001), 673-692.
- [56] K. Polthier, K. Hildebrandt, E. Preuß und U. Reitebuch, *JavaView Version 3.95*, <http://www.javaview.de>, 2005.
- [57] C. Schultz, *Small models of graph colouring manifolds and the Stiefel manifolds  $Hom(C_5, K_n)$* , Preprint, 19 Seiten, 2005, arXiv:math.CO/0510535.
- [58] R. Stephan, *Polytopes associated with length restricted directed circuits*, Diplomarbeit, TU Berlin, 2005.
- [59] T. Wolle, *Computational aspects of treewidth. Lower bounds and network reliability*, Ph.D. thesis, Faculty of Science, Universität Utrecht, Utrecht, Niederlande, 2005.

### 2.2.11 Telekommunikation

Der Wettbewerb auf dem Telekommunikationsmarkt wird immer härter. Deutlich sichtbare Zeichen dieser Entwicklung sind die „Preiskriege“ zwischen den Anbietern, die von unübersehbaren Werbekampagnen begleitet werden. *Flatrates* werden sowohl für Breitband-Internet als auch für Mobiltelefonie in großem Stil vermarktet. In dieser Situation kann ein Anbieter entscheidende Wettbewerbsvorteile gewinnen, indem er seine Telekommunikationsnetze effizient plant und ausbaut.

Auf der anderen Seite wird die Technologie komplizierter, die es ermöglicht, neue Dienste und Anwendungen anzubieten. Im Mobilfunkbereich ist der neue Standard UMTS auf dem Vormarsch. Auch „hinter den Kulissen“, also im *Backbone*-Netz, schreitet die Entwicklung fort. Die Aufgabenstellungen zur Netzplanung sind heute komplexer denn je.

Das ZIB vereint im Bereich Telekommunikation seine Expertise in mathematischer Modellierung und Optimierung mit Erfahrung in allen Bereichen der modernen Telekommunikation. Die Projekte am ZIB decken ein breites Spektrum ab. Es reicht von der Planung von Funkzugangs- und von *Backbone*-Netzen mit den heute relevanten Technologien, über die Verbesserung von Kommunikationsprotokollen, bis hin zur Untersuchung von Märkten, in denen Telekommunikation wichtig ist, und ihren Mechanismen. Der Schwerpunkt liegt auf Methoden, die in der Praxis verwendet werden können.

Im Bereich Telekommunikation leistet das ZIB außerdem wichtige Aufgaben für die „Community“: in den Projekten *FAP-Web*, *UMTS-Funknetzplanung* und in dem neuen Projekt *SNDlib* werden umfangreiche Daten zu Festnetz- und Funkplanungsproblemen frei verfügbar bereitgestellt und gepflegt. Diese werden als Referenzdatensätze und für *Benchmark*-Tests genutzt. Die Datensätze finden breite Verwendung bei Wissenschaftlern in diesem Bereich. Dadurch können Forschungsarbeiten besser untereinander verglichen werden.

#### Planung und Konfiguration der UMTS-Funkschnittstelle

**Bearbeitet von:** Andreas Eisenblätter, Hans-Florian Geerdes, Martin Grötschel, Thorsten Koch

**Kooperationspartner:** atesio GmbH, Berlin

**Förderung:** DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt B4; atesio GmbH, Berlin

Mit einer geschickten Planung von Mobilfunknetzen soll erreicht werden, dass der Kunde möglichst jederzeit und überall mobile Kommunikationsdienste in hoher Qualität benutzen kann – und das zu einem angemessenen Preis. Dazu ist es wichtig, dass die *Netzabdeckung* hoch ist, dass genügend *Kapazität* vorhanden ist, und dass die Netzinfrastruktur effizient eingesetzt wird. Abbildung 2.39 zeigt die schematische Darstellung eines Funknetzes. Weltweit setzen die Mobilfunkbetreiber heute auf UMTS (*Universal Mobile Telephony System*): Die Geräte, die den neuen Mobilfunkstandard beherrschen, können sehr viele Daten in kurzer Zeit senden und empfangen. Die Übertragung findet viel schneller statt als mit herkömmlichen Technologien wie GSM. Völlig neue mobile Dienste sind dadurch möglich, zum Beispiel der Empfang von TV-Sendungen auf dem Handy, schnelles Web-Surfen oder Videotelefonie.



ABBILDUNG 2.39: Ein UMTS-Funknetz in der Berliner Innenstadt (schematische Darstellung). Durch die Antennen (Pfeile) wird das Gebiet in Zellen aufgeteilt.

Die Funknetzplanung ist im Fall von UMTS schwieriger als bei älteren Funksystemen, denn die angebotenen Dienste sind vielfältiger und die Technik ist komplexer. Die hohen Geschwindigkeiten werden bei UMTS unter anderem durch die neue Funktechnologie W-CDMA erreicht, bei der alle Basisstationen im selben Frequenzbereich senden. Dadurch stören sich die Signale von benachbarten Antennen gegenseitig – man spricht von Interferenz. Diese Interferenz muss möglichst klein gehalten werden. Dazu muss sie bei der Planung angemessen berücksichtigt werden.

In diesem Projekt werden Methoden der mathematischen Optimierung eingesetzt, um UMTS-Funknetze zu planen. Die Voraussetzung für eine erfolgreiche Optimierung ist die effiziente Bewertung der Leistungsfähigkeiten eines Netzes – im Falle von UMTS eine echte Herausforderung. Im Gegensatz zu den Vorgängertechnologien ist es nämlich bereits schwierig zu bestimmen, wie viele Nutzer von einer Zelle bedient werden können, oder in welcher Entfernung von einer Antenne ihre Signale noch gut genug zu empfangen sind.

Für solche und ähnliche Fragestellungen wurden deshalb zunächst Verfahren entwickelt, die die Leistungsfähigkeit eines UMTS-Funknetzes bewerten. Normalerweise geschieht dies durch aufwendige Simulationen, deren Laufzeit zu hoch ist, um sie innerhalb moderner Optimie-



rungsmethoden einzusetzen. Im Projekt wurde ein neues, kompaktes Modell entwickelt, das auf *erwarteter Interferenzkopplung* basiert [15]. Es hat gegenüber den herkömmlichen Methoden einen entscheidenden Geschwindigkeitsvorteil. Im Berichtszeitraum wurde unter anderem nachgewiesen, dass die Genauigkeit der Methoden bei der Vorhersage der *Zelllast* dennoch mit Simulationsverfahren vergleichbar ist und für die Funknetzplanung ausreicht [16]. Auf der Basis der effizienten Modelle zur Leistungsbewertung sind neuartige Optimierungsverfahren entwickelt und verfeinert worden [14].

Das Modell zur Leistungsbewertung wurde außerdem weiterentwickelt, um das Verhalten des Systems in Situationen, in denen zu viele Nutzer das Netz benutzen wollen, besser abzubilden [17]. Das Blockierverhalten des Netzes wurde in die kompakten Modelle zur Leistungsbeurteilung integriert, so dass diese Modelle nicht mehr davon ausgehen müssen, dass alle Nutzer bedient werden können. Darüber hinaus wurden Methoden entwickelt, die die Blockierungswahrscheinlichkeit – eine wichtige Kenngröße für Netzbetreiber – effizient und zuverlässig voraussagen können. Auch diese Information kann nun für bessere Entscheidungen in der Optimierung benutzt werden.

Außerdem haben die Projektmitarbeiter im Berichtszeitraum an einem neuen Buch über UMTS [29] mitgewirkt, das sich an Praktiker wendet. Dabei wurde zu den Kapiteln über Modellierung von UMTS-Systemen und zu Optimierungsansätzen maßgebliche Beiträge geleistet. Auch in diesem Jahr wurde die Nutzung von realistischen, vergleichbaren Datensätzen [18] für die Forschung ermöglicht und propagiert. In der entsprechenden Initiative MORANS<sup>6</sup> im Rahmen des internationalen Verbundes COST 273<sup>7</sup> hat sich das Projekt weiter engagiert.

### FAP-Web

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

Seit Juli 2000 wird auf dem Webserver des ZIBs das FAP-Web [13] gepflegt. Das FAP-Web ist ein Internet-basiertes Informations- und Datenangebot für Forscher, die Algorithmen für Frequenzzuweisungsprobleme entwickeln. Praxisnahe Testdaten einschließlich Referenzlösungen für mehrere Varianten von Frequenzzuweisungsproblemen stehen zur Verfügung und werden international für wissenschaftliche Veröffentlichungen verwendet.

Damit die Webseite attraktiv bleibt, wird das Literaturverzeichnis regelmäßig aktualisiert. Dieses wird seit einigen Jahren auch gespiegelt durch „The Collection of Computer Science Bibliographies“ [1], eine Sammlung mit über 2 Millionen Referenzen zu wissenschaftlicher Literatur in der Informatik und über 300 000 Abfragen im Monat.

### Integrierte Planung von Multi-Level-/Multi-Layer-Netzen

**Bearbeitet von:** Andreas Bley, Sebastian Orłowski, Roland Wessäly

**Kooperationspartner:** atesio GmbH, Berlin; E-Plus Mobilfunk GmbH & Co. KG, Düsseldorf; T-Systems Nova GmbH, Berlin

**Förderung:** DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt B3; atesio GmbH, Berlin

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 2.40 illustriert im linken Teil die Un-

---

<sup>6</sup><http://morans.cost273.org>

<sup>7</sup><http://www.lx.it.pt/cost273>

tergliederung 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 2.40 ist ein Multi-Layer-Netz dargestellt, in dem die einzelnen Schichten unterschiedliche Technologien nutzen. Im Beispiel wird der IP-Verkehr über ATM, SDH und schließlich optisch über WDM übertragen.

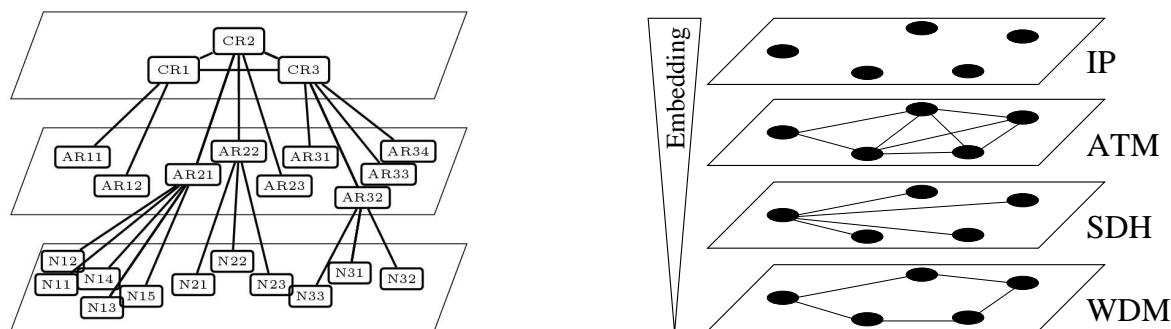


ABBILDUNG 2.40: Multi-Level- und Multi-Layer-Netze

Bei der Planung eines solchen Netzes sind viele Entscheidungen zu fällen, die sich in hohem Maße gegenseitig beeinflussen. Dazu gehören Entscheidungen über Standorte und Verbindungen, die Art und Kapazität der Verbindungen zwischen den Standorten, die Konfiguration der Hardware an den Standorten sowie das Routing aller Kommunikationsbedarfe. Hierbei müssen besondere Ausfallsicherheitsbedingungen eingehalten werden. Ziel des Projekts ist die Entwicklung von Modellen und Algorithmen zur *integrierten* Planung mehrerer Layer und Level, um die bestehenden Abhängigkeiten angemessen zu berücksichtigen.

Im Multi-Level-Bereich sind in den letzten Jahren am ZIB gemischt-ganzzahlige lineare Programme und Lagrange-basierte Algorithmen für mehrere Planungs- und Ausfallsicherheitsszenarien entwickelt und erfolgreich getestet worden. Dadurch sind am ZIB zwei neue Projekte entstanden (*X-WiN* und *Optimale Kommunikationsstrukturen für dezentrale Energienetze*), in denen die entwickelten Methoden im letzten Jahr erfolgreich zur Unterstützung von Planungen in der Praxis eingesetzt wurden.

Im Multi-Layer-Bereich wurden im Berichtszeitraum verschiedene eingeschränkte Planungsaufgaben untersucht, da sich das gesamte Planungsproblem als zu komplex erwiesen hat, um es in einem Schritt zu lösen. Beispielsweise wurde ein ganzzahlig-lineares Programm entwickelt und getestet, das Kapazitätsbedarfe und Anforderungen an die Ausfallsicherheit einer zugrundeliegenden physikalischen Schicht die Optimierung einbezieht, wenn eine logische Netzschicht geplant wird [30].

Parallel dazu wurde im Rahmen einer Diplomarbeit ein Rekonfigurationsproblem untersucht, bei dem neue Verkehrsanforderungen so in ein bestehendes Netz integriert werden sollen, dass sich an der bestehenden Konfiguration möglichst wenig ändert. Auch bei den hierfür entwickelten Modellen und Branch-and-Price-Algorithmen wurden Ausfallsicherheitsanforderungen einer zugrundeliegenden physikalischen Schicht in der Planung berücksichtigt [33].

In Zusammenarbeit mit Pietro Belotti (DEI, Politecnico di Milano) wurde im Rahmen wechselseitiger Gastaufenthalte ein Basismodell für die integrierte Planung von zwei Netz-

schichten (z. B. IP über WDM) entwickelt, das als Teilproblem in vielen Multi-Layer-Planungsproblemen auftaucht [3].

Zusammen mit Claus Gruber von der TU München wurde das bereits zuvor am ZIB entwickelte Ausfallsicherheitsmodell *Demand-wise Shared Protection (DSP)* näher untersucht, das in mehreren technologischen Layern Anwendung finden kann. Im Rahmen einer Rechenstudie wurde DSP auf praxisnahen Planungsdaten unseres Kooperationspartners T-Systems mit den Ausfallsicherheitskonzepten *1+1-Protection* und *Shared Path Protection* verglichen [20].

### Optimierung des Wissenschaftsnetzes X-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 in Deutschland untereinander und mit den Wissenschaftsnetzen in Europa und auf anderen Kontinenten. Als nunmehr fünfte Generation des nationalen Forschungsnetzes ersetzt das X-WiN seit Anfang 2006 seinen technischen Vorgänger, das Gigabit-Wissenschaftsnetz G-WiN. Mit über 500 Teilnehmern, Anschlusskapazitäten von derzeit bis zu 10 Gigabit/s und einem Multi-Gigabit-Kernnetz zwischen mehr als 40 Kernnetz-Standorten zählt das X-WiN zu den leistungsfähigsten Kommunikationsnetzen weltweit. Es wird den neuen multimedialen Anwendungen und den speziellen Anforderungen von Grid/e-Science an Wissenschaftsnetze gerecht.

Dieses Projekt entwickelt mathematische Modelle und Algorithmen, die Aufbau und Betrieb des X-WiN optimieren. Sie sollen den DFN-Verein bei der Lösung der praktisch auftretenden Planungsprobleme unterstützen.

Im Vorjahr wurden in erster Linie die Probleme der Netzhierarchie- und Trassenplanung untersucht. Dabei war zu entscheiden, wie viele Hierarchieebenen das Netz haben soll, wie viele, und welche Kernnetzknotten einzurichten sind, und welche Glasfasertrassen oder Wellenlängen zwischen diesen beschafft werden sollen, um später mit dieser Infrastruktur ein leistungsfähiges aber zugleich kostengünstiges Kommunikationsnetz betreiben zu können [2, 7]. Die dafür entwickelten Optimierungsverfahren wurden im Jahr 2005 im Rahmen der Ausschreibung des X-WiN zur wirtschaftlichen Bewertung der angebotenen Trassen verwendet.

Im Berichtszeitraum wurde in erster Linie die Optimierung der logischen Netzstruktur des X-WiN untersucht. Dabei muss entschieden werden, zwischen welchen Kernnetzknotten optische Verbindungen (sog. Lichtwege) im Glasfasernetz geschaltet werden sollen. Prinzipiell können optische Verbindungen von jedem Knoten zu jedem anderen Knoten entlang eines beliebigen Weges im Glasfasernetz geschaltet werden. Eine Ausnahme stellen allerdings diejenigen Knoten dar, die nicht durch Glasfasern, sondern durch gemietete Wellenlängen-Trassen an das X-WiN angebunden sind. Durch diese Knoten können keine optischen Transit-Verbindungen geschaltet werden. Die optischen Verbindungen und gemieteten Wellenlängen können mit unterschiedlichen Übertragungstechnologien (SDH, Gigabit-Ethernet usw.) betrieben werden. Je nach Länge und verwendeter Übertragungstechnologie sind an den Endknoten der Verbindung entsprechende optische Endgeräte und Router-Interfacekarten nötig. Das Ziel der Netzoptimierung ist die Minimierung der Kosten für gemietete Wellenlängen, optische Endgeräte sowie Router und Interfacekarten.

Um möglichst wenig Geld für neue Geräte auszugeben, sollen dabei bereits vorhandene Rou-

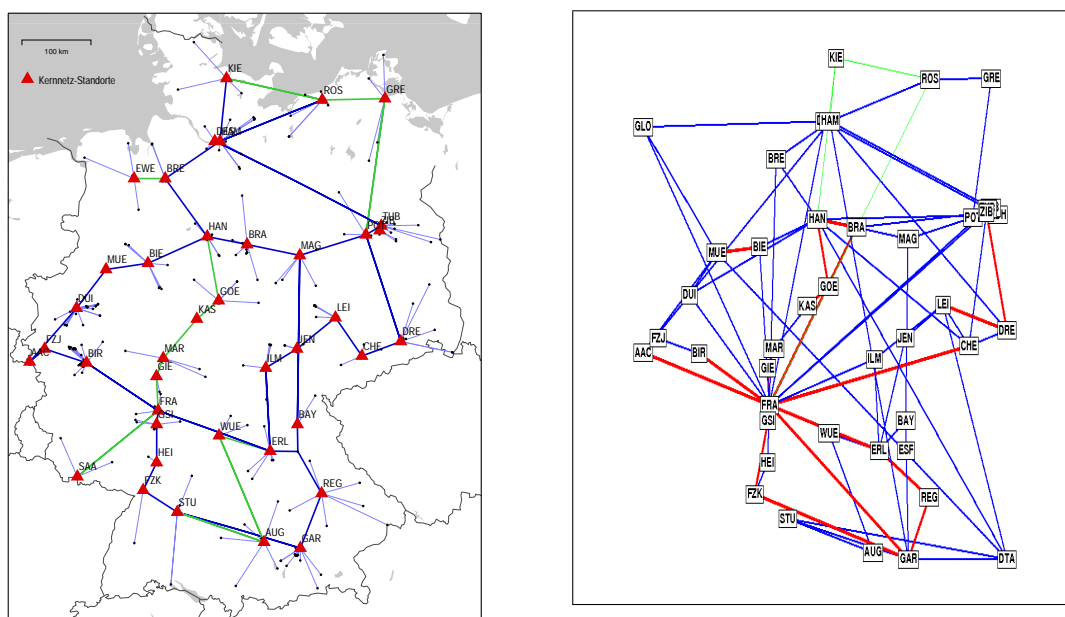


ABBILDUNG 2.41: Das Trassennetz des X-WiN (links, blau: Fasern, grün: Wellenlängen) und ein berechnetes logisches Netz für ein Planungsszenario (rechts, rot:  $\geq 20$  Gigabit/s, blau: 10 Gigabit/s, grün: 1 Gigabit/s), Stand Sommer 2005. (Webversion ist farbig)

ter und Interfacekarten bestmöglich wiederverwendet werden. Neben den unterschiedlichen Technologien (SDH, Ethernet, verschiedene Routertypen und optische Systeme) und den prognostizierten Verkehrsanforderungen muss die Planung auch die Ausfallsicherheit des Netzes berücksichtigen. Das logische Netz muss so entworfen werden, dass es selbst dann noch verbunden bleibt und genügend Bandbreite vorhält, wenn einzelne Trassenabschnitte oder Kernnetzknotten ausfallen. Neben der Topologie und den Bandbreiten des logischen Netzes müssen außerdem die Routinggewichte für den IP-Dienst festgelegt werden.

In Zusammenarbeit mit dem Projekt *Integrierte Planung von Multi-Level/Multi-Layer-Netzwerken* wurde ein speziell auf die Situation bei der X-WiN-Planung zugeschnittener Lösungsansatz entwickelt. Basierend auf der Analyse der prognostizierten Verkehrsanforderungen und der Topologie des zugrundeliegenden Glasfasernetzes wird zunächst heuristisch eine Menge von möglichen, sinnvollen optische Verbindungen erzeugt. In einem zweiten Schritt wird dann mit etablierten Methoden zur Optimierung von ausfallsicheren *Single-Layer*-Netzen entschieden, welche dieser potentiellen Verbindungen mit welcher Übertragungstechnologie eingerichtet und welche Endgeräte dazu an welchen Knoten installiert werden sollen. Im Zuge der Planung der ersten Ausbaustufe des X-WiN wurden mit diesem Ansatz Optimierungsrechnungen für verschiedene Kosten- und Verkehrsszenarien durchgeführt. Abbildung 2.41 zeigt exemplarisch die Topologie des Trassennetzes und eines berechneten logischen Netzes für ein Planungsszenario.

Neben der Modellierung und Lösung der praktischen Planungsprobleme beim Aufbau des X-WiN wurde der DFN-Verein auch bei der Entwicklung von generellen Konzepten beratend unterstützt. Gemeinsam mit dem DFN-Verein wurde im Vorjahr ein einfaches aber äußerst effizientes Konzept für die redundante Doppelanbindung von mehreren Knoten der mittleren Netzebene an verschiedene Knoten der höchsten Netzebene entwickelt. Dieses wird mittlerweile auch als „Nachbarlösungskonzept“ für die redundante Anbindung der Nutzerstandorte an das Kernnetz empfohlen [31]. Die bei der Planung des X-WiN verwendeten praktischen Methoden wurden in den DFN-Mitteilungen publiziert [7], neue theoretische Resultate auf mathematischen Konferenzen und in Fachzeitschriften [4, 6, 5].

### **Efficient Integrated Backbone (EIBONE)**

**Bearbeitet von:** Arie Koster, Sebastian Orlowski, Adrian Zymolka

**Kooperationspartner:** Siemens AG, München; T-Systems Enterprise Services GmbH, Berlin; Ericson GmbH, Backnang; atesio GmbH, Berlin; Lucent Technologies Network Systems GmbH, Nürnberg; CoreOptics GmbH, Nürnberg; Alcatel SEL AG, Stuttgart; VPI-systems GmbH, Berlin; Adaptif Photonics GmbH, Hamburg; u2t Photonics AG, Berlin; Fraunhofer-Institut für Nachrichtentechnik – Heinrich-Hertz-Institut, Berlin; TU Berlin; TU München; TU Hamburg-Harburg; Universität Stuttgart; Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg

**Förderung:** BMBF-Förderschwerpunkt EIBONE (Efficient Integrated Backbone)

Im Mittelpunkt des bundesweiten BMBF-Vorhabens EIBONE steht die Erforschung und Entwicklung von Grundlagen für ein effizientes, robustes und zuverlässiges Kommunikationsnetz, mit dem die Bandbreiten- und Diensteanforderungen der Gesellschaft des 21. Jahrhunderts erfüllt werden können. Die Forschungsschwerpunkte von EIBONE sind auf das Backbone, d. h. das Kern- und Metronetz eines zukünftigen Breitband-Kommunikationsnetzes konzentriert. Damit dieses Vorhaben erfüllt werden kann, müssen layerübergreifende Netzarchitekturen, Routingprotokolle und Ausfallsicherheitsmechanismen entwickelt werden.

Es gibt eine Vielzahl von Möglichkeiten, solche Konzepte zu evaluieren. Gängige Verfahren sind oft prozessorientiert, d. h. die einzelnen Layer werden in einem iterativen Prozess separat behandelt, ohne dass eine integrierte, layerübergreifende Optimierung durchgeführt wird. Insbesondere bleibt im Allgemeinen unklar, in welchem Umfang weitere Kostensenkungen und/oder Qualitätsverbesserungen möglich sind.

Das übergreifende Ziel des ZIB-Teilprojektes ist es, die theoretischen und algorithmischen Grundlagen für genau solch eine Evaluierung zu schaffen. Einerseits sollen die Kosten sinken und die Qualität verbessert werden. Darüber hinaus werden Gütegarantien für Netzkonfigurationen berechnet, die eine Abschätzung des maximalen Verbesserungspotentials erlauben. Solche dualen Abschätzungen der Qualität von Netzplänen sind deshalb wichtig, weil es ohne sie nur schwer möglich ist, verschiedene Konzepte belastbar zu bewerten.

Um das Ziel zu erreichen, werden die technischen Zusammenhänge von Multi-Layer-Architekturen abstrakt und detailgetreu modelliert, wobei ökonomische Kostenmodelle besonders berücksichtigt werden. Gute Netzpläne und duale Schranken sollen mit einer Kombination von LP-basiertem Branch & Bound und Lagrange-Relaxierung effizient berechnet werden. Die Optimierungsalgorithmen sollen Referenzlösungen finden, die dann zum Benchmarking alternativer Netzplanungsansätze herangezogen werden können.

Gemeinsam mit den EIBONE-Kooperationspartnern werden zuerst verschiedene XML-Formate zur Beschreibung von Planungsproblemen über mehrere Technologien hinweg entwickelt. Sie sind eine wesentliche Voraussetzung dafür, praktische Daten für technologieübergreifende Planungsaufgaben auszutauschen und bestehende Modelle anwenden zu können. Im Zusammenhang mit dieser Datenschnittstelle wurde bereits die Bibliothek „SNDlib“ mit Single-Layer-Netzplanungsdaten entwickelt.

### **SNDlib – Survivable Network Design library**

**Bearbeitet von:** Sebastian Orłowski, Roland Wessäly

**Kooperationspartner:** Universität Warschau

**Förderung:** BMBF-Förderschwerpunkt EIBONE (Efficient Integrated Backbone)

SNDlib ist eine Bibliothek von Testdatensätzen zu Optimierungsaufgaben, die bei der Planung von Telekommunikationsfestnetzen anfallen. Die Ziele von SNDlib sind es, im Bereich der Festnetzplanung

- realistische Datensätze öffentlich verfügbar zu machen,
- zum Standard für das Testen, Auswerten und Vergleichen von mathematischen Modellen und Optimierungsalgorithmen zu werden,
- als Quelle für Ressourcen zu dienen und
- eine Kontaktplattform für alle Wissenschaftler und Praktiker bereitzustellen.

Neben den Testdaten umfasst die SNDlib auch die besten bekannten primalen und dualen Lösungen, eine Publikationsliste, eine Konferenzliste und eine Mailingliste.

Die SNDlib wurde in einem Plenarvortrag bei der Konferenz „Design of Reliable Communication Networks“, DRCN2005<sup>8</sup>, erstmals offiziell vorgestellt. Im Dezember 2005 wurde die erste offizielle referenzierbare Version 1.0 [32] fixiert.

### **Ausfallsichere Konfiguration optischer Netze**

**Bearbeitet von:** Arie Koster, Sebastian Orłowski, Roland Wessäly, Adrian Zymolka

**Kooperationspartner:** T-Systems Nova GmbH, Berlin; Claus Gruber, TU München; Adrienne Fusco, Lehigh University, Bethlehem, USA

In modernen Telekommunikationsnetzen wird zunehmend optische Technologie eingesetzt. Dabei werden digitale Signale als kurze Lichtpulse auf Glasfasern übermittelt, wodurch weit höhere Übertragungsraten als mit elektronischen Signalen erzielt werden. Das optische Medium ermöglicht zudem das sogenannte *Wavelength Division Multiplexing* (WDM), mit dem auf einer Glasfaser durch Verwendung verschiedener Wellenlängen mehrere Kanäle parallel genutzt werden können. Zu den modernsten Komponenten gehören die *Optical Cross-Connects* (OXCs), die das direkte Schalten optischer Verbindungen in den Netzknoten ermöglichen, ohne dass die Signale – wie bisher – zurück in elektronische Form umgewandelt werden müssen. Wenn solche Schalteinheiten integriert werden, entstehen innerhalb der Netze durchgängig optische Verbindungen, die als *Lichtwege* bezeichnet werden.

---

<sup>8</sup><http://www.drcn.org>

Wenn Netzbetreiber optische Netze auf- und ausbauen, wollen sie für einen gegebenen Kommunikationsbedarf die einzurichtenden Lichtwege und die nötigen Hardwarekomponenten so konfigurieren, dass die Gesamtkosten minimal sind. Zusätzlich sind Ausfallsicherheitsanforderungen zu berücksichtigen, um auch in Störsituationen noch einen festgelegten Mindestverkehr garantieren und geschützte Verbindungen aufrechterhalten zu können. Um diese anspruchsvollen Planungsaufgabe zu lösen, benötigt man effiziente mathematische Methoden, mit denen sich geeignete Netzkonfigurationen mit beweisbarer Güte bestimmen lassen.

Im Berichtszeitraum wurde das bisherige Lösungsverfahren [36] methodisch und konzeptionell weiterentwickelt. Es basiert auf einem Dekompositionsansatz, durch den das hochkomplexe Gesamtproblem in zwei aufeinanderfolgende Teilaufgaben zerlegt wird. Das erste Teilproblem umfasst das Routing der Lichtwege und die Dimensionierung der dazu notwendigen Kapazitäten, weil diese beiden Aspekte eng gekoppelt sind. Für diese Aufgabe lassen sich wegen der Ähnlichkeit zur bisherigen Netzplanung bereits vorhandene Methoden [34] adaptieren. Um die geforderte Ausfallsicherheit effizient zu realisieren, wurde das neue Konzept *Demand-wise Shared Protection* [26] entworfen. In der ursprünglicher Fassung des Konzepts wird die Anzahl der bereitzustellenden Ersatzwege durch vorzugebende Parameter gesteuert. Dieser Ansatz wurde im Projekt so erweitert, dass die Parameter selbst innerhalb der Optimierung entschieden werden. Dadurch entsteht ein übergeordnetes Konzept, das auf einem völlig neuartigen Modell zum Design ausfallsicherer Netze [35] basiert. Dieses Konzept wurde im Berichtszeitraum in einer umfassenden Rechenstudie [20] evaluiert. Im Resultat zeigt das erweiterte Modell zwar eine höhere Komplexität, ermöglicht aber auch signifikante Kosteneinsparungen gegenüber dem in der Praxis am weitesten verbreiteten Konzept (*1+1 Path Protection*). Gleichzeitig ist es im Vergleich zu Konzepten mit höherem Einsparpotential (*Shared Protection*) weit einfacher in der operativen Umsetzung. Gegenwärtig wird eine weitere Studie vorbereitet, bei der auf Basis statistischer Ausfallwahrscheinlichkeiten einzelner Netzelemente die für Netzbetreiber wichtige Verfügbarkeit verkehrstragender Verbindungen ausgewertet und für verschiedene Konzepte verglichen wird.

Weil WDM eingesetzt wird, müssen anschließend im zweiten Teilproblem den Lichtwegen, die schließlich eingerichtet werden sollen, Wellenlängen zugeordnet werden, die nicht miteinander kollidieren. Innerhalb eines Lichtweges kann die Wellenlänge nur mit einem speziellen Konverter gewechselt werden, der zusätzliche Kosten verursachen. Daher ist hier das Ziel, die Anzahl an benötigten Convertern zu minimieren. Mit ersten Heuristiken [24] und deren Erweiterungen [25] können geeignete Wellenlängenzuordnungen schnell ausgerechnet werden. Zum Nachweis der Güte dieser Lösungen werden ferner untere Schranken berechnet. Ein Ansatz hierzu leitet geeignete Abschätzungen aus Eigenschaften einer Verallgemeinerung der Kantenfärbung in Graphen [27] ab. Zudem können Schranken auf Basis einer speziellen Formulierung als ganzzahliges lineares Programm berechnet werden. Die theoretisch guten Eigenschaften des Modells [28] bestätigten sich im praktischen Einsatz [25]. Durch die zusätzliche Information nichttrivialer unterer Schranken konnte für viele Instanzen bewiesen werden, dass die heuristisch ermittelten Lösungen bereits optimal sind. Darüber hinaus wurde die Arbeit an einer Studie zu hybriden Konfigurationen mit einzelnen opaken Knoten aufgenommen [19].

## Überlastkontrolle und Marktmodelle im Internet

**Bearbeitet von:** Tobias Harks

**Kooperationspartner:** Congestion Control Group (TKN), TU-Berlin; University of California, Irvine, USA

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

Das Internet wächst mit immenser Geschwindigkeit, und gleichzeitig werden immer mehr andere Netze (Transport, Finanzsektor) integriert. Mittlerweile gilt das Internet als *das* größte künstlich entwickelte Netz.

Ein wichtiger Teilaspekt, welcher ermöglicht, dass der weltweite Datentransfer über das Internet funktioniert, ist die Überlastkontrolle in der Transportschicht. Neben den traditionellen Internetanwendungen wie *File Transfer*, *Web-Surfing* oder E-Mail, die durch das Transportprotokoll TCP überlastsensitiv gesteuert werden, gewinnen Echtzeitanwendungen (Video, Internet-Telephonie) eine immer größere Bedeutung. Zur Zeit werden diese mit Hilfe des *User Datagram Protocol* (UDP) transportiert und verringern ihre Datenübertragung bei Überlastsituationen nicht. Mit der rasanten Verbreitung und Entwicklung neuer Multimediatechnologien wie MPEG-Video oder *Voice-over-IP* (VoIP) wird es unvermeidbar, den Datentransport von Echtzeitanwendungen überlastsensitiv zu steuern.

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

- Sie verhindern Netzüberlastsituationen.
- Sie lasten die Ressourcen, die zur Verfügung stehen, aus und teilen sie gleichzeitig fair auf.
- Sie berücksichtigen Echtzeitcharakteristiken von Multimediaanwendungen.
- Das Netz erbringt eine stabile Leistung, das heißt, wenig Pakete gehen verloren, und die Latenzzeit ist gering.

Im Berichtszeitraum haben wir die Grundlagen für ein neues Transportprotokoll geschaffen, welches die Datenübertragung von traditionellen Anwendungen und Echtzeitanwendungen überlastsensitiv und ressourceneffizient steuert [21, 23].

Ein weiteres Ziel dieses Projekts ist die mathematische Modellierung der ökonomischen Interaktion zwischen Internetanbietern und ihren Kunden sowie untereinander. Traditionellerweise sind Kunden durch Flatrate-, Volumen- oder Zeittarife an ihren Internetanbieter gebunden. Diese Vertragsformen sind insofern interessant, als dass sie den Kunden eine gewisse Kostenkontrolle ermöglichen. Andererseits bietet z. B. die Flatrate keine Anreize, die knappen Ressourcen (Netzkapazitäten) effizient zu nutzen. Dies führt häufig dazu, dass sich die Servicequalität für überlastsensitive Anwendungen (z. B. Internet-Telephonie) dramatisch verschlechtert.

In diesem Projekt haben wir ein dynamisches Marktmodell entworfen, welches die entstehenden Kosten für Endnutzer mit der Lastsituation im Netz verknüpft [22]. Indem die Preise für zu übertragende Daten in Abhängigkeit von der momentanen Überlastsituation bestimmt



werden, wird die Überlast implizit kontrolliert: Datentransfers werden teurer, wenn die Last im Netz steigt. Weil die Preise steigen, sind Nutzer geneigt, ihren Datenverkehr zu drosseln. Insgesamt wird ein Marktverhalten erzeugt, das die verfügbare Netzkapazität effizient und zielgerichtet verteilt.

### **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

Gegenwärtig werden nationale Energieversorgungsnetze überwiegend von wenigen großen Kraftwerken gespeist und lassen sich somit gut zentral steuern. Das wird sich aber ändern, denn europaweit wird angestrebt, regenerative Energiequellen stärker zu nutzen. Dafür werden zahlreiche mittlere und kleine Erzeuger (Windparks, Solaranlagen etc.) integriert, so dass die Energienetze in Zukunft stark dezentral organisiert sein werden. Aufgaben wie Energie- und Lastmanagement oder *Power-Quality-Management* werden dadurch deutlich komplexer als in konventionellen Versorgungsnetzen. Um solche dezentralen Energienetze effektiv und bedarfsgerecht zu steuern und sie für alle Beteiligten wirtschaftlich zu betreiben, müssen Erzeuger, Netzbetreiber und Nutzer eng kooperieren. Ein zuverlässig funktionierendes und effizient realisierbares Kommunikationsnetz ist eine der Grundvoraussetzungen dafür.

Im Rahmen des thematischen Netzwerkes „Optimierung des Einsatzes dezentraler Energieversorgungssysteme durch Einbindung moderner Kommunikationstechniken – Energie und Kommunikation“ wird an einer Gesamtvision gearbeitet, wie die neuartigen Fragestellungen bei Aufbau, Betrieb und Steuerung dezentraler Energienetze technisch und organisatorisch gelöst werden können. Das ZIB ist innerhalb des Netzwerkes im Bereich der 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 kann dazu seine langjährige Erfahrung bei der Planung und Optimierung von Kommunikationsnetzen für unterschiedlichste Technologien beitragen [8].

Im Berichtszeitraum wurde zunächst an der Festlegung eines möglichen Netzszenarios für ein regionales dezentrales Energienetz mitgearbeitet. Darin werden alle beteiligten Erzeuger und Verbraucher mitsamt ihren Charakteristika bezüglich Versorgung und Kommunikation spezifiziert, siehe Abbildung 2.42. Das erarbeitete Szenario berücksichtigt die besonderen Umstände, die sich ergeben, wenn regenerative Energien eingesetzt werden. Die weiteren Untersuchungen zu allen Aspekten, die innerhalb des Netzwerkes beleuchtet werden, lassen sich auf Basis solcher Szenarien konkret nachvollziehen und evaluieren.

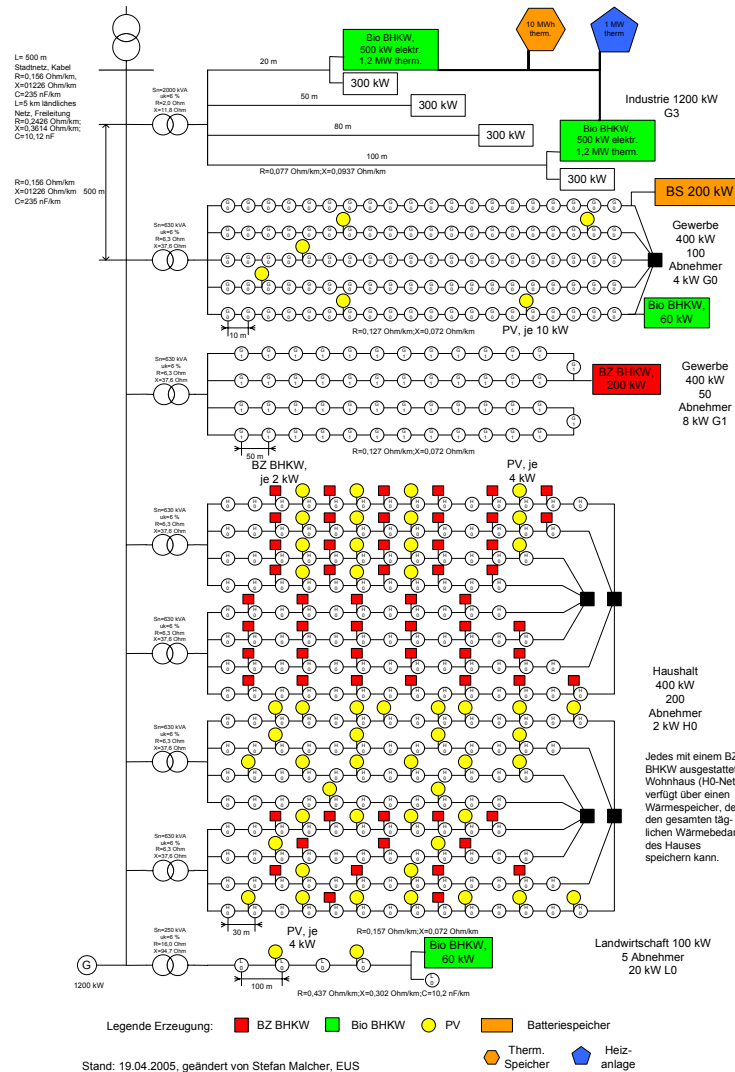


ABBILDUNG 2.42: Szenario eines dezentralen Versorgungsnetzes mit erneuerbaren Energien.

Darüber hinaus ist am ZIB ein prototypisches mathematisches Modell zur Optimierung der Kommunikationsstruktur für ein gegebenes Netzscenario entwickelt worden [12]. Das Modell berücksichtigt – unter teilweise vereinfachenden Annahmen – die wesentlichen Rahmenbedingungen und technologischen Gegebenheiten, die zu Beginn des Projekts identifiziert worden sind. Erste Optimierungsrechnungen belegen, dass das optimale Kommunikationsnetz sehr unterschiedlich ausfallen kann, je nachdem, welche Kommunikationstechnologien zu welchen Kosten eingesetzt werden können. Schon mit dem prototypischen Modell lassen sich so klare Aussagen darüber ableiten, welche Übertragungstechnologien zu welchen Kosten für welche Kommunikationsanforderungen wirtschaftlich sinnvoll sind. Ferner können damit unterschiedliche Konzepte der Betriebsführung dezentraler Netze evaluiert werden. Es lassen sich z. B.

Aufwand und Nutzen unterschiedlicher Netzmanagementstrategien (wie etwa einer Verbrauchersteuerung) gegenüberstellen. Für solche Auswertungen muss das Netz stets als Ganzes betrachtet werden. In Zusammenarbeit mit allen Netzwerkpartnern wird das Modell in den folgenden Jahren schrittweise präzisiert und an die praktischen Anforderungen angepasst, die sich in dezentralen Energienetzen mit erneuerbaren Energieträgern tatsächlich ergeben.

### **Optimale Zulassungskontrolle**

**Bearbeitet von:** Manfred Brandt

**Kooperationspartner:** Andreas Brandt, HU Berlin; Siemens AG, München

**Förderung:** Siemens AG, München

Das Angebot an Echtzeit-Diensten ist entscheidend für den ökonomischen Erfolg von Mobilfunknetzen der dritten Generation. Eine gute Qualität dieser Dienste setzt eine funktionierende Zulassungskontrolle voraus.

Ziel dieses Projekts ist eine Verbesserung der Performance von *Voice over IP* (VoIP) und *Push to Talk over Cellular* (PoC) 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 wird zusätzlich ein Token-Bucket-Algorithmus benutzt, um eine Überlast der die Pakete bearbeitenden Prozessoren möglichst zu vermeiden.

Im Projekt wurden Algorithmen entwickelt und implementiert [11], die in Abhängigkeit vom Schwellenwert die Wahrscheinlichkeit einer nicht akzeptierten Forderung und die Wahrscheinlichkeit des Verlustes von Paketen akzeptierter Forderungen berechnen. Vertiefend wurde im Berichtszeitraum die Bandbreiten-Belegung durch die aktiven Forderungen untersucht, um die Qualität der Dienste besser beurteilen und eine präzisere Qualitätsgarantie geben zu können. Insbesondere wurden Algorithmen für die ersten beiden Momente der Längen der Zeitintervalle ausreichender bzw. zu geringer Bandbreite für die aktiven Forderungen hergeleitet und implementiert. Die entwickelte Software wird Bestandteil eines neuen Planungstools.

### **Multi-Server Processor-Sharing**

**Bearbeitet von:** Manfred Brandt

**Kooperationspartner:** Andreas Brandt, HU Berlin; Siemens AG, München

**Förderung:** Siemens AG, München

In modernen Telekommunikationssystemen werden unterschiedliche Dienste und Leistungen – die als Prozesse bezeichnet werden – im Echtzeitbetrieb parallel bearbeitet. Dafür werden ihnen unterschiedliche Systemressourcen zugewiesen. Für das zu wählende technische Design und die zu planende Last ist es wichtig, dass dabei gewisse Leistungsmerkmale eingehalten werden. Insbesondere dürfen die Reaktionszeiten für die einzelnen Prozesse, die aus einem Strom von Forderungen bestehen, nicht unverhältnismäßig lang sein. Andererseits sollen die Ressourcen gut ausgelastet werden.

Um die Leistungsfähigkeit der Systeme zu erhöhen, kommt es verstärkt zum Einsatz von mehreren parallel arbeitenden Prozessoren. Durch die Implementierung von *Round-Robin*-

Disziplinen wird eine faire Aufteilung der Prozessorkapazitäten auf die zu bearbeitenden Forderungen der einzelnen Prozesse gewährleistet. Bei der *Round-Robin*-Disziplin erhalten die Forderungen nacheinander zyklisch ein festes Quantum an Bedienung. Als Grenzfall der *Round-Robin*-Disziplin, bei dem die Quanten gegen Null streben, ergibt sich die *Processor-Sharing*-Disziplin. Falls die Forderungen eines Prozesses nicht parallel sondern sequentiell bearbeitet werden müssen, führt dies dazu, dass für die Forderungen der verschiedenen Prozesse separate Warteschlangen aufgebaut werden, vgl. [9] für Systeme mit einem einzigen Prozessor.

In diesem Projekt sollen die Bedingungen untersucht werden, unter denen bei stationärem Input im Fall eines Multi-Prozessor-Systems unter *Processor-Sharing* ein stationäres Regime existiert. Außerdem sollen die stationären Verweilzeiten der Forderungen im System analysiert werden. Damit kann letztendlich eine hohe Qualität der Dienste (*Quality of Service*, QoS) garantiert werden.

Ein wesentlicher Unterschied von Multi- gegenüber *Single-Processor*-Systemen besteht darin, dass Prozessoren leer laufen können, obwohl Arbeit im System vorhanden ist. Deshalb hängt schon die Stabilität derartiger Systeme entscheidend von der Verteilung der Lasten auf die einzelnen Warteschlangen ab. Dies ist selbst im Fall eines Markov-Modells ein Problem, weil das System bei einer größeren Anzahl von Schlangen hochkomplex wird. Durch eine Analyse des besten und schlechtesten Falls in der Klasse aller stationären Ankunftsprozesse wurden scharfe Stabilitätsbedingungen innerhalb dieser Klasse gefunden, vgl. [10] für Systeme mit einem einzigen Prozessor.

Für den Fall eines Markov-Modells eines Multi-Prozessor-Systems mit nur einer Schlange und *Processor-Sharing*-Disziplin wurden neue stabile und effiziente Algorithmen zur Berechnung der Momente von Verweilzeitverteilungen entwickelt.

## Publikationen

- [1] A.-C. Achilles und P. Ortyl, *The collection of computer science bibliographies*, <http://liinwww.ira.uka.de/bibliography/>, 1995–2006.
- [2] H.-M. Adler, *X-WiN startbereit*, DFN-Mitteilungen **69** (2005), 7–9.
- [3] P. Belotti und S. Orlowski, *A cut-and-branch-and-price approach to two-layer network design*, Erweiterter Abstract für die Konferenz INFORMS 2006, <http://www.zib.de/Optimization/Projects/Telecom/Matheon-B3/>, 2005.
- [4] A. Bley, *Finding small administrative lengths for shortest path routing*, Proc. INOC 2005 (Lissabon, Portugal), Bd. 1, 2005.
- [5] A. Bley, *Inapproximability results for the inverse shortest paths problem with integer lengths and unique shortest paths*, ZIB Preprint ZR-05-04, ZIB, 2005.
- [6] A. Bley, *On the approximability of the minimum congestion unsplittable shortest path routing problem*, Proc. IPCO 2005 (Berlin), 2005, S. 97–110.
- [7] A. Bley und M. Pattloch, *Modellierung und Optimierung der X-WiN Plattform*, DFN-Mitteilungen **67** (2005), 4–7.

- 
- [8] A. Bley und A. Zymolka, *Planung kostenoptimaler informations- und kommunikationsinfrastrukturen*, Tagungsband „Achstes Kasseler Symposium Energie-Systemtechnik: Energie und Kommunikation“ (Kassel), 2003, 61–77.
- [9] A. Brandt und M. Brandt, *On the sojourn times for many-queue head-of-the-line processor-sharing systems with permanent customers*, Math. Methods Oper. Res. **47** (1998), 181–220.
- [10] A. Brandt und M. Brandt, *A note on the stability of the many-queue head-of-the-line processor-sharing system with permanent customers*, Queueing Syst. **32** (1999), 363–381.
- [11] A. Brandt, M. Brandt, S. Rugel und D. Weber, *Admission control for realtime traffic: improving performance of mobile networks by operating on actual throughput*, Proc. WCNC 2005 (New Orleans, USA), 2005.
- [12] B. Buchholz, *Netzwerk Energie und Kommunikation – Kommunikation im Verteilnetz*, Tagungsband „Zehntes Kasseler Symposium Energie-Systemtechnik: Die Zukunft der elektrischen Verteilnetze“ (Kassel), 2005, S. 154–167.
- [13] A. Eisenblätter und A. M. C. A. Koster, *FAP web – A website about Frequency Assignment Problems*, <http://fap.zib.de/>, 2000–2006.
- [14] A. Eisenblätter und H.-F. Geerdes, *A novel view on cell coverage and coupling for UMTS radio network evaluation and design*, Proc. INOC’05 (Lissabon, Portugal), ENOG, 2005.
- [15] A. Eisenblätter, H.-F. Geerdes, T. Koch, A. Martin und R. Wessälly, *UMTS radio network evaluation and optimization beyond snapshots*, Math. Methods Oper. Res. **63** (2006), 1–29.
- [16] A. Eisenblätter, H.-F. Geerdes, A. Munna und R. Verdone, *Comparison of models for WCDMA downlink capacity assessment based on a MORANS reference scenario*, Proc. VTC-2005 Spring (Stockholm, Schweden), IEEE, 2005.
- [17] A. Eisenblätter, H.-F. Geerdes und N. Rochau, *Analytical approximate load control in WCDMA radio networks*, Proc. VTC-2005 Fall (Dallas, TX, USA), IEEE, 2005.
- [18] A. Eisenblätter, H.-F. Geerdes und U. Türke, *Public UMTS radio network evaluation and planning scenarios*, Internat. J. on Mobile Network Design and Innovation **1** (2005), Nr. 1, 40–53.
- [19] A. Fusco und A. Koster, *Optimal location of converters for robust multi-fiber WDM networks*, 2006, in Vorbereitung.
- [20] C. Gruber, A. Koster, S. Orłowski, R. Wessälly und A. Zymolka, *A computational study for demand-wise shared protection*, Proc. DRCN 2005 (Ischia, Italien), 2005, 421–428.
- [21] T. Harks, *Utility proportional fair resource allocation: An optimization oriented approach*, Proc. QoS in Multiservice IP Networks (Catania, Italien), Springer, 2005, S. 61–74.
- [22] T. Harks und T. Poschwatta, *Priority pricing in utility fair networks*, Proc. 13th ICNP (Boston, USA), 2005, S. 311–320.

- [23] T. Harks und T. Poschwatta, *Utility fair congestion control for real-time traffic*, Proc. Global Internet 2005 (Miami, FL, USA), 2005, S. 85–90.
- [24] A. M. C. A. Koster und A. Zymolka, *Minimum converter wavelength assignment in all-optical networks*, Proc. ONDM 2004 (Ghent, Belgien), 2004, S. 517–535.
- [25] A. M. C. A. Koster und A. Zymolka, *Provably good solutions for wavelength assignment in optical networks*, Proc. ONDM 2005 (Mailand, Italien), 2005, S. 335–345.
- [26] A. M. C. A. Koster, A. Zymolka, M. Jäger und R. Hülsermann, *Demand-wise shared protection for meshed optical networks*, Journal of Network and Systems Management **13** (2005), Nr. 1, 35–55.
- [27] A. Koster, *Wavelength assignment in multi-fiber WDM networks by generalized edge coloring*, Proc. INOC 2005 (Lissabon, Portugal), 2005, S. 60–66.
- [28] A. Koster und A. Zymolka, *Linear programming lower bounds for minimum converter wavelength assignment in optical networks*, Proc. INOC 2005 (Lissabon, Portugal), 2005, S. 44–51.
- [29] M. Nawrocki, H. Aghvami und M. Dohler (Hg.), *Understanding UMTS radio network modelling, planning and automated optimisation: Theory and practice*, Wiley (erscheint 2006).
- [30] S. Orłowski und R. Wessäly, *Survivable logical network design with an underlying physical layer*, Preprint 300, DFG Research Center MATHEON, 2005.
- [31] J. Pattloch, *Mehr Verfügbarkeit im X-WiN*, DFN-Mitteilungen **69** (2005), 4–6.
- [32] *SNDlib 1.0 – Survivable network design data library*, <http://sndlib.zib.de>, 2005.
- [33] T. Thevis, *Efficient survivable reconfiguration in SDH-networks*, Diplomarbeit, TU Berlin, 2005.
- [34] R. Wessäly, *Dimensioning Survivable Capacitated NETWORKS*, Dissertation, Technische Universität Berlin, 2000.
- [35] R. Wessäly, S. Orłowski, A. Koster, A. Zymolka und C. Gruber, *Demand-wise shared protection revisited: A new model for survivable network design*, Proc. INOC 2005 (Lissabon, Portugal), 2005, S. 100–105.
- [36] A. Zymolka, A. M. C. A. Koster und R. Wessäly, *Transparent optical network design with sparse wavelength conversion*, Proc. ONDM 2003 (Budapest, Ungarn), 2003, S. 61–80.

### 2.2.12 Verkehr

Die zurzeit im Bereich Verkehr bearbeiteten Forschungsvorhaben haben ihre gemeinsame Wurzel in den in der Vergangenheit durchgeführten Projekten zur Fahrzeugumlauf- und Dienstplanung im öffentlichen Nahverkehr. Im Projekt *Integrierte Umlauf- und Dienstplanung im ÖPNV* werden diese Themenfelder direkt fortgesetzt und kombiniert; hierdurch können neue Anwendungsfelder im Regionalverkehr und zusätzliche Optimierungspotentiale erschlossen

werden. Im Berichtsjahr wurde zusammen mit den Firmen IVU und LBW vor allem am Einsatz in der Praxis gearbeitet. Die Methoden der Dienstplanung werden in dem Projekt *Airline Crew Scheduling* weiterentwickelt und auf den Bereich des Luftverkehrs übertragen, z. B. durch Lagrange-basierte Pfadsuchtechniken zur Behandlung von Base-Constraints. Die Zusammenarbeit mit Lufthansa Systems Berlin GmbH wurde vertieft, ein gemeinsames Forschungsprojekt ist in Planung.

Im Projekt *Strategische Planung im Öffentlichen Nahverkehr* werden die der Umlauf- und Dienstplanung vorgelagerten Probleme untersucht. Wir haben uns zum einen auf die Liniplanerung, zum anderen auf die Preisplanung konzentriert. In der Liniplanerung sollen Linienwege und -frequenzen in einem Nahverkehrsnetz optimiert werden. In der Preisplanung geht es um die optimale Berechnung von Preisen, so dass die Einnahmen eines Verkehrsunternehmens maximiert werden, wobei die Nachfrage vom Preis abhängt. Schließlich untersucht das Projekt *Trassenbörse* die Planung des Schienenverkehrs für konkurrierende Eisenbahnverkehrsunternehmen unter Berücksichtigung von Marktaspekten. Die grundlegende Frage ist, wie bestehende Trassen an verschiedene Interessenten (in einer Auktion) möglichst effektiv und fair vergeben werden können.

Methodisch ist den Problemen der Einsatz von Spaltengenerierungsverfahren gemeinsam. Insbesondere die Erfahrungen mit den in der Vergangenheit am ZIB entwickelten Methoden zur Lösung von sehr großen Set-Partitioning Problemen war hier nützlich und wurde von uns weiterentwickelt.

### Strategische Planung im Öffentlichen Nahverkehr

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

**Kooperationspartner:** IVU Traffic Technologies AG, Berlin; ViP Verkehrsbetrieb Potsdam GmbH

**Förderung:** DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt B1

Das Ziel der strategischen Planung ist die Planung der Infrastruktur und des Angebots in einem Nahverkehrssystem. Üblicherweise erfolgt nacheinander die Planung des Netzes, des Linienverlaufs, der Frequenzen der Linien und des Fahrplans; außerdem werden die Preise festgelegt.

Ziel dieses Projekts ist die Entwicklung mathematischer Optimierungsverfahren für diese strategischen Probleme, wie sie im Bereich der operativen Planung schon seit längerem eingesetzt werden. Im Berichtszeitraum haben wir die Untersuchung der Lini- und Preisplanung fortgeführt.

In der *Liniplanerung* sollen Linien (d. h. Linienverlauf und Frequenz) in einem gegebenen Netz aufeinander abgestimmt werden, so dass ein gegebenes Passagieraufkommen transportiert werden kann. Hier muss eine Abwägung zwischen Passagierinteressen (z. B. eine geringe Fahrzeit) und Kosten vorgenommen werden.

In [3, 4] haben wir ein wegbasiertes Mehrgüterflussmodell für die Liniplanerung entwickelt, welches die Wege von Passagieren und Linien im Netz miteinander verknüpft. Im Gegensatz zu früheren Modellen können dabei die Wege von Linien und Passagieren frei gewählt werden, das heißt, die möglichen Wege sind nicht im Vorhinein fixiert. Bei der Lösung der LP-Relaxierung dieses Modells durch Spaltengenerierung müssen für die Passagierwege kürzeste Wege gefunden und für die Linienwege ein längste-Wege-Problem gelöst werden, das NP-schwer ist. In Bezug auf die Wahl der Passagierwege haben wir verschiedene Einschränkungen



ABBILDUNG 2.43: Linienplanung. *Links:* Bestehende Linien in Potsdam 1998. *Rechts:* Durch ein Greedy-Verfahren berechnetes Liniennetz. Die Liniendicken sind jeweils proportional zur Frequenz der entsprechenden Linien. (Webversion ist farbig)

untersucht [12]; das Ziel dieser Untersuchungen ist, zu einer realistischeren Modellierung der Wegewahl zu gelangen. Zum Finden der Linienwege haben wir einerseits eine exakte Suche implementiert und andererseits ein randomisiertes Verfahren untersucht. Mit diesen Methoden können wir inzwischen die LP-Relaxierung von Linienplanungsproblemen für eine mittelgroße Stadt wie Potsdam in wenigen Minuten lösen.

Die Lösung der LP-Relaxierung enthält in der Regel viele Linien, deren Frequenzen sehr klein sind. Wir kontrollieren bzw. verhindern die Verwendung solcher Linien durch Fixkosten, was auf ein gemischt-ganzzahliges Problem führt. Wir haben hierfür verschiedene Primalheuristiken entwickelt und arbeiten an einem Branch-and-Cut-Verfahren. In Abbildung 2.43 sieht man auf der linken Seite die bestehenden Linien in Potsdam von 1998. Auf der rechten Seite ist eine Lösung einer Greedy-Heuristik dargestellt. Die Daten wurden von unseren Kooperationspartnern zur Verfügung gestellt.

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

Im Berichtszeitraum haben wir ein im Vorjahr entwickeltes nichtlineares Modell zur Maximierung der Einnahmen erweitert und verbessert [8, 11]. Wir haben dazu die Konstruktion einer Nachfragefunktion aus diskreten Entscheidungsmodellen, speziell aus sogenannten Logit-Modellen, untersucht. Die Idee solcher diskreten Entscheidungsmodellen ist, dass sich ein Passagier abhängig von der Anzahl der Fahrten zwischen mehreren Reisemöglichkeiten (z. B. Reisen mit dem Monatsticket, Einzelticket oder Auto) anhand von bestimmten Parametern (z. B. Fahrzeit und Fahrpreis) entscheidet. Da für jeden einzelnen Passagier nicht alle entscheidungsrelevanten Parameter bestimmt werden können, wird zusätzlich ein stochastischer Term eingeführt. Dabei betrachten wir einen vorgegebenen Zeitraum und nehmen eine



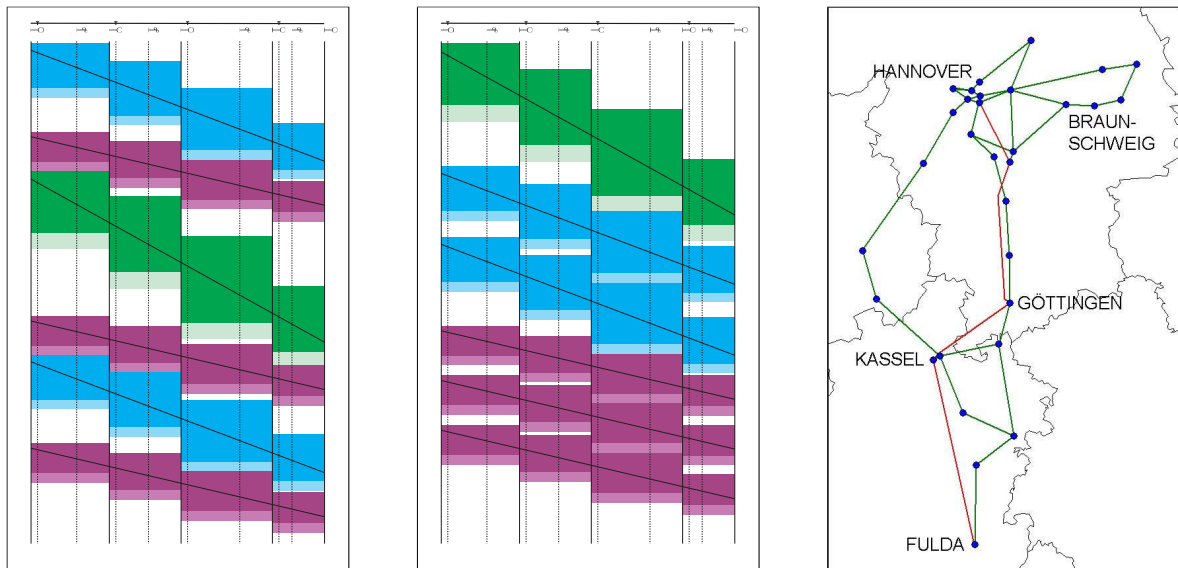


ABBILDUNG 2.44: Sperrzeitentreppe bei ungebündeltem (links) und gebündeltem (Mitte) Verkehr; Testnetz (rechts).

diskrete, symmetrische Verteilung der Fahrtenhäufigkeit innerhalb dieses Zeitraums an. Durch Anwendung von Standard-Software konnten wir mit diesem Ansatz optimale Preise für das Intercitynetz der Niederlande und das Netz von Potsdam berechnen [8, 9, 11].

Zur Zeit erweitern wir unser Modell um die Berücksichtigung von Kosten, die bei der Bereitstellung von Kapazitäten zum Transport von Passagieren entstehen.

### Trassenbörse

**Bearbeitet von:** Ralf Borndörfer, Martin Grötschel, Thomas Schlechte

**Kooperationspartner:** Institut für Land- und Seeverkehr, Fachgebiet Schienenfahrwege und Bahnbetrieb (SFWBB), Institut für Volkswirtschaftslehre und Wirtschaftsrecht, Fachgebiet für Wirtschafts- und Infrastrukturpolitik (WIP), TU Berlin; Ilgmann + Miethner Unternehmensberatung, Berlin; Institut für Verkehrswesen, Eisenbahnbau und -betrieb (IVE); Universität Hannover; Rail Management Consultants GmbH, Hannover

**Förderung:** Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF)

Das interdisziplinäre Projekt Trassenbörse befasst sich mit der Fragestellung, ob ein auf einer Auktion basierender Vergabemodus für Eisenbahnfahrtrassen zu einer wettbewerbsorientierten Vermarktung eines Schienennetzes führen kann. Die Idee besteht darin, konkurrierende Eisenbahnverkehrsunternehmen in einer Auktion für beliebige Trassen bieten zu lassen und auftretende Konflikte über Preise zu lösen, in dem die Trassen einer erlösmaximalen Allokation zugeteilt werden. In dem Projekt wird die Machbarkeit dieses Ansatzes untersucht. Dabei treten Fragestellungen aus den Bereichen Ökonomie, Eisenbahnbetrieb und Mathematik auf, die von den Kooperationspartnern im Verbund bearbeitet werden.

Die erste Herausforderung besteht darin, ein komplexes System wie den Schienenverkehr in geeigneter Weise so zu modellieren, dass es einerseits noch möglich ist, Berechnungen durchzuführen, aber andererseits keine betriebswichtigen Einzelheiten unterschlagen werden. Die

Projektpartner SFWBB und IVE arbeiten an zwei unterschiedlichen Ansätzen, deren Kombination diese Eigenschaften haben soll. Es handelt sich dabei zum einen um eine makroskopische Modellierung, die durch vereinfachende Annahmen eine Grobplanung ermöglicht, und zum anderen um ein mikroskopisches Modell, das durch eine gleis- und weichengenaue Darstellung der Fahrten individueller Züge eine Feinsimulation erlaubt. Durch eine geeignete Kopplung dieser Modelle soll ein iterativer Planungsablauf über eine Grob- zur Feinplanung realisiert werden.

Ein weiteres Problem besteht darin, ein geeignetes Design und Regelwerk für eine so komplexe Auktion wie die von Fahrtrassen zu finden, die zu einer verbesserten Netzauslastung und einem aus volkswirtschaftlicher und ökonomischer Sicht effizienten Fahrplan führt. Die Projektpartner am WIP arbeiten außerdem an der Entwicklung einer flexiblen Auktionsprache, die den Anforderungen von Eisenbahnverkehrsunternehmen entspricht und ihnen die Möglichkeit gibt, ihre Trassenwünsche zu spezifizieren; dies ist vor allem aus praktischer Sicht von großer Wichtigkeit.

Im Verlauf der Auktion muss in jeder Runde auf der makroskopischen Ebene ein sogenanntes Trassenallokationsproblem optimal gelöst werden, bei dem die jeweils zuzuteilenden Trassen bestimmt werden. Das Optimierungspotenzial liegt dabei hauptsächlich in der Gewinnung von Kapazität durch Bündelung von Verkehren, siehe Abbildung 2.44. Dieses Problem lässt sich als ein Mehrgüterflussproblem der kombinatorischen Optimierung mit zusätzlichen Packungsbedingungen in einem zeitexpandierten Infrastrukturgraphen modellieren. Zur Lösung solcher Probleme hat unsere Arbeitsgruppe einen IP-Ansatz entwickelt, mit dem unter Zuhilfenahme der Modellierungssprache Zimpl und des IP-Lösers CPLEX kleine und mittlere Szenarien mit einigen hundert Trassen optimal gelöst werden können [2, 13].

Um unser langfristiges Ziel, das Lösen von realitätsnahen und großen Instanzen, zu verwirklichen, müssen wir die Leistungsfähigkeit dieses Verfahrens verbessern. Wir haben dazu im Berichtszeitraum mit der Entwicklung eines Optimierungstools TS-OPT begonnen, das ein speziell auf das Trassenallokationsproblem angepasstes Branch-and-Cut-and-Price-Verfahren implementiert.

### Airline Crew Scheduling

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

**Kooperationspartner:** Lufthansa Systems Berlin GmbH

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

Die Optimierung des Einsatzes von Flugzeugbesatzungen, im Fachjargon Pairing Optimization genannt, ist eine der zentralen Planungsaufgaben einer Airline. Sie wird seit Jahrzehnten mit großem Erfolg mit mathematischen Verfahren durchgeführt, an deren Leistungsfähigkeit aufgrund des zunehmenden Konkurrenzdrucks immer höhere Anforderungen gestellt werden. Wir arbeiten in diesem Projekt an der Entwicklung eines neuen Pairing Optimizers für das Planungstool NetLine/Crew der Lufthansa Systems Berlin GmbH (LSB), einem der führenden Hersteller von Softwaresystemen für Airlines.

Unser Ansatz besteht darin, unser Optimierungstool DS-OPT, das Spaltenerzeugungsmethoden zur Dienstplanoptimierung im öffentlichen Personennahverkehr einsetzt [5, 1], auf den Luftverkehr zu übertragen und anschließend unter Ausnutzung spezieller Problemstrukturen, die im Luftverkehr auftreten, zu einem leistungsfähigen Code für den industriellen Einsatz weiterzuentwickeln. Charakteristische Unterschiede zwischen Nah- und Luftverkehr entstehen

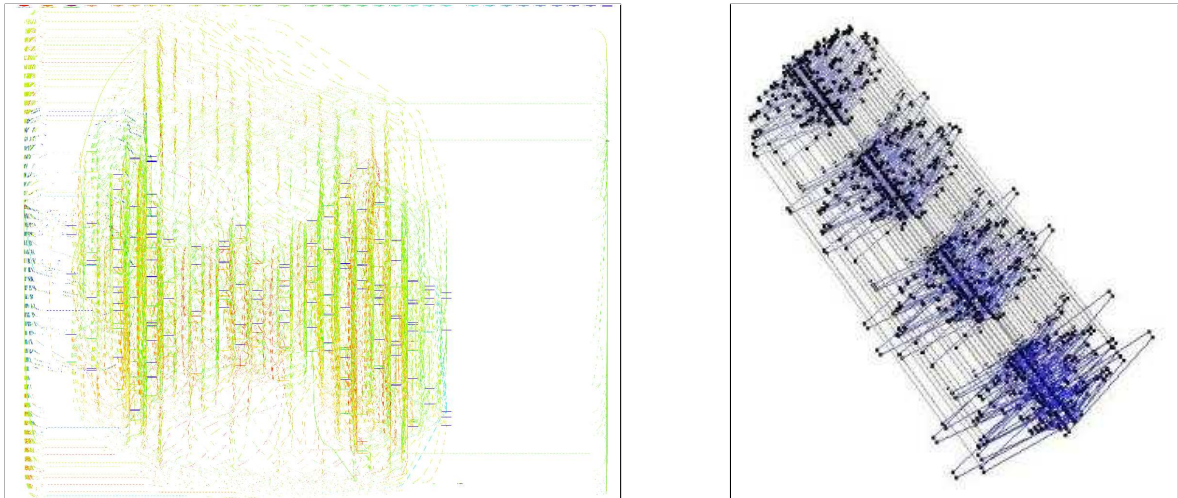


ABBILDUNG 2.45: Planungsgraphen im Nah- (links) und Luftverkehr (rechts).

beispielsweise aufgrund des unterschiedlichen Planungshorizontes, der im Nahverkehr einen Tag, im Luftverkehr in der Regel einen Monat umfasst. Die Problemstruktur ist dementsprechend im Nahverkehr durch die Morgen- und Nachmittagsspitze, im Luftverkehr durch sich wiederholende Tages- und Wochenmuster geprägt, siehe Abbildung 2.45; beides kann man algorithmisch ausnutzen.

Wir haben im Berichtszeitraum unseren Dienstplanoptimierer DS-OPT zu einem Pairing Optimizer CS-OPT weiterentwickelt. Dabei mussten wir eine Reihe von mathematischen Problemen bei der Modellierung, der Integration einer Regelsprache in die Pairing-Erzeugung, der Behandlung von „Base-Constraints“ in einem Bündel-Verfahren zur Lösung von Linearen Programmen und bei der Konstruktion einer „primalen Lösung“ überwinden [10]. Wir haben CS-OPT anschließend in das System NetLine/Crew integriert. Der Code wird nun unter dem neuen Namen xOPT als Optimierungsoption in NetLine/Crew angeboten. Er hat sich in einer Serie von Benchmarks bei Airlines im In- und Ausland bewährt und konnte bereits erfolgreich vermarktet werden.

### Integrierte Umlauf- und Dienstplanung im ÖPNV

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

**Kooperationspartner:** IVU Traffic Technologies AG (Berlin); Löbel, Borndörfer und Weider GbR (Berlin)

Die Umlauf- und die Dienstplanung sind zwei der wichtigsten Teilschritte in der operativen Planung des öffentlichen Personennahverkehrs. Wir haben in den Vorjahren das mathematische Optimierungstool IS-OPT entwickelt, das diese beiden Planungsschritte integriert durchführt [6, 7]. Im Berichtszeitraum wurde IS-OPT in das Planungssystem MICROBUS der Firma IVU Traffic Technologies AG integriert. Tests in der Praxis haben gezeigt, dass IS-OPT gegenüber sequentieller Vorgehensweise neue Anwendungsmöglichkeiten für Optimierung im ÖPNV eröffnet und zusätzliches Einsparpotenzial erschließt. Vor allem im Regionalverkehr verhindert IS-OPT das Auftreten von Unzulässigkeiten, die aus der Bildung überlanger, nicht besetzbarer Umläufe resultieren. Um diese Tests erfolgreich durchzuführen, war es nötig, zusätzliche

Anforderungen aus der Praxis in IS-OPT zu behandeln. Unter anderem mussten detaillierte Kapazitätsvorgaben im Hinblick auf die Fahrzeugflotten berücksichtigt und größere Szenarien bezüglich der Anzahl der Betriebshöfe und der Fahrgastfahrten handhabbar werden; dabei mussten die Rechenzeiten von IS-OPT in einem vertretbaren Rahmen bleiben.

IS-OPT wird inzwischen in mehreren deutschen Verkehrsbetrieben operativ eingesetzt.

### Publikationen

- [1] R. Borndörfer, M. Grötschel und A. Löbel, *Duty scheduling in public transit*, MATHEMATICS – Key Technology for the Future (W. Jäger und H.-J. Krebs, Hg.), Springer-Verlag, Berlin, 2003, 653–674.
- [2] R. Borndörfer, M. Grötschel, S. Lukac, K. Mitusch, T. Schlechte, S. Schultz und A. Tanner, *An Auctioning Approach to Railway Slot Allocation.*, Report 05-45, ZIB, 2005.
- [3] R. Borndörfer, M. Grötschel und M. E. Pfetsch, *Models for Line Planning in Public Transport*, Report 04-10, ZIB, 2004.
- [4] R. Borndörfer, M. Grötschel und M. E. Pfetsch, *Path-Based Model for Line Planning in Public Transport*, Report 05-18, ZIB, 2005.
- [5] R. Borndörfer, A. Löbel, U. Strubbe und M. Völker, *Zielorientierte Dienstplanoptimierung*, Heureka '99: Optimierung in Verkehr und Transport, 1999, 171–194.
- [6] R. Borndörfer, A. Löbel und S. Weider, *Integrierte Umlauf- und Dienstplanung im Öffentlichen Verkehr*, Heureka '02: Optimierung in Verkehr und Transport, 2002, 77–98.
- [7] 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.
- [8] R. Borndörfer, M. Neumann und M. E. Pfetsch, *Fare Planning for Public Transport*, Report 05-20, ZIB, 2005.
- [9] R. Borndörfer, M. Neumann und M. E. Pfetsch, *Optimal fares for public transport*, erscheint in: Proc. of Operations Research 2005, Springer-Verlag.
- [10] R. Borndörfer, U. Schelten, T. Schlechte und S. Weider, *A column generation approach to airline crew scheduling*, erscheint in: Proc. Operations Research 2005, Springer-Verlag, 2005.
- [11] M. Neumann, *Mathematische Preisplanung im ÖPNV*, Diplomarbeit, TU Berlin, 2005.
- [12] M. E. Pfetsch und R. Borndörfer, *Routing in line planning for public transportation*, erscheint in: Proc. Operations Research 2005, Springer-Verlag.
- [13] A. Reuter, *Kombinatorische Auktionen und ihre Anwendungen im Schienenverkehr*, Diplomarbeit, TU Berlin, 2005.

### 2.2.13 Produktion und Logistik

Dies ist ein neuer Schwerpunkt am ZIB, der im Jahr 2005 eingeführt wurde. Wir haben bereits in der Vergangenheit verschiedene Logistik-Projekte durchgeführt, von denen einige in früheren Jahresberichten aufgrund ihrer speziellen Natur im Schwerpunkt *Online-Optimierung* aufgeführt wurden. Da wir unsere Aktivitäten im Logistik-Bereich derzeit über Projekte mit Online-Charakter hinaus ausweiten, haben wir diesen neuen Schwerpunkt eingeführt. Die aktuellen Forschungsprojekte sind hier die Validierung von Schaltungsentwürfen in der Chipherstellung, die Optimierung von Roboterschweißpfaden beim Laserschweißen im Karosseriebau und die Optimierung der Verladeeinrichtung eines Containerterminals.

#### Validierung von „System-on-Chip“-Entwürfen

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

**Kooperationspartner:** Infineon Technologies AG, München; OneSpin Solutions GmbH, München; Wolfgang Kunz, Dominik Stoffel, Markus Wedler, Technische Universität Kaiserslautern

**Förderung:** Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF)

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 so genannte 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, das 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 (RT-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.

Im Berichtszeitraum wurden die bestehenden Algorithmen für die RT-Operationen erweitert und verbessert. Insbesondere wurde die Vervollständigung der Konflikt-Analyse-Mechanismen

(siehe [2]) und die Unterstützung weiterer RT-Operationen vorangetrieben. Es können nun mit Ausnahme der Divisions-, Modulo- und Rotationsbefehle sämtliche RT-Operatoren behandelt werden.

#Bits	Addierer #6		Addierer #7		Addierer #9		Addierer #10	
	SAT	CIP	SAT	CIP	SAT	CIP	SAT	CIP
5	0,7 s	0,0 s	1,0 s	0,0 s	2,8 s	0,0 s	0,7 s	0,0 s
10	3,5 s	0,0 s	2,5 s	0,0 s	49,2 s	0,0 s	3,5 s	0,0 s
15	7,8 s	0,0 s	39,6 s	0,0 s	98,8 s	0,0 s	7,9 s	0,0 s
20	39,0 s	0,0 s	59,7 s	0,0 s	334,9 s	0,0 s	38,4 s	0,0 s
25	25,5 s	0,0 s	57,0 s	0,0 s	1566,1 s	0,0 s	26,5 s	0,0 s
30	94,8 s	0,0 s	646,0 s	0,0 s	2245,6 s	0,0 s	96,5 s	0,0 s
35	1229,5 s	0,0 s	1157,6 s	0,0 s	3209,2 s	0,0 s	1235,3 s	0,0 s
40	1366,1 s	0,0 s	854,6 s	0,0 s	> 1 h	0,0 s	1380,7 s	0,0 s

Tabelle 2.1: Verifikation von mehrstufigen Additionsnetzwerken. Angegeben ist die benötigte Zeit, um die jeweilige Eigenschaft des betrachteten Additionsnetzwerks mit Registern der angegebenen Bitbreite zu validieren.

#Bits	Multipl. #6		Multipl. #7		Multipl. #9		Multipl. #10	
	SAT	CIP	SAT	CIP	SAT	CIP	SAT	CIP
5	297,4 s	0,0 s	739,7 s	0,0 s	> 1 h	0,0 s	210,9 s	0,0 s
10	> 1 h	0,1 s	> 1 h	0,1 s	> 1 h	0,2 s	> 1 h	0,2 s
15	> 1 h	0,3 s	> 1 h	0,1 s	> 1 h	0,7 s	> 1 h	0,7 s
20	> 1 h	0,6 s	> 1 h	0,3 s	> 1 h	1,6 s	> 1 h	1,6 s
25	> 1 h	1,1 s	> 1 h	0,6 s	> 1 h	3,6 s	> 1 h	3,6 s
30	> 1 h	1,8 s	> 1 h	1,0 s	> 1 h	7,5 s	> 1 h	6,2 s
35	> 1 h	3,0 s	> 1 h	1,8 s	> 1 h	11,3 s	> 1 h	11,9 s
40	> 1 h	4,6 s	> 1 h	2,9 s	> 1 h	16,7 s	> 1 h	16,8 s

Tabelle 2.2: Verifikation von mehrstufigen Multiplikationsnetzwerken.

Durch den integrierten Einsatz von MIP-, CP- und SAT-Techniken konnten erhebliche Fortschritte bei der Lösung von Eigenschaftsverifikationsproblemen erzielt werden. Die Tabellen 2.1 und 2.2 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 vier gültige Eigenschaften ausgewählt und Schaltungen mit Registerbreiten zwischen 5 und 40 Bit evaluiert.

Tabelle 2.3 zeigt die Ergebnisse für drei Eigenschaften einer arithmetisch-logischen Recheninheit. Sowohl für die vorzeichenbehaftete Multiplikation (Signed Multiply) als auch für die das Vorzeichen-Statusbit (Sign Flag) betreffende Eigenschaft ist unser CIP-Ansatz dem traditionellen SAT-basierten Verfahren überlegen. Die dritte, das Null-Statusbit (Zero Flag) betreffende Eigenschaft zeigt aber, dass SAT nicht vollständig durch CIP im bisherigen Stand ersetzt werden kann, sondern beide Verfahren parallel verwendet werden sollten.

#Bits	Signed Multiply		Sign Flag		Zero Flag	
	SAT	CIP	SAT	CIP	SAT	CIP
5	4,8 s	0,0 s	1,6 s	0,7 s	0,0 s	0,8 s
10	> 1 h	0,0 s	> 1 h	2,5 s	0,0 s	4,6 s
15	> 1 h	0,0 s	> 1 h	8,6 s	0,1 s	13,4 s
20	> 1 h	0,0 s	> 1 h	9,7 s	0,1 s	13,6 s
25	> 1 h	0,0 s	> 1 h	13,6 s	0,1 s	44,2 s
30	> 1 h	0,1 s	> 1 h	21,3 s	0,2 s	82,0 s
35	> 1 h	0,1 s	> 1 h	29,7 s	0,3 s	100,9 s
40	> 1 h	0,1 s	> 1 h	37,6 s	0,4 s	119,5 s

Tabelle 2.3: Verifikation von Arithmetisch-Logischen Einheiten (ALU).

### Auslastung von Laserquellen an Roboterschweißstationen

**Bearbeitet von:** Martin Grötschel, Andreas Tuchscherer

**Kooperationspartner:** Volkswagen AG, München; Steineke GmbH, Burgdorf

**Förderung:** Volkswagen AG

Laserschweißen hat sich während der letzten 10 Jahre zu einer Schlüsseltechnologie im modernen Karosseriebau entwickelt. Während einer Schweißphase bearbeiten an einer Schweißstation mehrere Schweißroboter (üblicherweise zwei bis sechs) gleichzeitig Schweißnähte an der Fahrzeugkarosserie. Solange ein Roboter schweißt, muss er von einer festen externen Laserquelle gespeist werden. Jede Laserquelle kann mehrere (bis zu sechs) Roboter versorgen, aber zu jedem Zeitpunkt immer nur einen. Heutige Technologie ermöglicht es, den Output einer Laserquelle in etwa 100 ms von einem Roboter zu einem anderen umzuschalten. In den meisten uns bekannten Fällen versorgt jede Laserquelle überhaupt nur einen Roboter.

Wir untersuchen in diesem Projekt, inwiefern es möglich ist, Laserquellen einzusparen, indem Roboter Quellen gemeinsam nutzen. Der Grund dafür, diese spezielle Zielfunktion zu betrachten, ist, dass die Laserquellen die bei weitem teuersten Geräte in einer Roboterschweißstation sind und ihre Kapazität so weit wie möglich ausgelastet sein sollte. Die Aufgabe besteht darin, die Bewegungen der Roboter entsprechend zu planen und zeitlich zu koordinieren. Verschiedene Nebenbedingungen müssen zusätzlich erfüllt werden, z. B. müssen die Roboterbewegungen kollisionsfrei erfolgen. Aus gewissen praktischen Gründen ist für jeden Roboter die Reihenfolge der Bearbeitung seiner Schweißnähte vorgegeben. Daher ist das Verlangsamen von bestimmten Roboterbewegungen der einzige mögliche Freiheitsgrad.

Anstatt die minimale Anzahl von Laserquellen direkt zu bestimmen, berechnen wir für eine vorgegebene Anzahl von Laserquellen die minimale Produktionsspanne (maximale Laufzeit eines Roboterschweißpfades). Falls es nur eine Laserquelle gibt, entspricht das zugehörige Optimierungsproblem einem speziellen Scheduling-Problem (*single-machine scheduling problem with minimum time lags*), bei dem die Vorrangbeziehungen Ketten bilden. Für nur zwei Ketten von Jobs (zwei Roboterschweißpfade) ist die Komplexität des Problems noch offen. Es existiert aber ein pseudopolynomialer Algorithmus (siehe [3]). Falls die Anzahl von Ketten jedoch Teil des Probleminputs ist, ist das Problem bereits NP-schwer, wenn eine der Ketten aus zwei oder mehr Jobs besteht, vgl. [4].

Für das betrachtete Schweißproblem haben wir eine Formulierung als gemischt-ganzzahliges lineares Programm entwickelt, welches sich für die untersuchten praktischen Fälle sehr

schnell lösen lässt. Das folgende Beispiel zeigt, dass der verwendete Ansatz trotz der sehr eingeschränkten Freiheitsgrade bereits erfolgreich sein kann. In diesem Beispiel werden drei Schweißroboter von drei Laserquellen versorgt, insgesamt müssen 34 Schweißnähte bearbeitet werden, und die Taktzeit beträgt 36 Sekunden. Abbildung 2.46 zeigt die vorgegebenen Roboterschweißpfade und die für zwei Laserquellen optimierten Schweißpfade.

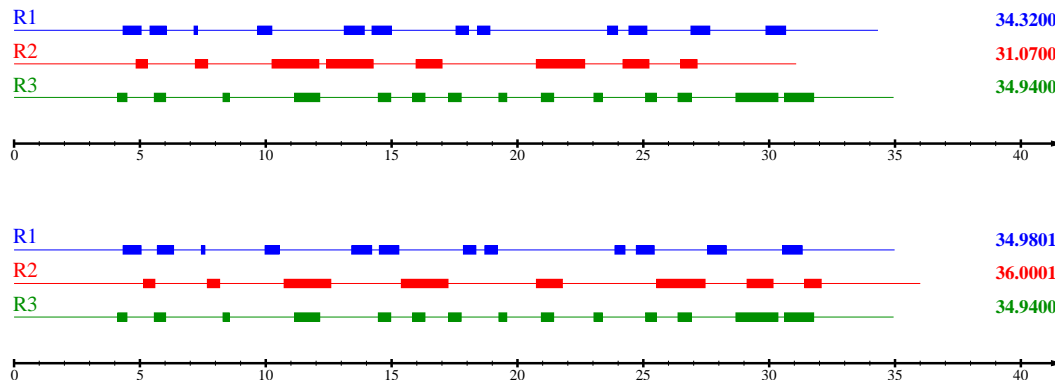


ABBILDUNG 2.46: Vorgegebene Roboterschweißpfade des betrachteten Problems (oben) und optimierte Roboterschweißpfade für zwei Laserquellen (unten). Die Blöcke repräsentieren die Schweißnähte und die Linien dazwischen symbolisieren das Verfahren der Roboter.

Wie man sieht, können sich in der optimierten Lösung die Roboter  $R1$  und  $R2$  eine Laserquelle teilen. Offenbar ist die Laufzeit des Schweißroboters  $R2$  fast genau identisch mit der Taktzeit von 36 Sekunden. Da die Problemdata höchst wahrscheinlich nicht auf vier Nachkommastellen genau sind, ist eine experimentelle Verifikation erforderlich, um zu entscheiden, ob die Schweißsequenz in der Praxis die Taktzeit einhält oder nicht. Falls nicht, gibt es mehrere Optionen. Zum Beispiel könnte man eine Schweißnaht geringfügig verkürzen oder in eine andere Schweißstation auslagern.

### Pilotprojekt zur Optimierung der Intermediate Stacking Area des Containerterminals in Botany Bay, Sydney

**Bearbeitet von:** Thorsten Koch

**Kooperationspartner:** Patrick Technology and Systems (Australien); University of New South Wales (Australien); University of Melbourne (Australien); Technische Universität Berlin

**Förderung:** DFG-Forschungszentrum MATHEON; Australian Research Council Centre of Excellence for Mathematics and Statistics of Complex Systems – MASCOS (Australien); Patrick Technology and Systems (Australien)

Die Patrick Cooperation ist einer der größten Logistikdienstleister in Australien und betreibt mehrere Container Terminals. Um die Kapazität zu vergrößern wird derzeit das Terminal in Botany Bay (Sydney) umgebaut. Eine Besonderheit des neuen Designs ist die Einführung einer *Intermediate Stacking Area* (ISA) zur Abfederung des zeitlich stark schwankenden Containeraufkommens auf der Landseite.



Die ISA kann etwa 2.000 Container zwischenlagern und soll nahezu vollautomatisch arbeiten. Hierbei kommen fünf schienengestützte Brückenkräne (Rail Mounted Gantry Cranes oder RMG) zum Einsatz. Diese sollen das Verladen der Container auf Lastwagen und Züge und innerhalb der ISA durchführen. Das Konzept ist bisher weltweit einzigartig. In Folge dessen gibt es noch keine bekannten Algorithmen zum Betrieb der ISA.

Im Rahmen einer Kooperation zwischen MATHEON und MASCOS sollte nun in einer Pilotstudie festgestellt werden, ob mathematische Methoden erfolgversprechend eingesetzt werden können. Die Aufgabenstellung beinhaltete die Steuerung der Brückenkräne, die Anordnung der Container in der ISA und die Zuweisung von Lastwagen an die entsprechenden Ladepositionen.

Ein Mitarbeiter des ZIB und eine Mitarbeiterin der TU Berlin haben sich vier Wochen in Australien zusammen mit Mitarbeitern der University of New South Wales und der University of Melbourne sowie Mitarbeitern der Firma Patrick Technology and Systems mit dem Problem auseinandergesetzt und erfolgreich einen gemischten Integer Programming/Online-Ansatz entwickelt. Testrechnungen an realen Daten wurden durchgeführt, der Ablauf simuliert und die Ergebnisse visualisiert. Die Pilotstudie wurde erfolgreich abgenommen. Verhandlungen zur Durchführung eines längerfristigen Projektes wurden aufgenommen.

### Publikationen

- [1] T. Achterberg, *SCIP – a framework to integrate Constraint and Mixed Integer Programming*, Report 04-19, ZIB, 2004.
- [2] T. Achterberg, *Conflict Analysis in Mixed Integer Programming*, Report 05-19, ZIB, 2005.
- [3] E. D. Wikum, *One-machine generalized precedence constrained scheduling*, Dissertation, Georgia Institute of Technology, 1992.
- [4] E. D. Wikum, D. C. Llewellyn und G. L. Nemhauser, *One-machine generalized precedence constrained scheduling problems*, *Operations Research Letters* **16** (1994), 87–99.

#### 2.2.14 Verteilte Systeme und Anwendungen

In der Arbeitsgruppe Computer Science Research werden seit mehreren Jahren Algorithmen und Methoden für das Management und die Nutzung verteilter, dynamischer Systeme erforscht. Ausgehend von den vorhandenen Grid-Systemen, die zumeist auf der Grundlage traditioneller Client/Server-Architekturen entwickelt wurden, beschäftigt sich die Arbeitsgruppe mit dem Einsatz neuer *Peer-to-Peer-Techniken* in Grid-Systemen [5, 6, 13, 15]. 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 wichtig ist. Auch die selbständige Rekonfiguration bei Komponentenausfällen wird durch Peer-to-Peer-Techniken ermöglicht.

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 von Dateien in verteilten Systemen. Im Gegensatz zu existierenden hierarchischen Dateisystemen (wie z. B. dem Network File System) ermöglicht unser

ZIB-DMS den Datenzugriff über frei wählbare Attribut-Wertepaare. Auf Dateien wird nicht über die Angabe ihres Speicherorts und Dateinamens zugegriffen, sondern über inhaltsbezogene Angaben. Da die Speicherknoten in verteilten Systemen jederzeit transient oder permanent ausfallen können, ist eine Datenreplikation unabdingbare Voraussetzung. Hierfür entwickeln wir Methoden zur Datenplatzierung, Caching, Staging, Routing, Scheduling und Synchronisation.

Die praktische Eignung der Datenmanagement-Verfahren wird mit den Anwendungen unserer Nachwuchsforschergruppe „Alignment und Threading auf parallelen Systemen“ des Berliner Centrums für Genombasierte Bioinformatik (BCB) getestet. Die dort entwickelten Threading-Algorithmen sind für den Einsatz in verteilten Cluster-Systemen konzipiert und greifen auf umfangreiche, verteilte Daten zu.

Neben dem BCB-Projekt und den beiden EU-Projekten CoreGrid und GridCoord, über die wir bereits im Vorjahr berichtet haben, konnten wir nun auch mehrere neue vom BMBF geförderte Grid-Projekte im Rahmen der deutschen D-Grid-Initiative starten, die sich ebenfalls mit verschiedenen Aspekten des verteilten Rechnens und Speicherns von Daten beschäftigen.

### **CoreGrid – European Research Network on Foundations, Software Infrastructures and Applications for Large-Scale Distributed, Grid and Peer-to-Peer Technologies**

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

**Förderung:** Europäische Union, 6. Rahmenprogramm

Das Projekt CoreGrid unterstützt die wissenschaftliche Zusammenarbeit von 41 europäischen Universitäten und Forschungsinstituten. Als so genanntes „Network of Excellence“ soll es die Qualität der Forschung im Bereich Grid und Peer-to-Peer-Computing steigern und die Ergebnisse einer breiteren Öffentlichkeit verfügbar machen. Dies geschieht durch gemeinsame Forschungsaktivitäten, Symposien sowie gegenseitige Kurzbesuche und Stipendien für Postdoktoranden.

Wir sind an den virtuellen Instituten „System Architecture“ und „Resource Management“ beteiligt, wobei das Hauptgewicht auf dem Institut „System Architecture“ (WP4) liegt. Dieses Institut wird von Artur Andrzejak seit der Entstehung des Netzwerkes geleitet. Die zentralen Themen dieses Instituts liegen in der Untersuchung von Skalierbarkeit, Adaptivität und Fehlertoleranz von Grid-Architekturen.

Das Thema „Skalierbarkeit“ innerhalb von WP4 umfasst als Schwerpunkte die Probleme der Ressourcenfindung mittels der Peer-to-Peer-Systeme sowie selbstorganisierende Grid-Dienste auf Basis der Peer-to-Peer-Technologien. Hier werden z. B. folgende Forschungsfragen behandelt:

- Wie kann man nach Ressourcen in sehr großen Grids suchen, auch wenn diese einem dynamischen Wandel unterliegen?
- Wie lassen sich dazu Erkenntnisse aus der Forschung der Peer-to-Peer-Technologien einsetzen, und wo liegen die Unterschiede zu Grid-Systemen?
- Wie soll die Architektur eines komponentenbasierten Grid-Systems aussehen, das die Eigenschaften der Selbstorganisation von Peer-to-Peer-Systemen einsetzt?

Die Themen „Adaptivität“ und „Fehlertoleranz“ sind innerhalb von WP4 verwandt und erle-

ben eine zunehmende Verschmelzung aufgrund der gemeinsamen Basistechnologien. Eines der Gebiete ist *Fault injection and stress testing*: Durch gezieltes Einschleusen von Fehlern in die Grid-Dienste und verteilte Applikationen lassen sich wichtige Rückschlüsse über die Stabilität der Grid-Infrastrukturen und die Möglichkeiten ihrer Verbesserung gewinnen. Ein anderes Forschungsfeld ist der Entwurf und die Implementierung fehlertoleranter Kommunikationsprotokolle, speziell des „Message Passing Interface“ (MPI). Dieses Thema ist für Grids von hoher Bedeutung, denn die heterogenen Umgebungen und komplexen Kommunikationsschemata der Applikationen stellen erhöhte Anforderungen an die Zuverlässigkeit der Kommunikation.

Ein weiteres Forschungsfeld, das mehr dem Thema „Adaptivität“ zuzuordnen ist, ist das Modellieren und die Vorhersage von Ressourcenbedarf (und anderen Statistiken) in verteilten Systemen. Hier ist das ZIB besonders aktiv und die gewonnenen Erkenntnisse werden als eine Basistechnologie zu vielerlei Zwecken eingesetzt. Dazu gehören z. B. proaktive Ressourcenzuordnung, langfristige Kapazitätsplanung oder das Erkennen von Anomalien wie Leistungsabfall durch falsche Konfiguration. Komplementär zu traditionellen Grids und Hochleistungsrechnern zielt die Forschung der Themen „Adaptivität“ und „Fehlertoleranz“ auf die sogenannten Desktop-Grid-Systeme, die eine hohe Rechenleistung zu einem geringen Preis durch den Zusammenschluss von Standard-PCs (wie z. B. Bürorechnern) ermöglichen. Die Ausnutzung dieser Ressourcen kann durch die Virtualisierung der Betriebssysteme und durch neue Schemata der nicht-intrusiven Nutzung der nicht-dedizierten Ressourcen erheblich gesteigert werden.

Im Jahr 2005 haben wir folgende Treffen der beteiligten Partner organisiert:

- First CoreGRID WP4-Meeting: 18. Januar 2005, Heraklion, Griechenland,
- Second CoreGRID WP4-Meeting: 14. Juli 2005, Barcelona, Spanien,
- Informal WP4-Meeting: 31. August 2005, Lissabon, Portugal.

Darüber hinaus haben wir – zusammen mit dem Partner FORTH, Griechenland – den *1st CoreGRID Workshop on GRID and P2P Systems Architecture* organisiert. Größere Beiträge zur Leitung von WP4 umfassten die Erstellung der Roadmap Version 1 of the Institute on System Architecture (D.SA.01) (zusammen mit anderen Partnern) und die Vorbereitung des Joint Program of Activities JPA2, die die Arbeit des virtuellen Instituts WP4 in den Projektmonaten 18 bis 30 spezifizierten.

### **GridCoord – ERA Pilot on a Co-ordinated Europe-Wide Initiative in Grid Research**

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

**Kooperationspartner:** Dipartimento di Informatica Sistemistica e Telematica (DIST, Genua, Italien; Università di Pisa, Italien; Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS), The Queen’s University Belfast, Irland; The Engineering and Physical Sciences Research Council (EPSRC), Swindon, Großbritannien; Institut National de Recherche en Informatique et Automatique (INRIA), Le Chesnay, Frankreich; Union Nationale des Syndicats Autonomes (UNSA), Bagnolet, Frankreich; Universiteit van Amsterdam, Niederlande; Computer and Automation Research Institute, Ungarische Akademie der Wissenschaften (MTA SZTAKI), Budapest, Ungarn; Universidad Politécnica de Madrid, Spanien; VINNOVA, Swedish Governmental Agency for Innovation Systems, Stockholm, Schweden; Poznań Supercomputing and

Networking Center (PSNC), Posen, Polen.

**Förderung:** Europäische Union, 6. Rahmenprogramm

Zur Weiterentwicklung des Grid Computing sind in Europa viele nationale und europäische Forschungsprogramme etabliert worden, die es sich zum Ziel gesetzt haben, neue Methoden, Technologien und Anwendungen zu entwickeln. Eine Koordination zwischen den Initiativen ist notwendig, um sowohl die nötige kritische Masse an Förderung zu erreichen, als auch Doppelförderung und Fragmentierung zu vermeiden, damit die Herausforderungen zielstrebig gemeistert werden können.

Ein zentrales Ziel von GridCoord liegt darin, die Kooperation zwischen den nationalen Förderinstitutionen und der EU zu stärken, um die Planung zukünftiger Grid-Forschung besser koordinieren zu können. Zusätzlich sollen bestehende Kooperationen zwischen Forschern und Anwendern intensiviert werden. Auf Basis der Ergebnisse der Analyse europäischer und nationaler Forschungsförderung soll ein abgestimmtes europäisches Forschungsförderprogramm formuliert werden, das es Europa erlaubt, eine führende Rolle im Bereich der Grid-Technologien und -Anwendungen einzunehmen.

### D-Grid-Projekte

**Bearbeitet von:** Alexander Reinefeld und dem ZIB-CSR-Team

**Förderung:** Bundesministerium für Bildung und Forschung

Im September 2005 konnten die bereits seit längerer Zeit geplanten und zwischenzeitlich gut vorbereiteten D-Grid-Projekte gestartet werden. Im Rahmen eines Vorbereitungsprojektes, an dem das ZIB maßgeblich beteiligt war, wurden die ursprünglich beim BMBF eingereichten Projektanträge überarbeitet und Synergien zwischen den Projekten identifiziert. Das ZIB ist an fünf der insgesamt sechs Projekte der ersten Förderrunde beteiligt:

- DGI – D-Grid Integrationsprojekt
- C3-Grid – Collaborative Climate Community Data and Processing Grid
- AstroGrid-D – German Astronomy Community Grid
- MediGRID – Ressourcenfusion für Medizin und Lebenswissenschaften
- HEPCG – Entwicklung von Anwendungen und Komponenten zur Datenauswertung in der Hochenergiephysik in einer nationalen eScience-Umgebung

Der Schwerpunkt der Forschungs- und Entwicklungsarbeit des ZIB liegt im Management verteilter Daten. Dabei sind sehr unterschiedliche anwendungsspezifische Anforderungen der Communities zu berücksichtigen, wie die folgenden Detailbeschreibungen der einzelnen Projekte zeigen.

### DGI – D-Grid-Integrationsprojekt

**Bearbeitet von:** Florian Schintke, Tobias Langhammer, Daniel Mauter

**Kooperationspartner:** Deutsches Elektronensynchrotron (DESY), Hamburg; DFN-Verein, Berlin; Fraunhofer-Gesellschaft, München, Forschungszentrum Jülich GmbH, Leibniz-Rechenzentrum, München

**Förderung:** Bundesministerium für Bildung und Forschung

Das DGI-Projekt hat das Ziel, in Deutschland eine robuste, flexible und nachhaltig nutzbare Grid-Infrastruktur zu schaffen, die für Wissenschaft und Industrie zur Basis neuer eScience-basierter Arbeitsformen werden wird. Im Teilbereich, an dem das Konrad-Zuse-Zentrum beteiligt ist, sollen zum Management großer Datenvolumina Speichersysteme im Grid auf Basis existierender und in einzelnen Communities bereits eingesetzter Software bereitgestellt und ein möglichst transparenter Zugriff ermöglicht werden. Unsere Arbeitsgruppe wird hier insbesondere die Einsatzmöglichkeiten des Storage Resource Brokers *SRB* des San Diego Supercomputer Centers untersuchen, einem etablierten Datenmanagement-Softwarepaket zur Handhabung verteilter und gegebenenfalls replizierter Daten.

### **C3-Grid – Collaborative Climate Community Data and Processing Grid**

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

**Kooperationspartner:** Alfred-Wegener-Institut für Polar- und Meeresforschung (AWI), Bremerhaven; Universität Dortmund; Max-Planck-Institut für Meteorologie, Hamburg; Universität zu Köln; Deutscher Wetterdienst (DWD), Offenbach; Deutsches Zentrum für Luft und Raumfahrt (DLR), Köln; Potsdam Institut für Klimafolgenforschung (PIK)

**Förderung:** Bundesministerium für Bildung und Forschung

Im C3-Grid-Projekt soll eine hochproduktive, grid-basierte Umgebung für die deutsche Erdsystemforschung geschaffen werden, die effizientes verteiltes Datenprocessing und interinstitutionellen Austausch von hochvolumigen Modell- und Beobachtungsdaten erlaubt. Das kollaborative Gesamtsystem soll einen einheitlichen und transparenten Zugriff auf geographisch und institutionell verteilte Archive erlauben und die Verarbeitung großer Datenmengen erleichtern.

Bei der Lösung der Problemstellung wird aufgrund der großen Datenvolumina nicht nur, wie in den meisten bisherigen Grid-Umgebungen, die Rechenkapazität als geographisch verteilte Ressource behandelt, sondern auch der persistente Speicher auf Festplatten oder Magnetbändern sowie Netzwerkleitungen. Durch geeignete Planung können voluminöse und lang andauernde Datenübertragungen vermieden werden, indem Rechnungen bevorzugt auf Rechenressourcen in der Nähe der Daten ausgeführt werden. Zudem sollen große Datentransfers, falls dennoch nötig, nicht einfach bei Bedarf angestoßen werden, sondern automatisch zeitlich geplant werden, um Zeiträume mit Freikapazitäten, beispielsweise in der Nacht, effektiver zu nutzen. Unsere Arbeitsgruppe entwickelt hierfür einen geeigneten Grid-Informationsdienst mit dazugehörigem Grid-Datenmanagement (siehe Abbildung 2.47), die beide eng mit dem Job-Management, den Datenanbietern und dem Portal verknüpft sind.

### **AstroGrid-D – German Astronomy Community Grid**

**Bearbeitet von:** Thomas Röblitz, Mikael Höggqvist

**Kooperationspartner:** Astrophysikalisches Institut Potsdam, Albert-Einstein-Institut, Potsdam; TU München; Zentrum für Astronomie der Universität Heidelberg; Max-Planck-Institut für Astrophysik, Garching; Max-Planck-Institut für extraterrestrische Physik, Garching

**Förderung:** Bundesministerium für Bildung und Forschung

Das AstroGrid-D-Projekt ist ein Forschungsprojekt zur Unterstützung des verteilten wissenschaftlichen Arbeitens im Rahmen der deutschen D-Grid-Initiative. Ziel dieses Vorhabens ist die Schaffung einer grid-basierten Infrastruktur für die deutsche astronomische und astro-

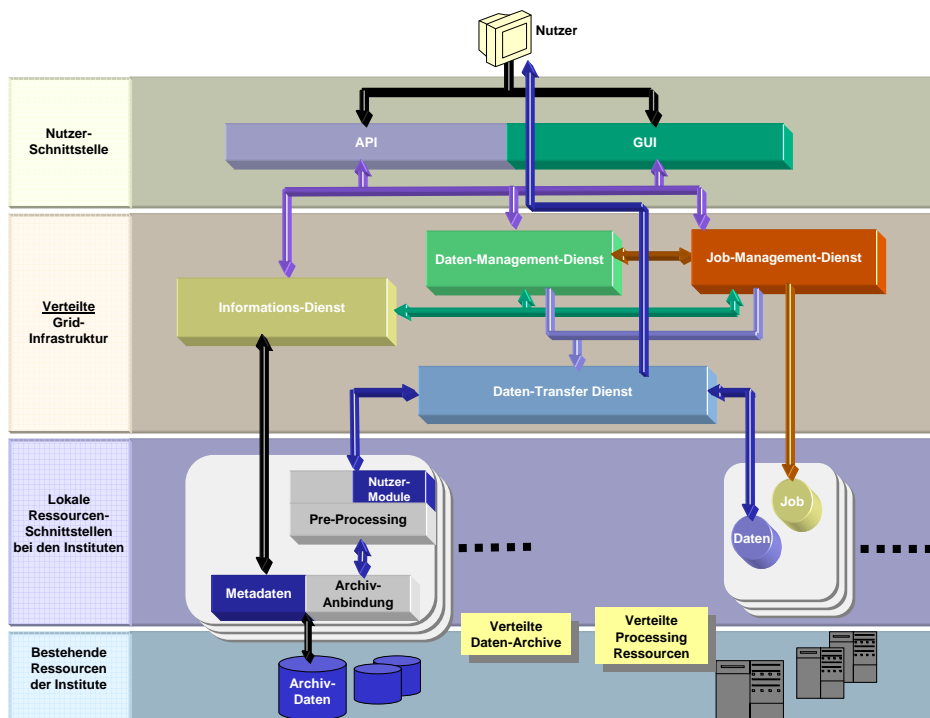


ABBILDUNG 2.47: Komponenten der C3-Grid-Architektur und ihre Kopplung untereinander.

physikalische Forschung, aufbauend auf dem Rechnerverbund der teilnehmenden Institute und Rechenzentren, um die existierenden Hardwareressourcen effektiver nutzen zu können. Das resultierende „German Astronomy Community Grid“ wird bereits bestehende, geografisch verteilte Hochleistungsrechner-Ressourcen mit großen astronomischen Datenarchiven, ferngesteuerten Radio- und Roboterteleskopen sowie bodengebundenen Gravitationswellen-Dektoren in einem kohärenten Rechen- und Daten-Grid integrieren. Standardisierte Benutzerschnittstellen ermöglichen einen einheitlichen, ortsunabhängigen Zugang zu den vorhandenen Rechenressourcen, was die Durchführung astrophysikalischer, numerischer Simulationen vereinfacht und effizienter gestaltet. Der transparente Zugriff sowohl auf lokale als auch im Grid verteilte astronomische Datenarchive soll für die in der Community entwickelten Datenanalyse-Anwendungen eine vereinheitlichte Verwaltung, Extraktion und Verarbeitung von komplexen Datensätzen ermöglichen.

### MediGRID – Ressourcenfusion für Medizin und Lebenswissenschaften

**Bearbeitet von:** Thomas Steinke, Kathrin Peter

**Kooperationspartner:** Telematikplattform für Medizinische Forschungsnetze e. V., Berlin; Universität Göttingen; Charité Berlin; Universitätsklinikum Schleswig-Holstein; Universität Marburg; Universität Leipzig; Fraunhofer-Gesellschaft, München

**Förderung:** Bundesministerium für Bildung und Forschung

Das MediGRID-Vorhaben realisiert für geeignete Anwendungsfälle mittels sechs miteinander verzahnter Module, die durch ein Koordinations- und ein eScience-Modul flankiert werden, eine Grid-Infrastruktur für Medizin und biomedizinische Informatik. Das Modul Ressourcenfu-

sion beinhaltet Forschungs- und Entwicklungsaufgaben mit der langfristigen Zielsetzung, eine Grid-Infrastruktur zur breiten Integration der bioinformatischen und medizinischen Forschung zu ermöglichen, sowie die technisch-organisatorische Koordination der Ressourcenprovider für MediGRID-Anwendungen.

### **HEPCG – Entwicklung von Anwendungen und Komponenten zur Datenauswertung in der Hochenergiephysik in einer nationalen eScience-Umgebung**

**Bearbeitet von:** Hinnerk Stüben

**Kooperationspartner:** Universität Dortmund; TU Dresden; Universität Freiburg; Ludwig-Maximilians-Universität München; Universität Siegen; Universität Wuppertal; DESY Hamburg und Zeuthen; Gesellschaft für Schwerionenforschung mbH (GSI), Darmstadt

**Förderung:** Bundesministerium für Bildung und Forschung

Das *HEP Community Grid* hat im Rahmen der D-Grid-Initiative zum Ziel, eine nachhaltige Grid-Infrastruktur in Deutschland im Bereich der Hochenergiephysik (HEP) aufzubauen. In enger Zusammenarbeit mit dem DESY Hamburg und dem NIC/DESY Zeuthen wird eine entsprechende Software-Infrastruktur entwickelt, die zum International Lattice DataGrid (ILDG)<sup>9</sup> konform ist. Am ZIB werden im Rahmen des Projekts Tools zur Administration des zentralen Metadatenkataloges entwickelt.

### **BCB-Nachwuchsforschergruppe – Projekt Alignment und Threading auf massiv parallelen Rechnern**

**Bearbeitet von:** Thomas Steinke, Patrick May, Christian Ehrlich, René Heek, Falko Krause, Jonas Maaskola, Sascha Willuweit

**Kooperationspartner:** FU Berlin; HU Berlin; Max-Delbrück-Centrum für Molekulare Medizin Berlin-Buch; Max-Planck-Institut für Molekulare Genetik, Berlin; TFH Berlin; Biotechnologisches Zentrum der TU Dresden

**Förderung:** Bundesministerium für Bildung und Forschung, BCB-Nachwuchsforschergruppe

Im Jahre 2005 lagen schwerpunktmäßig die Forschungs- und Entwicklungsaufgaben der Nachwuchsforschergruppe „Alignment und Threading auf massiv parallelen Rechnern“ des „Berliner Centrums für Genombasierte Bioinformatik“ (BCB) bei der Implementierung eines vollständig auf Web Services basierenden Workflows zur Proteinstrukturvorhersage. Kernkomponente des Workflows ist die Implementierung des Threading-Ansatzes zur Proteinfaltungserkennung. Zusätzlich sind im Workflow auch Web Services für die Modellierung homologer Strukturen (*Homology Modeling*) integriert, um auch Sequenzen mit einer hohen Sequenzähnlichkeit zu einer bekannten Struktur modellieren zu können. Damit werden Voraussetzungen geschaffen, um 2006 mit einem automatischen Strukturvorhersage-Server am CAFASP-Wettbewerb teilnehmen zu können. Bei Bedarf und ausreichenden Ressourcen könnte dieser Dienst auch für externe Interessenten angeboten werden.

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-Pipeline umfasst in der Phase der Vorprozessierung die Analyse der Sequenz, dem folgt das eigentliche Threading, und schließlich die 3D-Modellierung.

---

<sup>9</sup><http://www.lqcd.org/ildg>

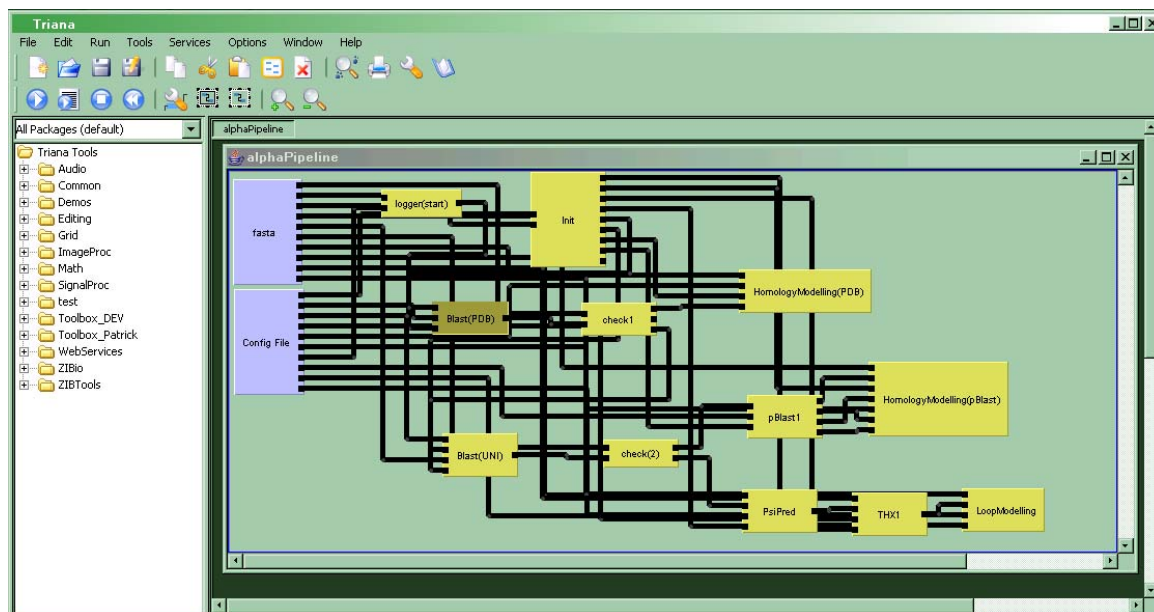


ABBILDUNG 2.48: Kompakte Darstellung des Workflows zur Proteinstrukturvorhersage in der Triana-Workflow-Engine.

Neben dem in der Arbeitsgruppe entwickelten Framework zur Faltungserkennung *Theseus* siehe Abschnitt 6.5) [8] werden in der Strukturvorhersage-Pipeline Legacy-Codes wie *PsiBlast* (Sequenzanalyse), *PsiPred* (Sekundärstrukturvorhersage), und *Modeller* (Homology Modeling) verwendet. Alle im Workflow benutzten Programme wurden als Web Services gekapselt. Die rechenintensiven Schritte sind als asynchrone Web Services implementiert. Diese Web Services interagieren mit dem Ressourcenmanagementsystem (Torque) eines Compute-Clusters, um einerseits die Ressourcenanforderungen für serielle und parallele Jobs zu befriedigen und andererseits eine effektive Nutzung der vorhandenen Rechenressourcen zu garantieren.

Aufgrund der guten Unterstützung bei der Orchestrierung von Web-Service-basierten Workflows wurde als Workflow-Engine *Triana* gewählt. Abbildung 2.48 zeigt eine kompakte Darstellung des Designs für den Strukturvorhersage-Workflow in *Triana*. Im Vergleich zu einer monolithischen Perl-Implementierung des Workflows ist der zusätzliche Aufwand durch die Web-Service-basierte Umsetzung in *Triana* unter 1%, so dass die Vorteile des modularen Designs praktisch überwiegen [9].

Der hier vorgestellte Workflow ist Bestandteil eines Anwendungsprojektes im MediGRID (siehe oben). Mit der *Bioinformatics Group* der TU-Dresden soll ein Workflow zur strukturellen Auswertung von RNAi-Experimenten bereitgestellt werden.



## Co-Reservierung von Ressourcen im Grid

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

**Kooperationspartner:** Krzysztof Rzacca (Laboratoire ID-IMAG, Grenoble, Frankreich und Polish-Japanese Institute of Information Technology, Warschau, Polen), Jörg Schneider, Barry Linnert (TU Berlin)

Die Lösung wissenschaftlicher Probleme und das Bestreben der Industrie, Rechenleistung flexibel anbieten zu können, stellen komplexere Anforderungen an die Verwaltung der verfügbaren Ressourcen. Insbesondere ist eine Koordination mehrerer Aktivitäten, z. B. der Arbeitsschritte in einem Workflow, erforderlich. Die Arbeiten dieses Projektes zielen darauf ab, die Koordination mit im voraus getroffenen Qualitätsvereinbarungen zu realisieren. Reservierungen von Ressourcen sind eine Möglichkeit, solche Vereinbarungen zu gewährleisten.

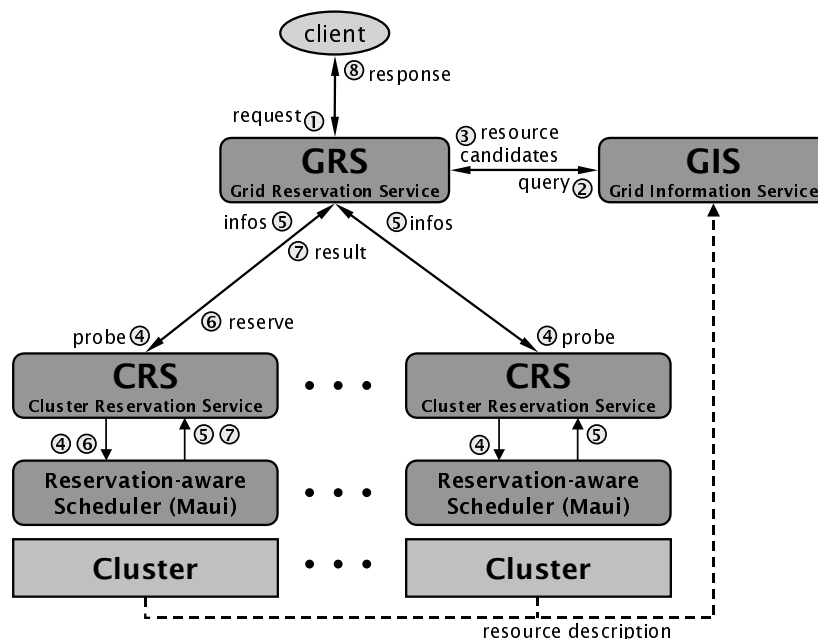


ABBILDUNG 2.49: Komponenten und Verfahren für die Bearbeitung von Co-Reservierungsanfragen.

Ein Reservierungssystem muss gleichzeitig die Anforderungen verschiedener Beteiligter – Ressourcenprovider, normale Benutzer und Benutzer, die Reservierungen verwenden – berücksichtigen. Die Auswahl erfolgversprechender Reservierungsparameter ist insbesondere in Grid-Umgebungen, in denen Zustandsinformationen über die Ressourcen unvollständig (Datenschutzbeschränkungen) oder veraltet sind, schwierig. Daher basiert unser Reservierungsverfahren auf flexiblen Anfragen [11]. Der Benutzer spezifiziert für ausgewählte Parameter Wertebereiche, z. B. für die früheste Startzeit oder die Anzahl der zu verwendenden Prozessoren. Die Bearbeitung einer Anfrage erfolgt in mehreren Schritten (vgl. Abbildung 2.49). Zunächst werden mögliche Ressourcenprovider durch Abfrage eines Grid-Informationssdienstes ermittelt. Danach werden Reservierungskandidaten – Tupel der Form (Ort, Prozessoranzahl, Beginn, Ende) – durch sogenannte *Probe*-Anfragen an die Ressourcenprovider ausgewählt. Mit diesen Anfragen werden detaillierte Zustandsinformationen bei den Ressourcen Providern erfragt.

Im Anschluss werden die möglichen Reservierungskandidaten entsprechend einer Kostenfunktion sortiert bzw., es wird das optimale Tupel bestimmt. Neben den erwähnten Attributen können jedem Tupel beliebige weitere Werte hinzugefügt werden. So können zum Beispiel Reservierungskosten oder ein Qualitätsmerkmal des Ressourcenproviders, welches beschreibt, wie gut ein Kandidat in den bestehenden Job-Schedule hineinpasst, bei der Bestimmung des optimalen Tupels verwendet werden. Zuletzt wird versucht, eine Reservierung eines Kandidaten vorzunehmen. Schlägt der Versuch fehl, wird versucht, den nächstbesten Kandidaten zu reservieren usw.

Im Berichtszeitraum haben wir die Algorithmen für die Bearbeitung flexibler Reservierungsanfragen weiter verbessert und umfangreiche Simulationen durchgeführt [11]. Wie erwartet eignen sich insbesondere Verfahren, die den Einfluss eines Reservierungskandidaten auf bestehende Job-Schedules berücksichtigen. Die Simulationen haben auch gezeigt, welche Auswirkungen ungenaue Benutzerangaben der Job-Laufzeiten im Kontext von Vorausreservierungen haben können. In bestimmten Situationen – ein großer normaler Job wird durch kleine Reservierungen blockiert und nach der letzten bekannten Reservierung eingeplant – müssen normale Jobs sehr lange warten, bis sie ausgeführt werden können. In der Zeit, bevor der große Job startet, werden sehr wenige oder sogar kein normaler Job ausgeführt. Für dieses Problem gibt es einige Ansätze, die wir in der Zukunft bearbeiten werden.

Darüber hinaus sollen die bisher entwickelten Verfahren für die Auswahl der Reservierungsparameter verallgemeinert werden, um unterschiedliche Ressourcen, die zu verschiedenen oder gleichen Zeitenräumen benötigt werden, in Form einer einzigen Reservierung behandeln zu können. Basierend auf einer formalen Beschreibung des Co-Reservierungsproblems (vgl. Ansatz in [10]) werden wir insbesondere Techniken der kombinatorischen Optimierung untersuchen.

## **Effiziente optimistische Replikation für mobile Datenbanken**

**Bearbeitet von:** Felix Hupfeld

Persönliche Daten wie Adressen, Termine und elektronische Kommunikation sind heute meist über mehrere Geräte verteilt gespeichert. Leider ist die Unterstützung dafür oft rudimentär – der Benutzer muß selbst für Verteilung und Abgleich der Daten sorgen. Abhilfe schafft hier ein System zur automatischen optimistischen Replikation, das Daten selbständig auf Geräte verteilt und Änderungen abgleicht. Optimistisch heißt in diesem Zusammenhang, dass alle Änderungen vom System erst einmal angenommen werden, und dass das System gegebenenfalls sich widersprechende Änderungen erkennt und korrigiert.

Damit ein solches System praktisch eingesetzt werden kann, muss man darauf achten, dass effizient mit Speicher und Netzanbindung umgegangen wird und der Abgleich geänderter Daten ohne zentrale Datenbank zwischen zwei beliebigen Geräten geschehen kann.

In diesem Kontext wurde ein Algorithmus entwickelt, der mobile Datenbanken über den Austausch von Änderungsprotokollen abgleicht. Die protokollierten Änderungen jedes Geräts müssen dabei in sogenannter kausaler Reihenfolge verteilt und anschließend auf anderen Geräten wieder auf die lokalen Daten angewendet werden. Kausal heißt hierbei, dass jede Änderung erst angewendet werden darf, nachdem alle ihr bekannten Änderungen eingepflegt worden sind.

Kern des Algorithmus ist die Verwendung von protokollierten Abgleichereignissen („Gerät 1 hat sich mit Gerät 2 zum Zeitpunkt  $t$  abgeglichen“) um Änderungskonflikte zu erkennen, und

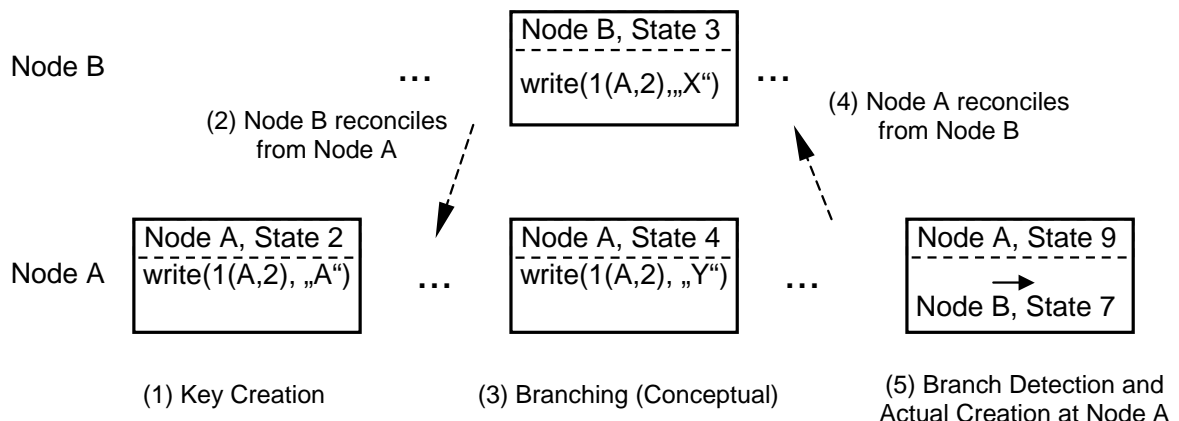


ABBILDUNG 2.50: Ein Datum wird erzeugt (1), verteilt (2), kausal gleichzeitig geschrieben (3), der Konflikt wird erkannt und behandelt (4,5)

um die Änderungsprotokolle zu verwalten. Mit Hilfe dieser Abgleichereignisse baut der Algorithmus einen Kausalitätsgraphen des Systems auf (siehe Abbildung 2.50), der dazu verwendet wird, kausal gleichzeitige Ereignisse zu neu empfangenen Operationen zu identifizieren, die eventuell im Konflikt stehen könnten.

Erkannte Konflikte werden so behandelt, dass beide Versionen der Daten auf allen Geräten zur Verfügung stehen, und somit auf jedem Gerät wieder zu einem konsistenten Datensatz zusammengeführt werden können. Die in Konflikt stehenden Datenversionen werden konsistent auf allen Geräten benannt, indem mit dem Kausalitätsgraphen die kausalen Pfade der gleichzeitigen Operationen verglichen werden und dabei Abzweigpunkte gesucht werden, die die beiden Versionen charakterisieren.

Es konnte gezeigt werden, dass der Algorithmus nur die Teile des Protokolls benötigt, die sowieso für den weiteren Abgleich vorgehalten werden müssen. Ältere Teile des Protokolls können auch mit Hilfe des Kausalitätsgraphen identifiziert und dann gelöscht werden. Neben den möglichst sparsam gestalteten Ereignissen ist dies die Basis für die Effizienz des Algorithmus hinsichtlich Speicher- und Kommunikationsbedarfs, die ihn für den Einsatz in mobilen Systemen prädestiniert.

## Zoetrop – Ein Webserver aus Verarbeitungsstufen

**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.

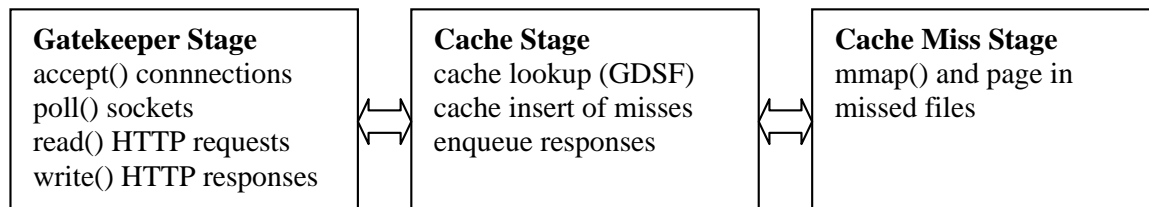


ABBILDUNG 2.51: Die Verarbeitungsstufen des Zoetrop-Webserver

Die einzelnen Verarbeitungsstufen werden von jeweils nur einem Thread ausgeführt. Daraus folgt insbesondere, dass die Verarbeitungslogik einer Stufe keine Operationen verwenden darf, die den Thread blockieren und somit die Verarbeitung weiterer Ereignisse verzögern. Sind solche blockierenden Operationen notwendig, so müssen sie in separate Verarbeitungsstufen ausgelagert werden.

Ein ereignisbasierter Ansatz hat für Serversoftware einige Vorteile. Im Server ist eine durch die genutzten Rechen-, I/O- und Speicherressourcen vorgegebene Parallelität vorhanden, die durch Verarbeitungsstufen gut abgebildet wird. Dadurch spart man sich Artefakte wie Threads, die selbst Ressourcen verbrauchen und aufwendig und teuer synchronisiert werden müssen. Auch nutzt die Verarbeitung mehrerer Ereignisse in Folge die Prozessor-Caches besser aus, was zu Leistungssteigerungen führen kann. Die ereigniszentrierte Programmierung ist jedoch für die meisten Entwickler ungewohnt und kann schnell komplex werden.

Vor diesem Hintergrund wurde die Abarbeitung von Webanfragen in Zoetrop in Stufen zur Netzwerkkommunikation (warten auf Netzwerkereignisse), zum Versenden von gecachten Dateien (nachsehen im Cache), und zum Nachladen von nicht gecachten Dateien (warten auf Festplattenzugriff) gegliedert (siehe Abbildung 2.51). Mit Hilfe des SPECweb99 Benchmarks konnte gezeigt werden, dass Zoetrop hinsichtlich Geschwindigkeit und Skalierbarkeit mit anderen Forschungswebservern mithält.

### Komplexe Suchanfragen in Peer-to-Peer-Systemen

**Bearbeitet von:** Thorsten Schütt, Florian Schintke, Christian von Prollius, Alexander Reinefeld, Roland Tuschl

Die ersten Vertreter der Gruppe der Peer-to-Peer-Systeme waren die als Tauschbörse für Musik bekannten Napster (1999) und Gnutella (2000). Napster speicherte Informationen über die verfügbare Musik auf einem zentralen Datenbankserver, während die Musik-Dateien direkt, d. h. ohne Zuhilfenahme des zentralen Servers, zwischen den Peers ausgetauscht wurden. Der zentrale Server begrenzte sowohl die Skalierbarkeit als auch die Ausfallsicherheit.

Gnutella ist das Gegenstück zu Napster: Statt eines zentralen Indexes verteilt es die Metainformationen über alle Peers. Suchanfragen mussten deshalb per „Flooding“ an alle Peers gesendet werden. Der hohe Aufwand für Suchanfragen begrenzte zwar die Skalierbarkeit; dafür konnten aber sehr komplexe Suchanfragen bearbeitet werden.

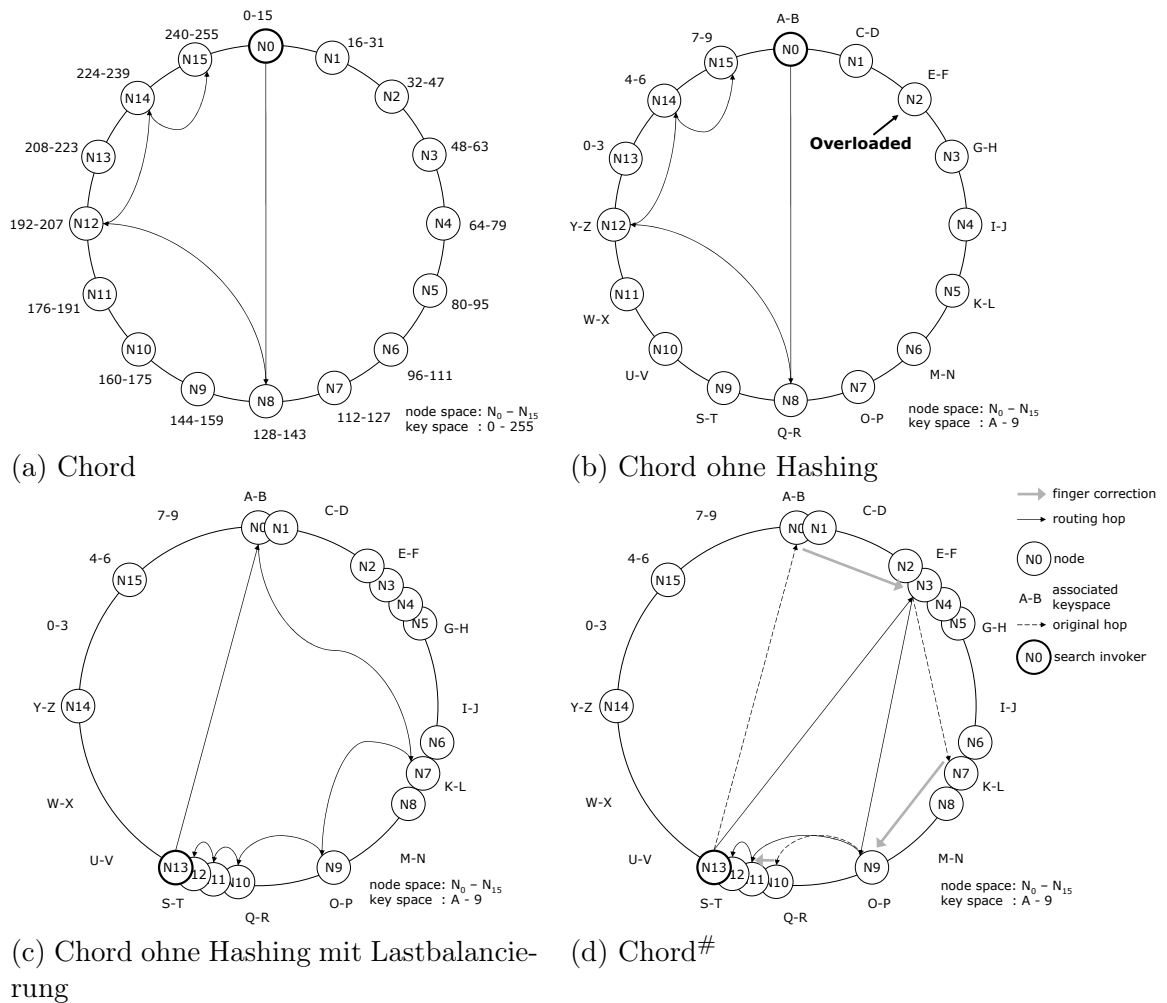


Abbildung 2.52: Von Chord nach Chord#

Mit Chord und CAN wurden 2001 die ersten beiden Vertreter der verteilten Hashtabellen (DHT) veröffentlicht. Sie zeichnen sich durch hohe Skalierbarkeit und relativ einfache Suchanfragen aus. Die Suchanfrage besteht aus einer Zeichenkette, von der ein Hashwert berechnet wird. Chord und CAN suchen dann nach diesem Hashwert. Dadurch lassen sich nur Elemente finden, deren Name im voraus bekannt ist.

Auf Basis von Chord haben wir das System Chord# entwickelt. Es garantiert logarithmischen Aufwand für die Bearbeitung von Suchanfragen, während z. B. Chord dieses nur mit hoher Wahrscheinlichkeit kann. In Simulationen traten Fälle auf, in denen Chord bis zu viermal langsamer als Chord# war. Im Durchschnitt benötigt Chord# weniger Bandbreite zur Aufrechterhaltung des Systems und kann Suchanfragen schneller beantworten. Zusätzlich unterstützt Chord# sogenannte Bereichsabfragen, in denen alle Namen gesucht werden, die zwischen einer unteren und einer oberen Schranke liegen. Dieses ist in Chord aufgrund des Hashings nicht möglich.

Abbildung 2.52 zeigt die Transformationsschnitte von Chord nach Chord#. Wenn Chord ohne Hashing betrieben wird (Abbildung 2.52 b), können einzelne Knoten überlastet werden, da

die Hashfunktion implizit für eine gleichmäßige Lastverteilung sorgt. Dafür sind hier die Namen lexikographisch auf dem Ring angeordnet und Bereichsabfragen werden möglich. Wird eine explizite Lastbalancierung eingeführt, gibt es keine überlasteten Knoten, aber der Aufwand für Suchanfragen ist nicht mehr in  $O(\log N)$ . Deshalb verwendet Chord<sup>#</sup> angepasste Routingtabellen, die die Suche mit logarithmischem Aufwand garantieren.

Ein erster Prototyp, der mehr-dimensionale Suchanfragen unterstützt, ist in der Entwicklung. Damit lassen sich z. B. geographische Datenbanken auf Basis von Peer-to-Peer-Systemen realisieren.

## **Adaptive Workflows für automatisches Management von Computersystemen**

**Bearbeitet von:** Artur Andrzejak, Ulf Hermann

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

Die Automatisierung des Managements von Ressourcen, verteilter Computersysteme oder ganzer Rechenzentren ist in den letzten Jahren zu einem wichtigen Thema der Forschung avanciert. Die Hintergründe dafür sind die wachsende Komplexität und Anzahl der Komponenten von Systemen, die das manuelle Eingreifen zum Flaschenhals des Managements machen, sowie der zunehmende Anteil der (traditionellen) Managementkosten an den „Total Costs of Ownership“.

In diesem Projekt konzentrieren wir uns auf die automatische Generierung von Workflows zum Zwecke der adaptiven Systemverwaltung. Derartige Workflows können komplexe Vorgänge durch Systemmanagement ausführen, wie die Installation von Software in verteilten Systemen, den Aufbau virtueller Rechnerfarmen in Grids und Rechenzentren, oder die Bereitstellung der Ressourcen für spezielle Jobs. In unserem Ansatz verwenden wir deklarative Spezifikationen möglicher Managementaktionen, die mit Hilfe von Techniken des automatischen Planens zu einem Workflow zusammengesetzt werden, um einen vorgegebenen Zielzustand des Systems zu erreichen. Ein solches Ziel kann sein, die vorhandenen Ressourcen zu einer virtuellen Serverfarm zusammenzuschließen, wobei die benötigte Software als Zwischenschritt konfiguriert wird. Das Feedback über das Erreichen oder Nichterreichen des Zielzustands wird eingesetzt, um nach einer Neuberechnung des Systemzustands diesen Prozess gegebenenfalls zu wiederholen, wodurch die adaptive Anpassung des Workflows an die neuen Ausführungsbedingungen erreicht wird.

Nach der Umsetzung dieses Ansatzes in dem prototypischen System **FeedbackFlow** [4] fokussierten wir auf das Problem der einfacheren Formalisierung (Spezifikation) der Inputs, d. h. der Aktionen, Systemzustände, und Planungsziele. Die Hauptaktivität in diesem Bereich besteht in der Integration eines existierenden Editors für Petri-Netze (**Renew**) in unseren Prototyp, um grafische Petri-Netz-basierte Spezifikationsarten zu ermöglichen. Neben der Fortführung dieses Vorhabens werden wir uns künftig mit dem Problem beschäftigen, wie bestehende Planer, die auf der Basis eines „Constraint Satisfaction Problem Solvers“ arbeiten, so modifiziert werden können, dass neben den Planungsnebenbedingungen auch beliebige andere Constraints berücksichtigt werden.

## Modellierung und Vorhersage des Bedarfs von Anwendungen in verteilten Umgebungen

**Bearbeitet von:** Artur Andrzejak, Mehmet Ceyran, Stefan Plantikow, Alexander Reinefeld  
**Kooperationspartner:** University of Coimbra (Portugal), Hewlett-Packard Labs, Palo Alto, USA

Die Modellierung und Vorhersage des Bedarfs von Anwendungen (sowie komplementär, der Kapazität von Ressourcen) werden zum einen bei dem automatischen Management von Ressourcen eingesetzt, zum anderen sind sie notwendig bei der gemeinsamen Nutzung von Ressourcen (Resource sharing) in Rechenzentren.

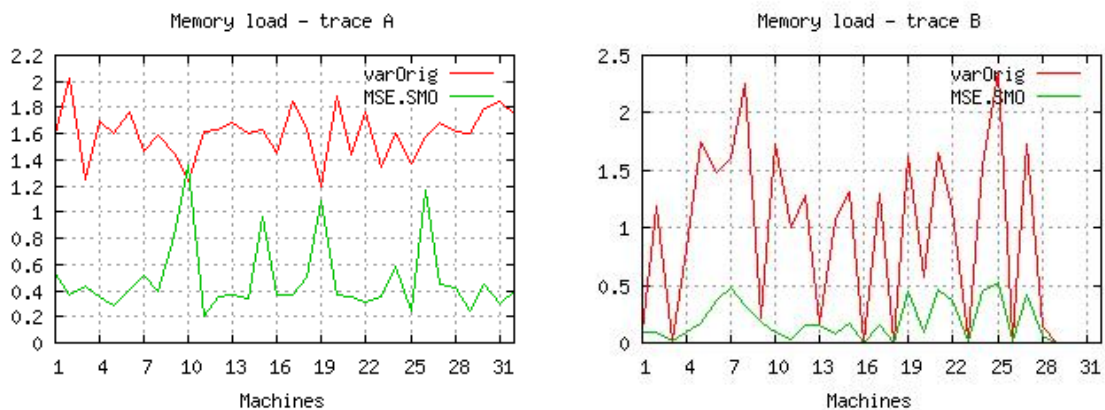


ABBILDUNG 2.53: Mittlerer quadratischer Fehler der Vorhersagen von Speicherauslastung (durchgezogene Linie, 30 Minuten im Voraus) gegenüber der Signalvarianz (gestrichelt) für zwei Datensätze über 39 bzw. 17 Tage

Die Zuverlässigkeit von Systemen gewinnt mit jedem Jahr an Bedeutung, was durch die zunehmende Verbreitung von funktionskritischen Computersystemen in vielen Lebensbereichen bedingt ist. Das automatische Management von Ressourcen hat daher u. a. die Gewährleistung der Zuverlässigkeit zum Ziel. Hier hilft die Bedarfsmodellierung und -vorhersage bei der Erkennung von Systeminfektionen (Intrusion detection). Sie erlaubt es, Fehlfunktionen von Servern oder Netzwerken automatisch zu erkennen und sie unterstützt Entscheidungen, ob und wann ein System neu hochgefahren werden soll, um eine bessere Leistung zu erzielen (Software rejuvenation).

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. Die effiziente Ausnutzung dieser Reserven ist besonders interessant im Bereich des Utility Computing, das im Rahmen der Zusammenarbeit mit Hewlett-Packard Labs angegangen wird. Hier hilft die Modellierung des kumulativen Applikationsbedarfs (sog. workloads) bei der langfristigen Kapazitätsplanung sowie dem kurzfristigen Scheduling. Ein weiterer Anwendungsbereich dieser Techniken ist die Zuordnung von Jobs zu Ressourcen bei Desktop- Grids, also Ansammlungen von Desktop-Computern, die in größeren Unternehmen oder Universitäten zusätzlich zu ihren primären Aufgaben in einen virtuellen Rechenverbund

oder Grid zusammengeschlossen wurden. Durch Einsatz von Modellierung kann die Ausnutzung der freien Kapazitäten maximiert werden, ohne dabei die primären Benutzer zu stören.

Im Rahmen des Projektes wurden mehrere Studien an realen Daten durchgeführt sowie ein Softwareframework aufgebaut, das flexibles Erkunden der Daten unter Einbeziehung diverser Algorithmen ermöglicht [3]. Bei den Studien haben wir (in Zusammenarbeit mit der University of Coimbra) untersucht, inwieweit man Charakteristika von Desktop-Computern in universitären Umgebungen modellieren und kurzfristig vorhersagen kann. Die eingesetzten Methoden beinhalten eine ausführliche Datenvorbereitung, automatische Attributselektion, sowie Klassifikation der erwarteten Desktop-Kapazität mit Hilfe von Verfahren aus dem Bereich Machine Learning/Data Mining, insbesondere Klassifikatoren wie Naive Bayes oder Entscheidungsbäume. Die Ergebnisse sind ermutigend: Abbildung 2.53 zeigt, dass die Vorhersagen für alle untersuchten Rechner sinnvolle Werte liefern, und für das Management von solchen Desktop-Grids (z. B. Jobzuordnung) eingesetzt werden können. Eine weitere Studie galt der Vorhersage von Rechnerverfügbarkeit in universitären Desktop-Pools. Auch hier wurden gute Vorhersageergebnisse erzielt. Die gegenwärtige Arbeit umfasst Studien über den Einsatz dieser Techniken für kurzfristiges Scheduling in Desktop-Grids.

Das im Laufe dieses Projektes aufgebaute Softwareframework „OPENSERIES“ ermöglicht die einfache Spezifikation einer „Kette“ von Verarbeitungsschritten (wie Datenaufbereitung, Klassifikation usw.) sowie die automatische Durchführung von Batchexperimenten für die Untersuchung verschiedener Szenarien. Das Framework beinhaltet eine Vielzahl von Algorithmen (aus fremden Bibliotheken wie Weka 3.4) sowie eigene Implementierungen, z. B. ARIMA-basierte Zeitreihenanalyse oder Klassifikationsalgorithmen, die Techniken der Genetic Fuzzy Logic einsetzen. Die gegenwärtige Arbeit fokussiert die Erweiterung und Modifikation von „OPENSERIES“, um sowohl Echtzeit- als auch Batchbetrieb ohne wesentliche Anpassungen der Konfigurationen durchführen zu können.

## ZIB-DMS

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

Im Grid Computing erhält das Thema Daten-Management in jüngster Zeit eine immer größer werdende Aufmerksamkeit, da bei wachsender zur Verfügung stehender Netzwerkbandbreite gleichzeitig die verteilt genutzten Datenmengen explodieren, so dass die ursprünglich hauptsächlich verfolgte Idee des Grid Computing, Rechenjobs auf geeignete, freie Ressourcen im Grid zu verteilen, aufgrund großer und lang andauernder Datentransfers zu einer nur suboptimalen Nutzung der zur Verfügung stehenden Ressourcen führt. Zudem wird der Bedarf nach einer über die Basismechanismen, wie dem einfachen Datentransfer, dem entfernten Datenzugriff oder einer Replikativverwaltung von Hand, hinausgehenden Lösung zum transparenten und selbstoptimierenden Grid-Datenmanagement immer deutlicher, um Anwendern die effiziente und komfortable Nutzung des Grid als Arbeitsumgebung zu ermöglichen.

Unser Forschungsprototyp ZIB-DMS („ZIB Distributed Data Management System“) ist ein solches verteiltes System zur Verwaltung replizierter Daten im Grid, an dem wir neue Lösungsmöglichkeiten in diesem Bereich untersuchen. Wir fokussieren unsere Arbeiten dabei hauptsächlich auf die Themen Skalierbarkeit, effiziente verteilte Speicherung von Metadaten, neue Organisationsmechanismen für sehr große Anzahlen von Dateien, Integrationsmöglichkeiten in existierende Systeme, Datenplatzierung, Verfügbarkeit replizierter Dateien, effizienter



Datenzugriff in verteilten Systemen und topologieberücksichtigende Synchronisation.

In [2] diskutieren wir Möglichkeiten zur Selbstoptimierung und Adaption innerhalb eines verteilten Systems mittels Regelkreisen, Selbstüberwachung und Vorhersagemechanismen. In verschiedenen Komponenten des ZIB-DMS eingesetzt, kann so die Adaptivität in einer dynamischen Umgebung ohne manuelle Eingriffe erhöht werden. Insbesondere bei Systemen wie ZIB-DMS, das als großes verteiltes System arbeitet, ist eine solche Selbstanpassung von wachsendem Interesse.

Eine neue flexible Replikatplatzierung und die Möglichkeit des datenabhängigen Scheduling werden derzeit erprobt und erweitern das Funktionsspektrum unseres Prototyps. Durch eine Überarbeitung des gesamten Metadatenystems in ZIB-DMS, das nun mittels einer hybriden Datenbankstruktur, die feste Kernattribute und frei wählbare Nutzerattribute miteinander vereint, eine kompaktere Speicherung der Metadaten ermöglicht, konnte die Leistungsfähigkeit in diesem Bereich gesteigert werden. Die neue Struktur ermöglicht zudem effizient feste domänenspezifische Metadatenstrukturen zu unterstützen.

Angestoßen durch unseren Forschungsprototypen sind weitere Forschungsergebnisse in den Themenbereichen effizienter, partieller, entfernter Datenzugriff (Kapitel 6.5) und Routing in Peer-to-Peer-Systemen (siehe oben) entstanden und veröffentlicht worden [1, 14].

### **I3HP – Hadron Physics**

**Bearbeitet von:** Hinnerk Stüben, Stefan Wollny

**Kooperationspartner:** 48 europäische Institute, Koordination: Instituto 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*<sup>10</sup> als Basis-Software eingesetzt. Im Rahmen des Projekts wurde am ZIB die intuitiv zu bedienende Kommandoschnittstelle *ltools*<sup>11</sup> für das Speichern und Lesen von Daten aus dem Bereich der Computational Hadron Physics entwickelt [16].

### **Publikationen**

- [1] G. Allen, K. Davis, T. Goodale, A. Hutanu, H. Kaiser, T. Kielmann, A. Merzky, R. van Niewpoort, A. Reinefeld, F. Schintke, T. Schütt, E. Seidel, B. Ullmer: *The Grid Application Toolkit: Toward Generic and Easy Application Programming Interfaces for the Grid*. In: Proceedings of the IEEE, 93(3): 534–550, März 2005.

---

<sup>10</sup><http://www.dcache.org>

<sup>11</sup><http://www.zib.de/i3hp/ltools>

- [2] A. Andrzejak, A. Reinefeld, F. Schintke, T. Schütt: *On Adaptability in Grid Systems*. In: M. Cosnard, V. Getov, D. Laforenza, A. Reinefeld (Hrsg.), *Future Generation Grids*. Dagstuhl Seminar Proceedings, Vol. 04451, Januar 2006.
- [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] A. Andrzejak, U. Hermann, A. Sahai: *FEEDBACKFLOW – An Adaptive Workflow Generator for System Management*. In *Proceedings of the 2nd IEEE International Conference on Autonomic Computing (ICAC-05)*, Seattle, Washington, USA, 13.–16. Juni 2005.
- [5] M. Cosnard, V. Getov, D. Laforenza, A. Reinefeld (Hrsg.): *Future Generation Grids*. Dagstuhl Seminar Proceedings, Vol. 04451, <http://drops.dagstuhl.de/opus/volltexte/2005/26/>, Januar 2005.
- [6] V. Getov, D. Laforenza, A. Reinefeld (Hrsg.): *Future Generation Grids*. Springer-Verlag, ISBN: 0 387 27935-0, 2006.
- [7] B. Kolbeck, T. Schmidt-Gönner, P. May, E. W. Knapp: *Protein structure alignment based on contact maps and secondary structure*. In: *Proceedings of the German Conference on Bioinformatics (GCB)*, 122–123, 2005.
- [8] P. May, B. Kallies, T. Steinke: *Theseus – A parallel threading core for highthroughput protein structure prediction*. In: *Proceedings of the 7th Congress of the World Association of Theoretically Oriented Chemists (WARTOC)*, 196, Januar 2005.
- [9] P. May, F. Krause, C. Ehrlich, J. Maaskola, T. Steinke: *ZIB threading pipeline – A webservice-based, distributed structure prediction workflow*. In: *Proceedings of the German Conference on Bioinformatics (GCB)*, 125–126, 2005.
- [10] T. Röblitz, A. Reinefeld: *Co-Reservation with the Concept of Virtual Resources*. In: *Proceedings of the 5th IEEE International Symposium on Cluster Computing and the Grid*, Cardiff, Wales, UK, 09.-12. Mai 2005.
- [11] T. Röblitz, F. Schintke, A. Reinefeld: *Resource Reservations with Fuzzy Requests*. *Concurrency and Computation: Practice and Experience*, 2005.
- [12] J. Rolia, L. Cherkasova, M. Arlitt, A. Andrzejak: *A Capacity Management Service for Resource Pools*. In *Proceedings of the Fifth International Workshop on Software and Performance (WOSP2005)*, Palma de Mallorca, Spain, 11.–14. Juli 2005.
- [13] P. van Roy, A. Ghodsi, S. Haridi, J.-B. Stefani, T. Coupaye, A. Reinefeld, E. Winter, R. Yap: *Self Management of Large-Scale Distributed Systems by Combining Peer-to-Peer Networks and Components*. Institute on System Architecture, CoreGRID Technical Report, TR-0018, 14. Dezember, 2005.
- [14] T. Schütt, F. Schintke, A. Reinefeld: *Chord#: Structured Overlay Network for Non-Uniform Load Distribution*. Report 05-40, ZIB, 2005.

- [15] P. M. A. Sloot, A. G. Hoekstra, T. Priol, A. Reinefeld, M. Bubak, (Hrsg.): *Advances in Grid Computing - EGC 2005*. Revised Selected Papers, Springer LNCS, Vol. 3470, European Grid Conference, Amsterdam, Niederlande, 14.-16. Februar 2005.
- [16] H. Stüben, S. Wollny: *Transnational Access to Mass Storage Capacity for Computational QCD*. Proceedings of Science LAT2005 (2005) 109.
- [17] S. Trissl, K. Rother, H. Muller, T. Steinke, I. Koch, R. Preissner, C. Froemmel, U. Leser: *Columba: an integrated database of proteins, structures, and annotation*. BMC Bioinformatics, 6(1):81–92, 2005.
- [18] J. Wendler, F. Schintke: *Executing and observing CFD applications on the Grid*. Future Generation Computer Systems, The International Journal of Grid Computing: Theory, Methods and Applications (FGCS), 21(1), 11.–18. Januar 2005.

## 2.3 Auszeichnungen und Rufe

### Martin Grötschel

- Mitglied der Deutschen Akademie der Naturforscher Leopoldina

### Hans Lamecker

- „Bester Vortrag“ bei der 3rd International Conference on Computer Aided Surgery around the Head, Berlin, ausgelobt von der RoboDent GmbH, Berlin

### Konrad Polthier

- „Digital Video Award 2005“, Melbourne, Australien
- „Best Science Video“ at Eurographics Animation Theater 2005, Dublin, Irland
- „Best Animation“ at New York International Film and Video Festival, 2005, Los Angeles, USA
- Ruf „Associate Professor“ International University Bremen GmbH, 2005 (abgelehnt)
- Ruf „W2-Professur“ Technische Universität München, 2005 (abgelehnt)
- Ruf „W3-Professur“ für Mathematische Geometrieverarbeitung, Freie Universität Berlin, 2005, Fachbereich Mathematik und Informatik (zum 01.12.2005 angenommen)



## WISSENSCHAFTLICHE DIENSTLEISTUNGEN

### 3.1 Überblick

Bis zur Jahresmitte Die Arbeit der Abteilung *Wissenschaftliche Informationssysteme* vollzog sich im Berichtsjahr weitgehend in geordneten und gesicherten Bahnen:

- Die KOBV-Zentrale brachte in dem „langen Jahr“ 2005 (bis zum Februar 2006) drei ihrer wichtigsten Großprojekte zu einem erfolgreichen Abschluss: die Einrichtung der Online-Fernleihe in Kooperation mit den deutschen Verbänden, den Aufbau des KOBV-Index in einer neuen Version (Union Catalog Package), die den seit fünf Jahren überfälligen KOBV-Index ersetzt, und drittens die komplexe Migration auf die Version 3 der MetaLib im Konsortium mit den KOBV-Partnern in HU und FU, die auch für das KOBV-Portal wichtige Vereinfachungen mit sich brachte. Gleichzeitig wandte sich die KOBV-Zentrale mit der Einführung des Dokumentenverwaltungssystems OPUS und dem Aufbau eines Zeitschriftenartikelservers für Backfiles des Friedrich-Althoff-Konsortiums dem Thema der Speicherung, Erschließung und Archivierung von Content zu – womit eine wichtige Grundsatzentscheidung getroffen war.
- Das Math-Net-Projekt setzte seine im Jahr 2004 begonnene Untersuchung von Suchmaschinentechnologien fort und vertiefte sie um Studien zur automatischen Klassifikation von wissenschaftlichen Veröffentlichungen aus dem Fachgebiet „Mathematik“. Das vom BMBF geförderte Math&Industry-Projekt wurde in Kooperation mit dem Institut für Wissenschaftliche Information, Osnabrück, erfolgreich fortgesetzt.
- Der Fokus des Museums-Projektes lag auf Beiträgen zu den Grundlagen der Strukturierung der für die Inventarisierung von Museumsobjekten benötigten Daten. Im Vordergrund stand die Evaluierung und Überprüfung der Praxistauglichkeit des vom „International Committee for Documentation of the International Council of Museums“ (ICOM-CIDOC) entwickelten objektorientierten „Conceptual Reference Model“ (CRM), das sich zur Zeit im Prozess der Normierung durch die ISO befindet.
- Eine kleine Computeralgebra-Gruppe am ZIB beteiligt sich federführend und im Verbund mit einer weltweit operierenden REDUCE-Community (RAND Corporation, USA; University of Bath, England; Fraunhofer-Institut Algorithmen und wissenschaftliches Rechnen, Bonn; Universität/GH Kassel; Universität Passau; Queen Mary College London, England; Brock University, St. Catharines, Kanada) an der kollaborativen Weiterentwicklung von REDUCE, mit zahlreichen Beiträgen von Wissenschaftlern aus den USA, aus Japan, Australien und mehreren europäischen Ländern.

Mitte des Jahres erfuhr der KOBV von Bemühungen eines befreundeten Verbundes, der im Zuge seiner strategischen Neuorganisation deutschlandweite Marktaktivitäten entfaltete und gleichzeitig Kooperationspartner zu gewinnen suchte. Das Kuratorium des KOBV

reagierte mit einer Besinnung auf die eigenen Ziele und rief eine Kommission ins Leben, welche die Strategie des KOBV über das Jahr 2010, dem Zeitpunkt der Neubewertung der KOBV-Verträge, hinaus klären soll.

Mitte des Berichtsjahres wurde auch deutlich, dass die im Dezember 2004 eingeführten Suchdienste *Google Scholar* für das Auffinden wissenschaftlicher Literatur und das *Google Library Project* nicht nur für wissenschaftliche Bibliotheken, sondern auch für Initiativen, wie das Math-Net-Projekt, eine Herausforderung erster Ordnung darstellen. Warum sollte man sich in der International Mathematical Union überhaupt noch für das Math-Net und seine Suchdienste engagieren? Erfüllt nicht Google mit seinen neuen Diensten bereits alle Wünsche? Geht mit den neuen Google-Diensten *Google Scholar* und der *Google Book Search* nicht sogar ein Teil des Open Access-Traumes der Mathematik in Erfüllung, und das ohne großen manuellen Aufwand für die Mathematiker?

*Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin Brandenburg (KOBV)*: Die KOBV-Zentrale kann den KOBV-Bibliotheken und ihren Nutzern inzwischen ein Spektrum von Produkten und Diensten anbieten, das an Breite und Substanz mit den Angeboten anderer Verbände und personalstärkerer Verbundzentralen durchaus in Wettbewerb treten kann. Hierzu die folgende kurze Übersicht über die Produkte und Dienste des KOBV:

#### **Basisdienste für Benutzer**

- Virtueller Verbund (KOBV-Suchmaschine)
- Virtueller Gesamtkatalog der Verbände
- Online-Fernleihe und Dokumentenlieferung im nationalen Verbund
- KOBV-Bibliothekenführer
- Virtuelle Fachverbände FILM und JUDAICA in Deutschland
- SFX, Open Linking und Open Access für Volltexte
- KOBV-Hotline (Beratung per E-Mail)
- KOBV-Informationsserver

#### **Basisdienste für Bibliotheken**

- Zentrales Fremd- und Normdatenangebot
- Virtuelle Katalogisierung und Virtueller Katalogisierungsverbund (Sequentiell Verteilte Suche)
- Autonome Z39.50-Suchmaschine ZACK
- Diverse Informations- und Kommunikationsdienste (E-Mail-Listen und -Archive, Wikis)

#### **Portal und Digitale Bibliothek**

- KOBV-Portal (mit Open Access-Charakter)
- Metadaten-Austausch (Metadata-Sharing)
- Erschließung freier Internet-Ressourcen (kooperativ)

- Digitale Open Access-Journale (Nachweise per SFX)
- Konsortiallösung des KOBV-Portals (MetaLib/SFX, Hosting-Dienst)
- Dokumentenserver auf Opus-Basis (Hosting-Dienst)
- Archivserver für Backfiles des FAK (Elsevier, Kluwer, Springer)
- Integrierter Volltextserver für Dokumente und Backfiles
- Die verteilte Digitale Bibliothek des KOBV

Nähere Einzelheiten zu einzelnen Produkten sind auch im Kapitel 6.7 „Produkte und Dienste des KOBV“ dieses Jahresberichtes zu finden. Wir kommen in der Darstellung der Schwerpunkte noch darauf zurück.

*IuK-Dienste für die Mathematik und deren Anwendung in Industrie und Dienstleistungen:* Elektronische Information und Kommunikation in der Mathematik haben sich seit Beginn der Internet-Ära zu einem unverzichtbaren Hilfsmittel für die Forschung und Lehre entwickelt. Mathematisch relevante Informationen werden an vielen Stellen bereitgestellt und differieren in Inhalt und Form.

Die universellen Suchmaschinen, allen voran Google, sammeln die Dokumente und werten die Volltexte mit automatischen Methoden aus. Mit wachsendem Erfolg: Google hat mit seinem Ranking-Verfahren die Suchmaschinen-Technologien nachhaltig verändert. Auch für den wissenschaftlichen Bereich müssen automatische Verfahren und Methoden entwickelt werden, die ein einfaches und effektives Auffinden der im Web vorhandenen relevanten Informationen ermöglichen.

Internet-Suchmaschinen bestehen aus mehreren Komponenten. Im Berichtszeitraum hat die Arbeitsgruppe am ZIB insbesondere die Werkzeuge für das Gathern (Sammeln) der Informationen untersucht. Die im Web verfügbaren Werkzeuge wurden für spezifische Web-Seiten auf ihre Leistungsmerkmale, etwa Vollständigkeit beim Sammeln der Dokumente, evaluiert. Der Aufbau leistungsfähiger Suchmaschinen für solche Themengebiete wie die Mathematik erfordert eine effiziente Verwaltung der gesammelten Dokumente. Hierfür wurde ein technisches Konzept entwickelt, das derzeit implementiert wird.

Suchmaschinen für spezifische Bereiche („Topical Search Engines“) müssen in der Lage sein, relevante Web-Seiten zu erkennen und aus der Gesamtheit der Web-Seiten zu filtern. Der automatische Klassifikation von Ressourcen, etwa der Klassifizierung mathematischer Publikationen nach der Mathematical Subject Classification (MSC), fällt hierbei eine Schlüsselrolle zu. Für die automatische Klassifikation gibt es verschiedene Ansätze und Methoden. Die Text-Kategorisierung verwendet Methoden des maschinellen Lernens. Ausgangspunkt des Verfahrens ist eine Trainingsmenge von Dokumenten, die bereits durch Experten klassifiziert worden sind. Diese Dokumente werden dazu benutzt, eine Klasse zu charakterisieren. Dazu werden etwa Term-Häufigkeitsvektoren der Klassen berechnet. Diese Vektoren werden dann mit den entsprechenden Vektoren der Dokumente auf ihre Ähnlichkeit getestet.

Die Ergebnisse einer automatischen Klassifizierung werden durch verschiedene Faktoren, u. a. das Themengebiet, die Anzahl und die Struktur des Klassifikationsschemas, beeinflusst. Für mathematische Publikationen sind bisher keine Resultate bekannt. Unsere Tests haben gezeigt, dass automatische Verfahren durchaus in der Lage sind, mathematische Publikationen zu klassifizieren. Allerdings liefern die Standardwerkzeuge keine befriedigenden Ergebnisse. Spezielle Anpassungen, etwa mathematikspezifische Stopwortlisten für die Aufbereitung der Dokumente, sind erforderlich, um hier brauchbare Ergebnisse zu erzielen. Insbesondere kön-

nen kontextspezifische Informationen, wie die Arbeitsgebiete der Autoren einer Publikation oder die Klassifikationen der in einer Arbeit zitierten Publikationen, in die Klassifizierung einer Arbeit einbezogen werden.

Die Klassifikation von Web-Seiten nach verschiedenen Schemata ist ein wichtiges Werkzeug, den Zugang zu den Informationen, wie sie Portale bieten, zu verbessern. „Multifaceted Browsing“ etwa ermöglicht ein flexibles Navigieren in unterschiedlichen Richtungen, beispielsweise ein Navigieren nach mathematischen Gebieten, dem Typ oder der Sprache, in der die Informationen bereitgestellt werden. Für die Math-Net-Links wurde eine erste Datenbanklösung entwickelt, die diese Ansätze berücksichtigt.

Die Arbeiten zum Aufbau eines Portals für Anwendungen in der Mathematik, speziell für das BMBF-Mathematikprogramm, wurden weitergeführt. Im vergangenen Jahr konzentrierte sich die Arbeit in diesem Projekt auf

- die Erstellung der Web-Seiten für die Projekte der ersten und zweiten Förderperiode des BMBF-Mathematikprogramms.
- die Überarbeitung und Erweiterung der Werkzeuge zur Erstellung der Web-Seiten der Projekte
- die Entwicklung und den prototypischen Aufbau der Expertendatenbank als neuen wichtigen Service für Anwender.

Neben den erwähnten Aktivitäten werden weitere Community-orientierte Informations- und Kommunikationsdienste vom ZIB angeboten und administriert, insbesondere der Server der International Mathematical Union (IMU)<sup>1</sup>, das Electronic World Directory of Mathematicians (EWDW)<sup>2</sup>, die elib-Softwarebibliothek<sup>3</sup> oder die Opt-Net-Mailing-Liste.

*Computeralgebra:* Im Berichtszeitraum wurde die Version 3.8 des Computeralgebrasystems REDUCE (3. Quartal 2004) weiterentwickelt. Es wurden Fehler korrigiert, die Benutzer beraten und neue Module erstellt.

Der ZIB-Fellow Thomas Wolf von der Brock-University in Ontario, Kanada, war im zweiten Halbjahr 2005 für ca. fünf Monate Gast des ZIB. Dabei ergab sich die Möglichkeit vielfältiger Zusammenarbeit in der Computeralgebra, insbesondere zu dem Subsystem CRACK von Thomas Wolf.

Es steht jetzt auch eine REDUCE-Version für Personal Computer mit 64-bit-Prozessoren bereit. Diese erlaubt es, den gesamten Speicher des PCs zu adressieren und als temporären Arbeitsspeicher zu nutzen. Auch die Version für Mac OS-X im 32-bit- oder 64-bit-Modus wurde fertiggestellt und wird nun vertrieben.

Über ein Thema aus dem Bereich MathML und Math-Net wird in Zusammenarbeit mit der Computeralgebra zur Zeit eine Diplomarbeit angefertigt.

---

<sup>1</sup><http://www.mathunion.org>

<sup>2</sup><http://www.mathunion.org/ewdm/>

<sup>3</sup><http://elib.zib.de/netlib/>



## 3.2 Schwerpunkte

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

**Bearbeitet von:** Hildegard Franck, Martin Grötschel, Jörn Hasenclever (seit 15.04.2005) Lavinia Hodoroaba, Andres Imhof, Uta Kaminsky, Zara Kanaeva (bis 31.05.2005), Renate Kraft, Monika Kuberek, Monika Lill, Stefan Lohrum, Joachim Lügger, Markus Malo (bis 31.03.2005), 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)

Nur wenige Bibliotheken realisieren, dass ihnen mit Google und anderen Internet-Firmen eine neue Konkurrenz ins Haus wächst. Wissenschaftler und vor allem Studenten haben bei der Suche bereits ihre Arbeitsabläufe geändert. Sie schlagen zuerst bei Google nach. Leider werden deshalb im Bereich der Bibliotheken und Verbünde auch manche Chancen übersehen, neue und konkurrenzfähige Bibliotheksprodukte und Dienste zu entwickeln. e-Science<sup>4</sup> scheint noch weit entfernt. In den großen Bibliotheken der USA geht aber z. B. die OPAC-Nutzung bereits auf breiter Front zurück.<sup>5</sup> Die Suche mit Internet-Suchmaschinen hat sich durchgesetzt, auch im Bereich der wissenschaftlichen Literatur.

In diesem Bereich hat die KOBV-Zentrale durch die Erprobung und den Einsatz von Internet-Technologien Stärken entwickelt und sieht sich gut aufgestellt. Stichworte sind der Einsatz von *Open Source*-Suchmaschinen und Indexierern *Swish-e*, *Lucene* und *Nutch* bzw. in Form von Produkten des KOBV ausgedrückt, der Zeitschriftenartikelservers und die Integration von Dokumenten- und Volltext-Servern. Es ist das Ziel der KOBV-Zentrale, auf dieser Basis zu einem neuen Portalbegriff mit einer zu Google-Scholar konkurrenzfähigen Such- und Ranking-Technologie zu kommen (*Citation-Ranking*).

Nach der bisherigen Konzeption wurden das KOBV-Portal und die digitale Bibliothek allein auf der Basis der Ex Libris-Systeme Aleph/MetaLib/SFX aufgebaut – mit erheblichem personellem Einsatz und eigenen Entwicklungen in großem Umfang. Zwar verzögerte sich die Migration von MetaLib/SFX (inklusive der Konsortialportale) über das Jahresende aufgrund von Problemen bei Ex Libris, kam dann aber im Februar 2006 zum erfolgreichen Abschluss. Das „lange Jahr 2005“ ging auch für den neuen KOBV-Index (Grundlage: Union Catalog Package), auf den die KOBV-Zentrale über fünf Jahre gewartet hatte, im Februar 2006 erfolgreich zu Ende. Damit gelang auch dem gemeinsamen KOBV-Index, in dem Titeldaten aus den großen KOBV-Bibliotheken zusammengespielt werden, der Sprung auf eine neue Softwarebasis.

In der bisherigen Konzeption des KOBV-Portals wurde zunächst weitgehend auf eine echte Integration von durchsuchbaren Ressourcen verzichtet und stattdessen überwiegend auf den Nachweis der regionalen Ressourcen in Form von Links gesetzt. Hierfür wurden mit erheblichem personellem Aufwand per Hand geschriebene Metadaten gesammelt und eine aufwendig besetzte „Redaktion der freien Ressourcen“ in Gang gesetzt. Diese Vorgehensweise ist in Zukunft jedoch kritisch zu hinterfragen. Das Ziel der KOBV-Zentrale ist es, manuelle Arbeiten

<sup>4</sup>Erläuterungen zu e-Science siehe <http://www.e-science-forum.de/de/105.php>

<sup>5</sup>Perceptions of Libraries and Information Resources, OCLC 2005, siehe <http://www.oclc.org/reports/2005perceptions.htm>

weitgehend zu vermeiden und – wo immer möglich – durch Automatisierung zu ersetzen. In dieser Hinsicht ist ein für das KOBV-Portal eigens entwickelter Metadaten-Parser für die automatische Synchronisation von Metadaten der digitalen Ressourcen zwischen den lokalen Einrichtungen und der KOBV-Zentrale als Erfolg zu werten. Dieser so genannte KMA-Parser unterstützt auch das Metadaten-Sharing zwischen den KOBV-Bibliotheken.

Zu den Erfolgen des Berichtszeitraumes zählen auch die Einrichtung und der kooperative Betrieb der überregionalen Fernleihe in Zusammenarbeit mit den deutschen Verbundsystemen, die im dritten Quartal des Jahres 2005 in den Routinebetrieb ging. Die Bestellung von Kopien ist nun nicht mehr nur innerhalb des Bereichs der KOBV-Bibliotheken möglich, sondern auch bei Bibliotheken des Bibliotheksverbands Bayern (BVB), des Bibliothekservice-Zentrums Baden-Württemberg (BSZ), des Gemeinsamen Bibliotheksverbands (GBV) der Länder Bremen, Hamburg, Mecklenburg-Vorpommern, Niedersachsen, Sachsen-Anhalt, Schleswig-Holstein, Thüringen und der Stiftung Preußischer Kulturbesitz, des Hessischen Bibliotheks-Informationssystem (HeBIS) und des NRW-Ressourcenverbundes.

Mit dem Aufbau von OPUS-Servern für die Universitätsbibliothek der TU Berlin und der Universität Potsdam im August 2005 betrat der KOBV Neuland: die Speicherung von Content durch die KOBV-Zentrale im ZIB. Bisher hatte die KOBV-Zentrale keinen „eigenen bzw. echten“ Content (Volltexte) gespeichert und indiziert. Jetzt beschritt der KOBV im Zuge einer Grundsatzentscheidung im August 2005 erstmals das Gebiet der Speicherung von Open Access-Dokumenten und -Publikationen. Im Zuge der Fortführung der Konzeption eines Verteilten Zeitschriftenservers kamen im nächsten Monat die Archivdaten (Backfiles) der digitalen Springer- und Kluwer-Journale, die das Friedrich-Althoff-Konsortium lizenziert hatte, hinzu und bis zum Jahresende 2005 (vorerst nur in einer internen Version) die entsprechenden digitalen Journale des Elsevier-Verlages – insgesamt ca. 1,5 Millionen Artikel, alle mit Internet-Technologie erschlossen.

Im organisatorischen Bereich hatte der KOBV mit der Einführung der *Balanced Score Card* ebenfalls Neuland betreten. Dieses stellte sich jedoch etwa in der Mitte des Jahres als ein Territorium heraus, das in einzelnen Gebieten schwierig zu begehen war. Um nur ein Beispiel zu nennen: Die „Messung“ der Katalogisierungsleistung in den an diesem Projekt beteiligten Bibliotheken ließ sich nicht im einheitlichen Einverständnis regeln, weil die konkrete Arbeit der Katalogisierung jeweils auf unterschiedliche Personalbereiche verteilt ist und zudem bei der Einführung derartiger „Leistungsmessungen“ der Personalrat zu beteiligen ist. Trotz dieser Widrigkeiten übergaben der in dieser Sache aktiv gewordenen Hauptausschuss des KOBV und die KOBV-Zentrale dem KOBV-Kuratorium das neuartige Steuerinstrument zur Ausübung des KOBV-weiten Controlling in dessen Herbstsitzung in 2005.

Im Zuge der Einführung der *Balanced Score Card* wurden ferner probeweise aussagekräftige KOBV-weite Statistikdaten erhoben und eine erste experimentelle Online-Umfrage zum Bekanntheitsgrad und Nutzen der zentralen Leistungen des KOBV für seine Nutzer durchgeführt, das heißt, für die KOBV-Bibliotheken selbst und deren Nutzer. Innerhalb der KOBV-Zentrale entwickelte jedoch eine breit angelegte interne Untersuchung (Statistik) zum Einsatz und Nutzen des KOBV-Portals und seiner Komponenten eine gewisse Dynamik. Sie führte zu einer Revision der Konzeption des KOBV-Portals, die zum Zeitpunkt der Abfassung dieses Jahresberichtes in der KOBV-Zentrale in Angriff genommen wird.

Die technische Seite des gegenwärtigen KOBV-Portals stellte sich als ein vielfältiger, intern und mit den lokalen Portalen und Ressourcen vernetzter, über die KOBV-Zentrale und meh-

rere lokale Bibliotheken verteilter Komplex heraus. Dieser ist nicht einfach zu beherrschen und stellte die KOBV-Zentrale vor eine Reihe von neuartigen Herausforderungen bei der Auswahl und Filterung von digitalen lokalen Ressourcen, der Aktualisierung und Synchronisierung von Ressourcen und Links (URLs), der Verlinkung mit externen Diensten und Dokumenten (Stichwort: SFX) und des Zugriffs auf lokale Ressourcen. Zu weiten Teilen konnten diese durch Eigenentwicklungen gelöst werden.

### 3.2.2 Suchmaschinentechnologien und Math-Net

**Bearbeitet von:** Wolfgang Dalitz, Martin Grötschel, Wolfram Sperber, Uwe Pöhle

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

Die im letzten Berichtszeitraum begonnenen Untersuchungen verschiedener Suchmaschinen, deren Technologien sowie ihr Einsatz in verschiedenen Szenarien (unterschiedliche Dokumententypen, Rankingergebnisse) wurden weiter fortgeführt und an bestehenden Web Sites im praktischen Einsatz erprobt. Dabei galt es, mit vertretbarem Aufwand und beherrschbarer Technik Möglichkeiten aufzuzeigen, lokal und im Verbund Suchmaschinen zu betreiben. Die Randbedingungen nahmen hierbei Rücksicht auf die eingeschränkten finanziellen Ressourcen der beteiligten Partner, so dass nur Software aus dem so genannten Public Domain-Bereich untersucht wurde.

Suchmaschinen gibt es sowohl als Komplettsysteme, die die Komponenten Gatherer (auch Spider oder Crawler genannt), Indexierer und Ergebnisauswerter (Ranking-Strategie) beinhalten, wie auch als Summe der einzelnen (unabhängigen) Teilkomponenten, deren Zusammenwirken selbst angepasst und abgestimmt werden muss.

Wir haben uns bei der Untersuchung der Komplettsysteme auf die populären Suchmaschinen

- *Harvest* (Gatherer, Broker, Glimpse)
- *swish-e* (spider.pl, Indexierer)
- *nutch* (mit *Lucene* als Indexierer)

konzentriert. Bei den Teilsystemen verfolgen wir die Strategie, mit den Public Domain Tools *wget* und *w3mir* komplette Web Sites lokal zu speichern bzw. zu spiegeln und sie mit *Lucene* zu indexieren.

Zentrale Parameter bei der Auswertung sind: Vollständigkeit, Zuverlässigkeit, Flexibilität und Performance der Suchmaschinen. Das Ergebnis dieser Untersuchungen soll ein Konzept für den zukünftigen Einsatz von Community-basierten Suchmaschinen sein. In das Konzept sollen auch eigene Entwicklungen für das Ranking und die Klassifikation eingebunden werden.

Für den praktischen Test haben wir zwei unterschiedlich große Sites genommen, die am Institut selbst betreut werden, sodass auch der Zugriff auf das Filesystem gegeben ist, um die Ergebnisse ohne den Filter-Webserver verifizieren zu können.

- *www.mathematik-21.de* mit ca. 7.300 Dokumenten
- *www.zib.de* mit ca. 70.000 Dokumenten.

Beide Sites enthielten zwar mehrheitlich Dokumente im HTML-Format, doch wurden in unterschiedlichen Größenordnungen alle gängigen Formate gefunden und verarbeitet.

Die Ergebnisse waren insofern überraschend, als dass keines der untersuchten Werkzeuge alle Dokumente vollständig verarbeitet hat. Die Erklärung liegt vorwiegend in der Verwendung von nicht-korrektem HTML. Untersuchungen belegen, dass über 96% des HTML-Codes inkorrekt sind. Dadurch ist die HTML-Analyse unzureichend und die resultierende Linkliste zum Weiterverfolgen der Dokumente, je nach Toleranz der Crawler, unterschiedlich. Auch werden auf Filesystemebene symbolische Links benutzt, die in der Außensicht über den Web-Server nicht als solche in Erscheinung treten und die Ergebnisse verzerren.

Waren bei der kleineren Web Site die Ergebnisse noch vergleichbar, traten die Unterschiede in der Vollständigkeit bei der größeren Site auf. Hier konnten nur *Harvest* und *wget* vergleichbar gute Ergebnisse liefern. Alle anderen Crawler haben z. T. erhebliche Defizite.

Bei der Indexierung der Dokumente hat *Harvest* mit dem (Standard-)Indexierer *Glimpse* gegenüber früheren Versionen einen deutlichen Performancesprung gemacht. *Lucene* ist mittlerweile als ein etabliertes Werkzeug zur Indexierung von Textdokumenten anzusehen. Es ist besonders flexibel und kann den Index auch inkrementell aufbauen, was besonders erwähnenswert ist, denn den Großteil der Performance nimmt der Indexierer in Anspruch.

Die größten Herausforderungen liegen unserer Ansicht nach aber im Bereich der verwendeten Rankingalgorithmen und deren Strategien. Es scheint so, dass die Vollständigkeit und das Handling (auch größerer Sites) sekundär für die Qualität der Suchmaschine sind bzw. nur vom Einsatz der eingesetzten Ressourcen, wie Rechenleistung, abhängen. Das eigentlich Interessante beim Einsatz von Suchmaschinen ist der Aufbau für den Nutzer relevanter Reihenfolgen der Ergebnisse und deren Repräsentation. Nicht (mehr) die Vollständigkeit zeichnet eine gute Suchmaschine aus, sondern, dass relevante Ergebnisse weit oben in der Ergebnisliste angesiedelt sind. Hierbei lassen sich auch andere Formen der Präsentation denken, wie Clusterbildung (z. B. auch in Form der Math-Net-Seite).

Aufbauend auf diesen Untersuchungen wurde im Berichtszeitraum mit der Entwicklung einer eigenen Teilkomponente einer Suchmaschine begonnen. Wesentlicher Gedanke ist dabei der Einsatz einer Datenbank, die für jedes gefundene Dokument sowie die Dokumente, die von diesem Dokument aus mit Links erreichbar sind, eine so genannte MD5 speichert, also die Zuordnung einer eindeutigen 32-stelligen Zahl zu jedem relevanten Dokument. Damit ist gleichwohl die Verlinkungsstruktur von und zu einem Dokument abrufbar und es lassen sich damit wiederum bestimmte Parameter berechnen, die z. B. für das Ranking relevant sind (als ein Beispiel sei der PageRank eines Dokumentes genannt), oder auch ein Verweis auf eine Archivposition des Dokumentes. Ergänzt werden soll das mit einer an *Harvest* angelehnten Summarizer-Komponente, die jedem digital vorliegenden Dokument bestimmte Werte zuordnet. Damit ist gewährleistet, dass die unterschiedlichsten Dokumenttypen (eben auch Nicht-Text-Dokumente) absuchbar gemacht werden können.

Im Rahmen einer Diplomarbeit wurde mit der Untersuchung von Methoden zur automatischen Klassifizierung mathematischer Publikationen begonnen. Die automatische Klassifizierung von Dokumenten, etwa die Zuordnung der relevanten MSC-Klassen zu einem Preprint, ist für den Nutzer ein wichtiges Hilfsmittel bei der Suche nach den für ihn relevanten Informationen.

Um eine Arbeit einem Gebiet zuzuordnen, muss der Inhalt der Arbeit analysiert werden. Zusätzlich können Informationen über den Kontext des Dokuments, etwa über die Themengebiete einer Zeitschrift, in welcher der Artikel erschienen ist, oder über die Literaturverweise, die sich

in einer Arbeit finden, benutzt werden. Die automatische Klassifizierung des Inhalts eines Artikels wird allgemein mit dem Oberbegriff „Textkategorisierung“ bezeichnet. Die automatische Klassifizierung ist eine Methode des „Machine Learning“. Die Klassifikationsverfahren werden anhand bereits klassifizierter Dokumente trainiert und anschließend zur Klassifikation weiterer Dokumente verwendet. Bei der Textkategorisierung werden drei Teilaufgaben unterschieden:

- **Indexierung**  
Darunter wird im Wesentlichen die Aufbereitung der Dokumente verstanden, d. h. die Erzeugung gewichteter Wortlisten aus den Dokumenten. Den Dokumenten werden auf diese Weise Vektoren zugeordnet, deren Komponenten die Häufigkeit der Terme sind. Üblicherweise gehören zur Aufbereitung der Dokumente auch die Elimination von Wörtern, die nur in geringem Maße zur Klassifikation beitragen (Stopwörter) sowie die Reduktion der Wörter auf ihre Wortstämme.
- **Klassifikation**  
Für die automatische Klassifikation sind eine Reihe unterschiedlicher Methoden und Verfahren bekannt. Dazu zählen die k-Nearest Neighbor-Methode, die mit der Cosinus-Ähnlichkeit arbeitet, das „Naive Bayes“-Verfahren, bei welchem die Klassifikation eines Dokuments mittels bedingter Wahrscheinlichkeiten berechnet wird, oder die „SVM“-Methode (Support Vector Machines), die die Zugehörigkeit zu einer Klasse mittels Hyperflächen misst.
- **Evaluation**  
Für die Bewertung der Ergebnisse der automatischen Klassifizierung werden im Allgemeinen Methoden des Information Retrieval benutzt, die ihrerseits wieder auf Bewertungsverfahren statistischer Verfahren zurückgehen.

Im vergangenen Jahr wurden verschiedene Techniken für die Textkategorisierung kleinerer Testmengen eingesetzt. Die Anwendung vorhandener Standardsoftware hat nicht zu befriedigenden Ergebnissen geführt, vielmehr müssen die Methoden für den Themenbereich und die Struktur des Klassifikationsschemas angepasst werden. Hierfür wurden entsprechende Ansätze entwickelt, die auch den Kontext in das Klassifizierungsverfahren einbeziehen. Diese Ansätze werden im Rahmen einer Diplomarbeit weiter untersucht.

Neben den zentralen Arbeiten zu Suchmaschinen und zur automatischen Klassifizierung wurde das Update der Math-Net-Links weiter in Angriff genommen. Die Math-Net-Links waren einer der ersten Math-Net-Dienste und bieten mehr als 3.000 Links auf mathematik-relevante Quellen im Netz. Im Berichtszeitraum ist eine MySQL-Datenbank dazu entworfen und aufgebaut worden.

Die Fachgruppe Information und Kommunikation der DMV und ÖMG veranstaltete auf der DMV-Jahrestagung im letzten Jahr in Klagenfurt wieder ein Minisymposium. Der Schwerpunkt des Minisymposiums lag auf den Anwendungen der Mathematik im Web. Insbesondere Themen der Digitalen Bibliothek, Suchmaschinentechologien und Expertendatenbanken wurden hier vorgestellt und diskutiert.

Im Rahmen der IuK-Initiative wissenschaftlicher Fachgesellschaften wurden die Arbeiten des ZIB im Bereich des Math-Net und des Math&Industry-Projekts vorgestellt. Das übergreifende Thema war hier: „Herausforderungen an das Publizieren und die Informationsversorgung in den Wissenschaften“.

### 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

**Förderung:** Bundesministerium für Bildung und Forschung

„Math&Industry“ ist das Informationsportal<sup>6</sup> des BMBF-Mathematikprogramms. Im Rahmen des BMBF-Mathematikprogramms, das gegenwärtig seine vierte Förderperiode erlebt, wurden bislang mehr als 200 Projekte unterstützt. Das Informationsportal will die Problemstellungen, die Ansätze und die Ergebnisse der Projekte im Detail vorstellen. Zentrale Dienste sollen die Informationen nutzerfreundlich zugänglich machen.

Es wurde mit der Software WebSiteMaker<sup>7</sup> ein Content-Management-System entwickelt, das ein einfaches Generieren einer kompletten Web-Präsentation gestattet. Der WebSiteMaker wurde im vergangenen Jahr komplett überarbeitet:

- **Verbesserte Präsentation fachspezifischer Klassifikationen**  
Klassifikationssysteme sind ein wichtiges Werkzeug, um den Nutzern die Einordnung von Informationen und den Zugang zu vereinfachen. Die Informationen der Projekte sollen daher möglichst umfassend klassifiziert werden. Für die fachspezifische Klassifizierung der Informationen sind unterschiedliche Schemata wichtig, etwa die „Mathematical Subject Classification“ (MSC) für die Klassifizierung mathematischer Publikationen oder Arbeitsgebiete, das „Computing Classification System“ der ACM für den Bereich Informatik, das „Physics and Astronomy Classification Scheme“ (PACS) für den Bereich Physik, der „Guide to Available Mathematical Software“ (GAMS) für mathematische Software oder das „Subject Classification Scheme“ des Zentralblatts für Didaktik der Mathematik (ZDM). Die aufgeführten Klassifikationssysteme sind hierarchischer Natur, die Klassen sind durch einen formalen Klassifikator (Identifier) gekennzeichnet, dem ein Label entspricht. Die Autoren verwenden im Allgemeinen die formalen Klassifikationen bei der Eingabe. In Math&Industry wird die Gültigkeit der verwendeten Klassifikationen überprüft. Auf den Webseiten werden die Labels der Klassifikationen und der vollständige Pfad im Klassifikationssystem angezeigt. Dieses verbessert auch erheblich die Erschließung der Informationen durch Suchmaschinen.
- **Überarbeitung des Konzepts für die Web-Präsentation von Software**  
Software gehört inzwischen zu den wichtigsten Produkten mathematischer Forschung. Eine wichtige Information für potentielle Nutzer sind die Nutzungsrechte für die in den Projekten entwickelte Software. Dazu wurden die sehr unterschiedlichen Lizenzbedingungen für die Nutzung von Software systematisiert. Für die Lizenzbedingungen wurde ein RDF-Schema<sup>8</sup> entwickelt und in das Modell für die Beschreibung von Software einbezogen. In die geplante Softwaredatenbank soll eine Suche nach Software zu unterschiedlichen Lizenzbedingungen integriert werden.

---

<sup>6</sup><http://www.mathematik-21.de/>

<sup>7</sup>[http://www.math-net.org/create\\_website](http://www.math-net.org/create_website)

<sup>8</sup><http://www.iwi-iuk.org/material/RDF/Schema/Class/swt.html>

- Neugestaltung der Benutzeroberfläche und der Web-Seiten  
Der WebSiteMaker und die durch ihn erstellten Web-Seiten wurden nach Usability-Gesichtspunkten überarbeitet. Das Layout der Web-Seite eines Projektes ist jetzt in einfacher Weise konfigurierbar.
- Sonstige Erweiterungen  
Weitere Features zur Verbesserung der Web-Präsentationen der Projekte, so etwa die automatische Hervorhebung und das Verlinken der Glossareinträge mit den Begriffen auf den anderen Web-Seiten der Präsentation eines Projektes befinden sich in Vorbereitung.

Mittels des WebSiteMakers wurden im letzten Jahr die Projektpräsentationen für die Projekte der ersten beiden Förderperioden erstellt. Die Web-Seiten der Projekte wurden – mit freundlicher Genehmigung des Springer Verlags – aus den beiden Büchern über die erste und zweite Förderperiode generiert. Diese stehen als PDF- bzw. djvu-formatierte Dateien zur Verfügung. Die Experimente, die Web-Seiten nach MathML zu konvertieren und damit eine adäquate Präsentation für das Web zu erzeugen, führten zu keinen befriedigenden Ergebnissen. Sowohl die Konvertierung als auch die Präsentation der Ergebnisse im Browser waren teilweise noch unzulänglich.

Ein wichtiger Service für Anwender ist eine Expertendatenbank. Die Expertendatenbank soll insbesondere Anwendern aus der Industrie und dem Dienstleistungsbereich die Möglichkeit bieten, gezielt nach Experten in bestimmten Anwendungsbereichen zu suchen.

Die Expertendatenbank speist sich aus den Einträgen der Expertisegebiete, die die Mitarbeiter der Projekte auf den Homepages der Web-Seiten der Projekte angegeben haben. Zum anderen haben auch Mathematiker, die nicht an Projekten des BMBF-Mathematikprogramms arbeiten, die Möglichkeit, sich in die Expertendatenbank einzutragen.

Dazu ist es erforderlich, die Anwendungsgebiete in geeigneter Weise zu strukturieren. Natürlich ist die Klassifizierung eines solch komplexen Themengebiets wie Industrie und Dienstleistungen eine diffizile Angelegenheit und die Klassifizierung auch eine Frage des persönlichen Geschmacks. Das kommt u. a. auch dadurch zum Ausdruck, dass kein etabliertes Klassifikationsschema für den Bereich Industrie und Dienstleistungen existiert. Das Klassifizierungsschema muss dabei sowohl intuitiv in der Erstellung der Expertiseeinträge sein als auch den Anwendern, die aus der Industrie und dem Dienstleistungsbereich kommen, einen intuitiven Zugang zu den Informationen bieten.

Für die Expertendatenbank in Math&Industry wurden zwei alternative Prototypen entwickelt und implementiert:

- ein hierarchisches Klassifikationsschema, das Industrie und Dienstleistungen in ein dreistufiges Schema strukturiert. Die Experten können ihre Expertisegebiete direkt auswählen. Zusätzlich ist es möglich, die Expertisegebiete näher zu beschreiben.
- ein einstufiges Klassifikationsschema, das sich auf wenige Kategorien in der Top-Ebene beschränkt. Die eigentlichen Expertisegebiete werden bei der Erstellung der Seiten benannt und den zugehörigen Kategorien der Top-Ebene zugeordnet.

Technisches Rückgrat dieses Dienstes ist eine Datenbank. Aus dem Formular werden auch die Homepages und die zugehörigen RDF-Dateien (die RDF-Daten werden für die automatische Verarbeitung der Web-Seiten in den zentralen Diensten und das Editieren der Daten verwendet).

Weitere Dienste sind in Vorbereitung, etwa die Softwaredatenbank, die analog zur Expertendatenbank sowohl die in den Projekten erstellte Software umfassen soll, als auch in der Lage sein soll, mathematische Software von Projekten außerhalb des BMBF-Mathematikprogramms einzubinden.

### Publikationen

- [1] W. Sperber, *Suchmaschinen, Strukturierung und Metadaten*, Proceedings: 11. IuK-Tagung „In die Zukunft publizieren“, 2005, Bonn

### 3.2.4 Informationstechnische Werkzeuge für Museen

**Bearbeitet von:** Carlos Saro, Regine 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 der CIDOC (International Committee for Documentation of the International Council of Museums), hat sich das ZIB im Bereich der Museumsdokumentation als feste Größe etabliert. Die von der genannten Fachgruppe Dokumentation jährlich durchgeführte Herbsttagung zur Museumsdokumentation findet seit über zwölf Jahren traditionell am ZIB statt.

Die im Rahmen der genannten Fachgruppe Dokumentation gegründete Arbeitsgruppe „Datenaustausch“ wird von Mitarbeitern des ZIB koordiniert. Die Arbeitsgruppe beschäftigt sich mit den Grundlagen der Strukturierung der zur Inventarisierung von Museumsobjekten benötigten Daten. Ein Ziel ist die Überprüfung der Praxistauglichkeit des von der CIDOC entwickelten objektorientierten „Conceptual Reference Model“ (CRM), welches sich zur Zeit im Prozess der Normierung durch die ISO befindet (<http://cidoc.ics.forth.gr>). 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.

Im Jahre 2005 wurde anlässlich einiger Tagungen zum Einsatz von kontrolliertem Vokabular in der Museumsdokumentation vom ZIB die Entwicklung eines WEB-Services zur Vereinfachung des Software-unabhängigen Einsatzes von Thesauri, Systematiken u. ä. vorgeschlagen. Von den Mitarbeitern des ZIB wurde ein auf offenen Standards basierender Prototyp vorgestellt (SKOS – Simple Knowledge Organisation System zur Datenstrukturierung, SOAP als Kommunikationsprotokoll, XML als allgemeines Datenaustauschformat), mit welchem der Zugriff auf unterschiedliche Server (ein GOS-Server am ZIB sowie ein MySQL-Server des digiCult-Projekts in Schleswig-Holstein) demonstriert werden konnte. Eine Zusammenarbeit mit anderen Software-Herstellern wird angestrebt.

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 mehrfach verlängerter 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 damit ihren Personalaufwand 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.

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 (<http://www.dhm.de/datenbank>). Sie bildet damit weiterhin das umfangreichste Angebot dieser Art in Deutschland. Ähnliche Anwendungen wurden auch für das Deutsche Hygiene-Museum in Dresden (<http://www.dhmd.de>), das Institut für Museumskunde (<http://www.smb.spk-berlin.de/ifm>) sowie das Stadtgeschichtliche Museum Leipzig (<http://www.stadtgeschichtliches-museum-leipzig.de/sammlungen/objektdatenbank.htm>) 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.

### 3.2.5 Computeralgebra (REDUCE)

#### Weiterentwicklung von REDUCE

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

**Kooperationspartner:** Anthony C. Hearn, (Leitung des Projekts), RAND, Santa Monica, USA; Wolfram Koepf, Universität Kassel; James H. Davenport, John P. Fitch, University of Bath, England; Arthur C. Norman, Cambridge, England; Eberhard Schrüfer, Fritz Schwarz, Fraunhofer-Institut Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen (SCAI), Bonn; Andreas Dolzmann, Thomas Sturm, Andreas Seidl, Universität Passau; Francis Wright, Queen Mary College, London, England; Thomas Wolf, Brock University, St. Catharines, 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 (z. B. im April 2005 in Passau) 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 weiterhin verbessert und noch vorhandene Fehler wurden beseitigt. Die Software wurde im ersten Quartal 2004 freigegeben und ab dem dritten Quartal 2004 vom ZIB vertrieben.

Eine wesentliche Neuerung ist die REDUCE-Version für AMD64 bzw. EM64T PC-Prozessoren, die es erlaubt, den gesamten Speicher moderner Rechner zu verwenden. Des Weiteren wurde eine Version für Apple MacOS-X in 32- oder 64-bit-Modus erstellt. Einen natürlichen Anschluss wird dies mit einer Version für auf Intel-Prozessoren basierende Apple-Systeme finden.

Im Rahmen einer Diplomarbeit wird mit Mitteln der Computeralgebra und mit Techniken, die im Math-Net-Projekt Verwendung finden, an einer Klassifizierung von Differentialgleichungen gearbeitet. Wie schon in der vorhergehenden Diplomarbeit (Dima Suliman) liegen die Differentialgleichungen in MathML-Form vor. Zur Klassifizierung wird die Liste von Kamke benutzt.

Im Berichtszeitraum konnte Herbert Melenk weiterhin erfolgreich in die Arbeit integriert werden. Es ist ihm gelungen, einige tiefliegende Probleme in der aktuellen REDUCE-Version zu beheben. 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 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. Auf der Konferenz ISSAC 2005 in Peking wurde diese Software präsentiert. Anschließend konnte die Zusammenarbeit mit Thomas Wolf anlässlich seines halbjährigen Forschungsaufenthalts am ZIB weiterhin intensiviert werden.

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>.

In Zusammenarbeit mit Fritz Schwarz vom Fraunhofer-Institut Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen 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.

Aus dem Verkauf von REDUCE wurden im Berichtsjahr Umsätze von ca. 11.400 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. Die im Berichtszeitraum fertiggestellte Version für Prozessoren, die dem neuen 64-bit-Standard entsprechen, hat ebenfalls die Nachfrage belebt.

### **Publikationen**

- [1] A. C. Hearn, *REDUCE User's and Contributed Packages Manual, Version 3.8*, Santa Monica, 2004.



## 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 9310 ACS angeboten.

#### 4.1.1 Hochleistungsrechner Nord (HLRN)

Gemäß dem Verwaltungsabkommen 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 eine Spitzenleistung von über 5,3 TFlop/s.

Die folgenden Angaben beziehen sich auf das Berliner Landeshochleistungsrechnersystem (Abbildung 4.2):

- Compute-Server: 16 IBM pSeries 690 (Regatta-H) mit je 32 Prozessoren Power4 (Takt-rate 1,3 GHz), davon 14 Systeme mit je 64 GByte, 1 System mit 128 GByte und 1 System mit 256 GByte Hauptspeicher. Diese Systeme sind nicht mehr in Partitionen aufgeteilt.
- Internes Verbindungsnetzwerk: High Performance Switch (HPS) (Federation Switch) bestehend aus 2 unabhängigen Netzwerkebenen mit folgenden Leistungsmerkmalen: Maximale Anwendungsbandbreite zwischen 2 Knoten: ca. 1.000 MByte/s, Latenzzeit für den Transfer zwischen 2 Knoten:  $< 5 \mu\text{s}$ .
- Periphere Server: 11 IBM pSeries 655 mit je 4 Prozessoren Power4 (Taktrate 1,3 GHz, 86 GByte Hauptspeicher) für den Zugang zum parallelen Dateisystem, zu den Magnetbandsystemen sowie für externe Datenzugriffe.
- Periphere Server: 1 IBM pSeries 655 mit 8 Prozessoren Power4 (Taktrate 1,7 GHz, 16 GByte Hauptspeicher) für die Jobvor- und -nachbereitung („Login Node“).
- 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.

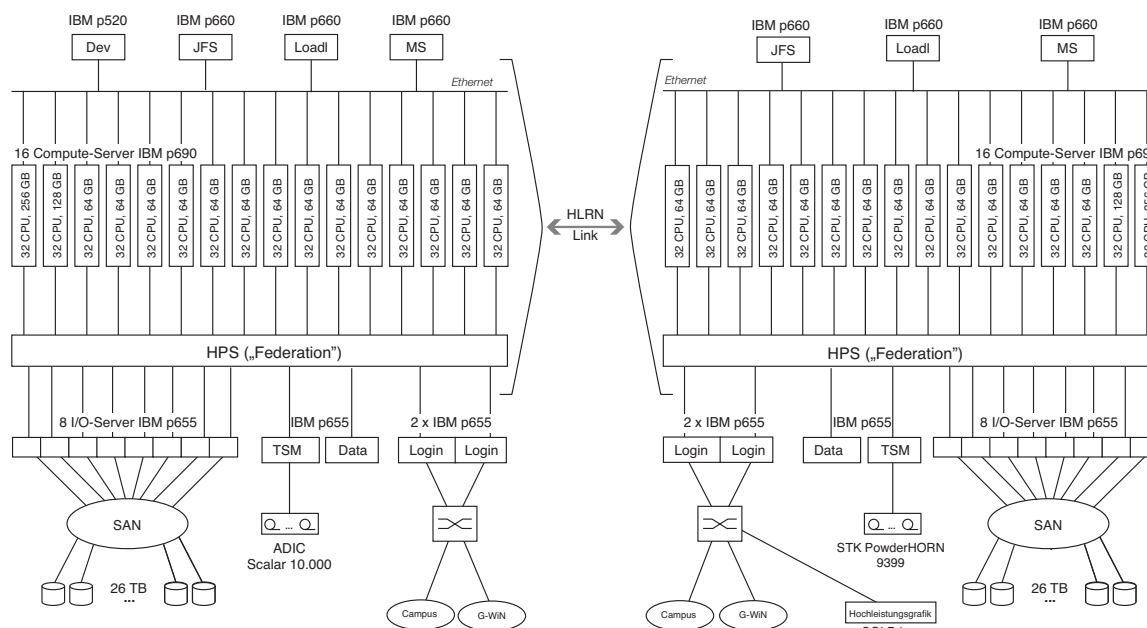


ABBILDUNG 4.1: Gesamtkomplex HLRN-System

- Magnetbandarchivsystem: StorageTek (STK) 9310 ACS mit 15 Magnetbandgeräten vom Typ 9940 B mit einer Datenübertragungsrate von je 30 MByte/s und einer Kapazität von 12.000 Stellplätzen für Magnetbandkassetten; derzeit sind für das HLRN-System neun Magnetbandgeräte mit 1230 Magnetbändern mit je 200 GByte Kapazität (d. h. insgesamt ca. 250 TByte) reserviert.

Als Verbindung der beiden ca. 300 km voneinander entfernten Teilkomplexe diente bis Ende 2005 ein angemieteter dedizierter transparenter WDM<sup>1</sup>-Kanal des Gigabit-Wissenschaftsnetzes mit einer möglichen Bandbreite von 2,4 Gbit/s, genutzt mit Gigabit-Ethernet-Technik mit einer Bandbreite von 1 Gbit/s bei einer Latenzzeit von ca. 4,5 ms (Round-Trip). 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.

Im Dezember 2005 wurden Tests mit einem neuen, ebenfalls vom DFN-Verein angemieteten WDM-Kanal des neuen XWiN-Wissenschaftsnetzes in Gigabit-Ethernet-Technik begonnen, diese Verbindung ersetzte ab 1. Januar 2006 die bisherige Technik. Ein Vorteil der neuen Verbindung ist, dass bei Unterbrechungen der Strecke automatisch innerhalb von Millisekunden auf eine permanent bereit gestellte Ersatzstrecke mit gleicher Bandbreite, allerdings höherer Latenzzeit umgeschaltet wird. Die Umschaltung erfolgt ausschließlich über optische Technik, die Anwendungen auf dem Link werden in einer solchen Situation nicht unterbrochen.

Die Benutzer erreichen das HLRN-System über die ausgezeichneten Einwählknoten („Login Nodes“) *berni.hlrn.de* und *hanni.hlrn.de*, welche über Gigabit-Ethernet-Verbindungen mit den

<sup>1</sup>Wavelength-Division-Multiplexing, Wellenlängen-Multiplexing



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

lokalen Netzen von ZIB bzw. RRZN und damit über das G-WiN verbunden sind. Üblicherweise arbeiten die Benutzer interaktiv auf einem dieser Einwählknoten und senden Batch-Jobs mit Angabe der maximalen Rechenzeit und der gewünschten Anzahl 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 steht 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.

Schwerpunkt der Tätigkeit im Berichtszeitraum war die Bereitstellung eines stabilen Betriebes, nachdem in den Vorjahren alle wesentlichen technischen Aufrüstungen durchgeführt wurden. Der Erfolg all dieser Maßnahmen wird unter anderem in der abgegebenen Kapazität an die vom Wissenschaftlichen Ausschuss begutachteten Großprojekte deutlich: Im Jahr 2005 konnten mit 230.000 NPL<sup>2</sup> ca. 40 % mehr Rechenkapazität als im Vorjahr mit ca. 164.000 NPL an die Großprojekte abgegeben werden.

Bei 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/>).

Während des Berichtszeitraums haben Mitarbeiter des ZIB sowohl in Berlin als auch in Bremen gut besuchte Ausbildungskurse „Parallele Programmierung mit MPI und OpenMP“ durchgeführt.

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.

Im Berichtsjahr konnte ein 160-seitiger mit vielen Farbdarstellungen versehener Report *Wissenschaftliche Projekte auf dem HLRN-System 2003–2005*<sup>3</sup> mit Beiträgen der Großprojekte erstellt werden. Im Vorwort zu diesem Report schreibt der Vorsitzende des Verwaltungsrates des HLRN: „Der HLRN ist mit der Erwartung gegründet worden, dass die Bereitstellung von Hochleistungsrechenkapazität zu einer Förderung insbesondere der Spitzenforschung im norddeutschen Raum führt. Die in diesem Projektbericht dargestellten wissenschaftlichen Ergebnisse übertreffen diese Erwartungen bei weitem. Die Ergebnisse und die starke Auslastung der beiden gekoppelten Rechner an den Standorten Berlin und Hannover zeigen, dass ein großer Bedarf besteht und das Angebot des HLRN sehr gefragt ist. Der Verwaltungsrat beglückwünscht an dieser Stelle alle beteiligten Wissenschaftler zu den erzielten Ergebnissen und dankt für deren Dokumentation in diesem Bericht.“

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-II soll wieder über diese beiden Standorte verteilt betrieben werden, der HLRN-Link soll dann mit erhöhter Bandbreite (10 Gbit/s) bei gleich guter Latenzzeit zur Verfügung stehen.

<sup>2</sup>NPL – Norddeutsche Parallelrechner-Leistungseinheit = 32 Prozessoren je Stunde Kalenderzeit.

<sup>3</sup><http://www.hlrn.de/pr/veroeffentlichungen/HLRN-Report-2005.pdf>



### 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

### Nachfolgebeschaffung HLRN-II

Supercomputer der höchsten Leistungsklasse gelten bereits nach wenigen Jahren Betriebszeit als veraltet und können sowohl aus Leistungs- als auch Kapazitätsgünden nicht mehr im ursprünglich vorgesehenen Sinne für die anspruchsvollen wissenschaftlichen Anwendungen eingesetzt werden. Der HLRN-Verbund hat sich daher entschieden, den vorhandenen HLRN-Rechner Anfang 2007 nach dann fünfjähriger Betriebszeit durch ein neues, leistungsfähigeres System (HLRN-II) zu ersetzen. Die Zielvorstellung ist ein System mit einer etwa zehnfach höheren Rechenleistung und Hauptspeicherkapazität. Das bewährte Konzept der symmetrisch ausgestatteten Standorte am ZIB/Berlin und RRZN/Hannover soll beibehalten werden.

Die entsprechenden Anträge zur Beschaffung des Nachfolgerechners wurden im Berichtsjahr vorbereitet und mittlerweile vom Wissenschaftsrat und der Deutschen Forschungsgemeinschaft positiv begutachtet. Die europaweite Ausschreibung und die Vergabe sind für das Jahr 2006 geplant.

#### 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 Volkard Linke (FU Berlin) erstmalig im Februar 2003 über die Vergabe von Kontingenten an Großprojekte entschieden und tagt seitdem quartalsweise.

### Großprojekte

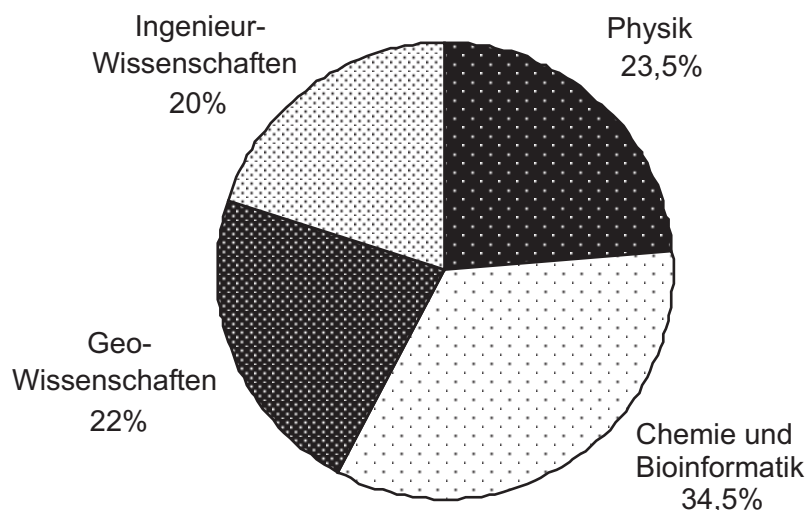


ABBILDUNG 4.3: Kontingenzuteilung des HLRN-Systems im Jahr 2005 nach Fachgebieten

Das HLRN-System wurde im Berichtszeitraum von 64 Großprojekten aus den Fachgebieten Ingenieurwissenschaften, Physik, Chemie sowie Geowissenschaften (insbesondere Meeres- und Umweltforschung) genutzt. Die anteiligen Kontingente sind 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 zehn größten Projekten wurden auf dem HLRN-Rechner in den Quartalen 1/2005 bis 4/2005 insgesamt ca. 120.000 NPL<sup>4</sup> bewilligt; das sind ca. 45% der gesamten im betreffenden Zeitraum vom Wissenschaftlichen Ausschuss bewilligten Rechenkapazität:

- Chemie: *Theoretische Untersuchungen zur Struktur, Energetik und Dynamik heterogener Katalyseprozesse an Zeolithsystemen*, HU Berlin, 22.582 NPL.
- Geowissenschaften: *Simulation of Past, Present, and Future Climates*, Universität Kiel, 17.600 NPL.
- Physik: *Testing scaling and chiral properties of improved formulations of lattice QCD*, FU Berlin, 13.000 NPL.
- Chemie: *Periodic density functional calculations of structure, dynamic and reactivity of transition metal oxides*, HU Berlin, 12.500 NPL.
- Ingenieurwissenschaften: *Numerische Simulation der Umströmung eines Zylinderstumpfes*, TU Berlin, 9.908 NPL.

<sup>4</sup>NPL - Norddeutsche Parallelrechner Leistungseinheit = 32 Prozessoren je Stunde Kalenderzeit.

- Geowissenschaften: *Auswertung von Spurengasmessungen des Satelliteninstrumentes SCIAMACHY*, Universität Bremen, 9.675 NPL.
- Geowissenschaften: *Untersuchung physikalischer Mechanismen zur Zellenverbreiterung und Organisation von Konvektion bei Kaltluftausbrüchen mittels hochauflösender Grobstruktursimulation*, Universität Hannover, 9.600 NPL.
- Ingenieurwissenschaften: *Strömungssimulation um ein generisches Kraftfahrzeugmodell mit aktiver Beeinflussung des Ablösegebietes*, TU Berlin, 9.500 NPL.
- Chemie: *Geometric, electronic and vibrational structure of vanadia supported catalysts*, HU Berlin, 9.000 NPL.
- Chemie: *Globale Geometrieoptimierung atomarer und molekularer Cluster*, Universität Kiel, 7.780 NPL.

Im folgenden werden die oben aufgeführten Großprojekte vorgestellt. Die Kurzbeschreibungen sind von den jeweiligen Projektarbeitern bei Antragstellung verfasst worden.

### **Theoretische Untersuchungen zur Struktur, Energetik und Dynamik heterogener Katalyseprozesse an Zeolithsystemen**

**Verantwortliche Wissenschaftler:** J. Sauer, C. Tuma, HU 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.

Ein aktuelles Projektbeispiel ist die Untersuchung der Protonierungsreaktion von Isobuten im Zeolith-Ferrierit (s. Abbildung 4.4). Bei dieser Elementarreaktion steht die Frage, welches der denkbaren Produkte gebildet wird – ein Oberflächenalkoxid (*tert*-Butoxid, Isobutoxid) oder das *tert*-Butylcarbeniumion?

### **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 is 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 is 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 (s. Abbildung 4.5).

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.

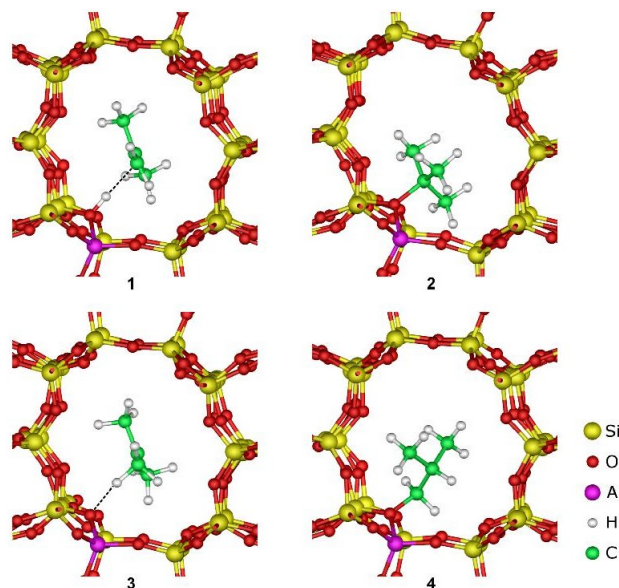


ABBILDUNG 4.4: Berechnete Strukturen für den  $\pi$ -Komplex von Isobuten (**1**), das *tert*-Butoxid (**2**), das *tert*-Butylcarbeniumion (**3**) und das Isobutoxid (**4**) in einer Pore des Zeoliths Ferrierit.

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.

### Testing scaling and chiral properties of improved formulations of lattice QCD

**Verantwortlicher Wissenschaftler:** Volkard Linke, FU 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 Wilson formulation, which is 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 than in the standard version when the continuum

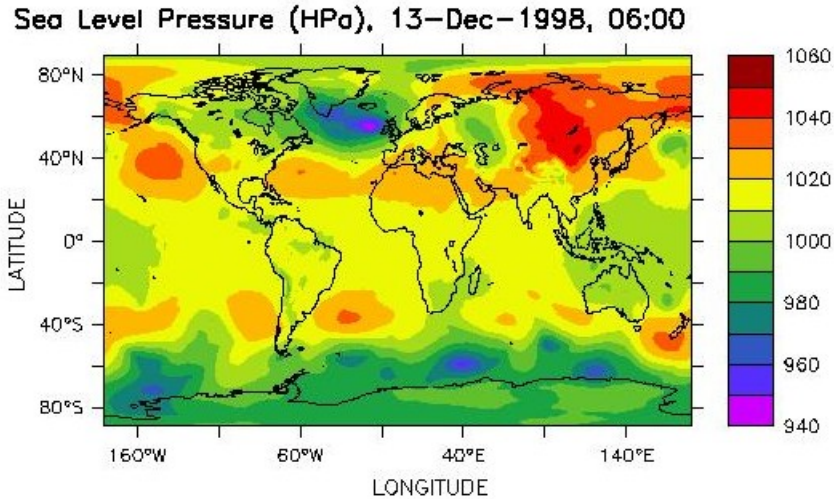


ABBILDUNG 4.5: Sea level pressure anomalies for a day in boreal winter 1998, with a strong low pressure system developing in the Atlantic.

limit is approached. i.e. when the lattice spacing  $a \rightarrow 0$ . In addition, it regulates the eigenvalue spectrum of the used lattice Dirac operator and thus allows for simulation even at – in principle – the physical value of the pion mass of 140 MeV.

The aim of the project was to carefully investigate twisted-mass lattice QCD. First detailed studies within the *quenched approximation* have yielded very promising results. The  $O(a)$  improvement could be verified and pion masses of 250 MeV could be reached, something that was thought to be essentially impossible with the standard formulation. Furthermore, a comparison to another proposed improvement of lattice QCD (*overlap fermions*) shows a reduction in computational costs by a factor up to 70 in favour of twisted-mass fermions.

The results of these studies in the *quenched approximation* provided therefore a sound basis for starting to tackle the much more challenging problem of treating the complete version of lattice QCD. Simulations of twisted-mass lattice QCD made it possible to clarify and understand the phase structure of twisted-mass and Wilson lattice QCD: an unexpectedly complex first order phase transition was found at vanishing quark mass, a result, which could be understood from complementing calculations in chiral perturbation theory. The phase structure turns out to be similar to what is expected for continuum QCD, but distorted by lattice artifacts. A study of the dependence of this phenomenon on the lattice spacing revealed that – in agreement with chiral perturbation theory – the continuum picture is approached as the lattice spacing goes to zero. Through our detailed study of the lattice QCD phase diagram we were able to determine those values of the lattice spacing where the effect of the phase transition can be neglected and one can start a scaling test of mesonic quantities – a work that is currently in progress.

The aforementioned results have been presented on the international symposia LATTICE 2004 and 2005 and on several other conferences and meetings and attracted a lot of attention.

## Periodic density functional calculations of structure, dynamic and reactivity of transition metal oxides

**Verantwortliche Wissenschaftler:** M. V. Ganduglia-Pirovano, V. Brázdrová, HU Berlin

Vanadium oxides supported on another oxide (e.g.  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{ZrO}_2$ , and  $\text{SiO}_2$ ) are important industrial catalysts, used in selective oxidation and reduction processes. The type of support can affect the catalytic activity by several orders of magnitude. However, the nature of the vanadia-support interaction is not well understood on an atomic scale, hindering the understanding of basic issues such as the nature of the active centers. This is due to the complexity of the vanadium oxide based catalytic surfaces. Therefore, both theoretical and experimental studies on well defined model catalysts are necessary for analyzing the support effect on the stability, reducibility, and reactivity of the active phase.

The goal of this project 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 vanadia reduction in these systems is investigated. By combining DFT with statistical thermodynamics the stability of these systems in contact with a realistic environment (e.g. varying temperature and pressure) is addressed.

Density functional theory with the gradient corrected functional of Perdew and Wang is used. The systems are modelled with periodic boundary conditions and with plane wave basis sets, as implemented in the VASP code. This methodology is the state-of-the-art in modelling complex systems in heterogeneous catalysis. The core electrons are approximated by the projector augmented-wave method.

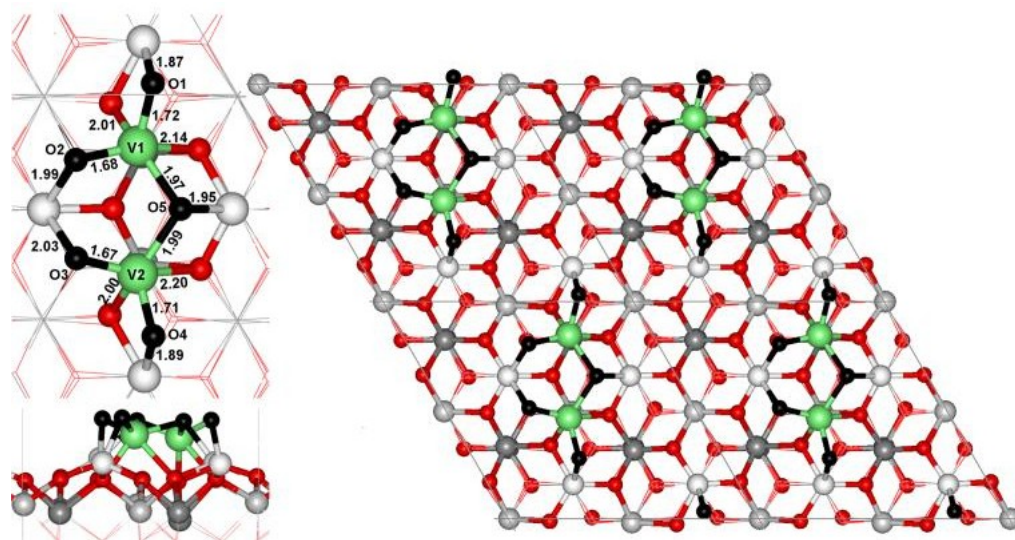


ABBILDUNG 4.6: The most stable supported  $\text{V}_2\text{O}_5$  cluster on  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3(0001)$ . The Al atoms from the topmost substrate layers are depicted in white, light and dark gray. O atoms from the substrate are red, from the cluster black. V atoms are green (Webversion is coloured).

In previous project periods calculations on bulk and single crystal surfaces of vanadium and

aluminium oxides, as well as on thin vanadia films on  $\alpha$ -alumina and on bulk  $\text{AlVO}_4$  were done. In the last period models for  $\alpha$ -alumina supported vanadia clusters were built and investigated. A  $(2 \times 2)$  surface unit cell of  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  ( $9.608 \text{ \AA} \times 9.608 \text{ \AA}$ ) with a vacuum region of  $11 \text{ \AA}$  ( $c = 23 \text{ \AA}$ ) is used as a model of the support. Two  $\text{V}_2\text{O}_5$  clusters stable in the gas phase, a linear and a cyclic one, were considered. The stable conformations of the supported clusters were found by a systematic search of about 30 different starting configurations, as well as by several simulated annealing runs. The size of the systems (s. Abbildung 4.6) and the number of starting structures investigated definitely requires a parallel supercomputer.

### Numerische Simulation der Umströmung eines Zylinderstumpfes

**Verantwortliche Wissenschaftler:** F. Thiele, O. Frederich, Hermann-Föttinger-Institut für Strömungsmechanik, TU Berlin

Als Referenzfall und Leitexperiment einer komplexen dreidimensionalen und instationären Strömung wird das zeitlich-räumliche Strömungsfeld der Umströmung eines Zylinderstumpfes mit Endplatte mittels hochauflösender Verfahren numerisch simuliert. Die Simulationen liefern sämtliche Strömungsgrößen im gesamten Gebiet mit einer hohen zeitlichen und insbesondere räumlichen Auflösung. Die Ergebnisse der Simulationen (s. Abbildung 4.7) dienen als Datenbasis und Validierungsgrundlage für die experimentellen und „bildgebenden“ Messverfahren im DFG-Schwerpunktprogramm „Bildgebende Messverfahren für die Strömungsanalyse“. Mit dem Programm soll die Strömungsmesstechnik vorangetrieben und auf ein höheres Leistungsniveau gebracht werden, wobei bildgebende Messverfahren zur Gewinnung flächenhafter bzw. räumlicher Informationen in stationären und instationären Strömungen im Vordergrund stehen.

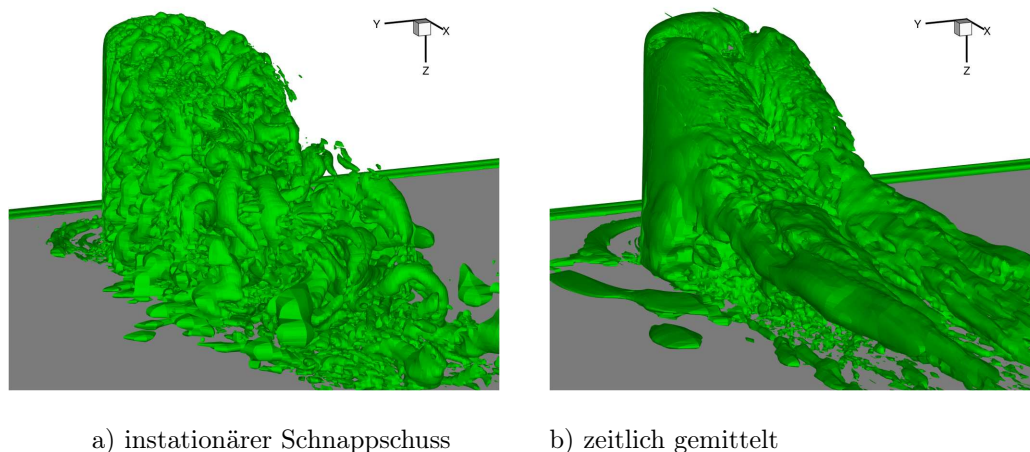


ABBILDUNG 4.7: Visualisierung von Wirbelstrukturen ( $\lambda_2$ -Isoflächen)

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.

### **Auswertung von Spurengasmessungen des Satelliteninstrumentes SCIAMACHY**

**Verantwortlicher Wissenschaftler:** M. Vountas, Institut für Umweltphysik, Universität Bremen

Hintergrund für dieses Projekt sind die Messungen des SCIAMACHY-Instrumentes (Scanning Imaging Absorption spectroMeter for Atmospheric CHartographY<sup>5</sup>), welches weltweit erstmals weltraumgestützt die Erdatmosphäre abwechselnd in Limb- und in Nadir-Geometrie abtastet<sup>6</sup>. Diese technische Besonderheit wurde mit dem Ziel implementiert, die Höhengauflösung 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 liefern einen entscheidenden Beitrag zum Umweltmonitoring und sind in dieser Güte bisher nicht systematisch erstellt worden.

Die Validationsphase hat signifikant von den Resultaten dieses HLRN-Projektes profitiert. Auch in diesem Berichtszeitraum wird für ausgesuchte atmosphärische Parameter eine Abdeckung angestrebt, die sowohl räumlich wie auch zeitlich so lückenlos wie möglich sein soll. Dieses Ziel könnte im nächsten Projektzeitraum erstmals erreicht werden.

Die bereitgestellte Rechenleistung dient sowohl der Validation der operationellen Level 2-Produkte als auch der langfristigen Erstellung von globalen Spurengaskarten und Profilen und soll 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. Die Qualität der offiziellen Level 2 Produkte scheint hingegen noch problematisch zu sein.

### **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

---

<sup>5</sup><http://www.sciamachy.de>

<sup>6</sup> <http://www.iup.physik.uni-bremen.de/sciamachy/publication.html>



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.

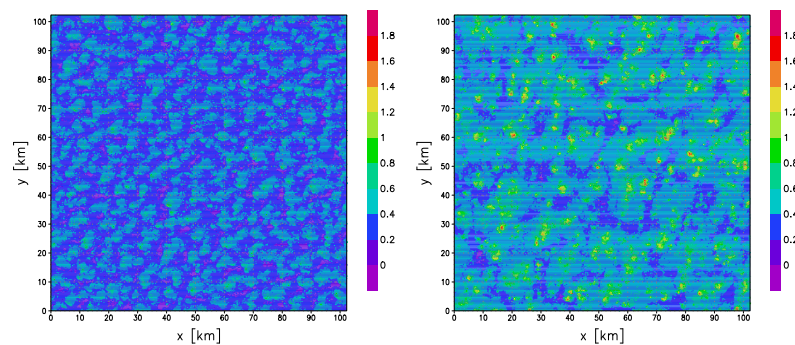


ABBILDUNG 4.8: Wolkenzellen nach 5 h Simulation (links) und 15 h Simulation (rechts) in einem horizontalen Schnitt durch das Modellgebiet. Dargestellt ist der Flüssigwasserpfad [mm]. Deutlich sichtbar sind die im Zeitverlauf größer werdenden geschlossenen Wolkenzellen (mittlere bis hohe Flüssigwassergerhalte ab 0.4) unterbrochen von relativ schmalen wolkenfreien Gebieten (blau) (Webversion ist farbig).

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 (s. Abbildung 4.8). Zu diesem Zweck wird das hochauflösende, parallelisierte Grobstruktursimulationsmodell PALM mit einem wolkenphysikalischen Modul eingesetzt, welches Verdunstungs- und Kondensations- sowie Niederschlagsprozesse durch einfache Parametrisierungen berücksichtigt.

## Strömungssimulation um ein generisches Kraftfahrzeugmodell mit aktiver Beeinflussung des Ablösegebietes

Verantwortlicher Wissenschaftler: F. Thiele, Hermann-Föttinger-Institut für Strömungsmechanik, TU Berlin

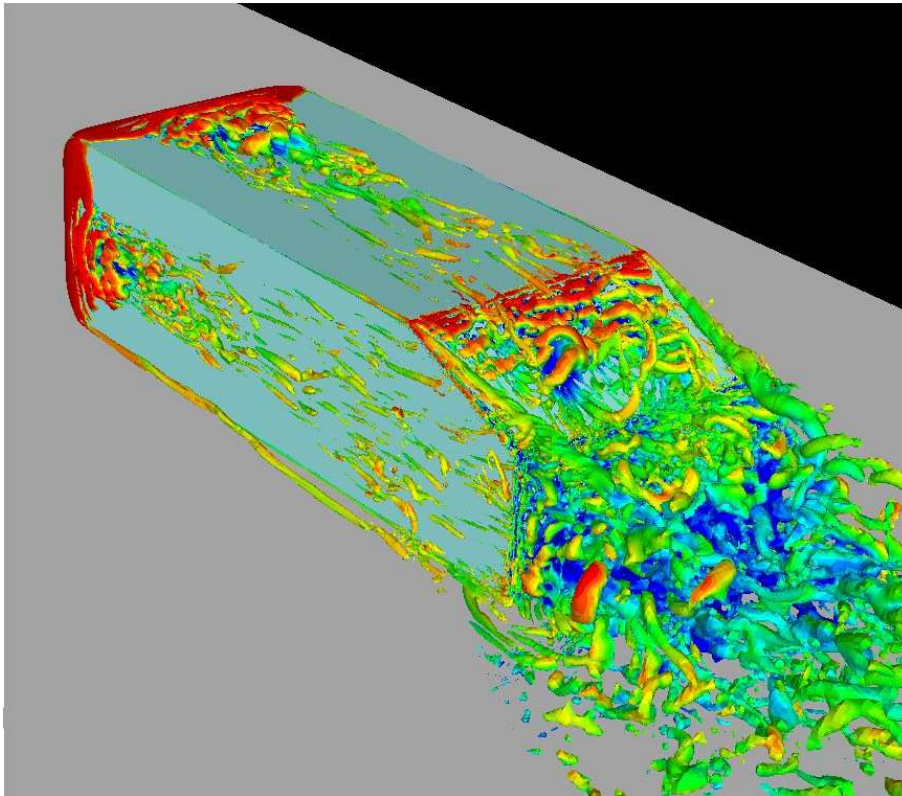


ABBILDUNG 4.9: Wirbelstrukturen in der turbulenten Strömung um das Fahrzeugmodell (Ahmed-Body)

Bei der Umströmung eines stumpfen Körpers kommt es hinter dem Körper in der Regel zu einer massiven Strömungsablösung. Das Ablösegebiet zeigt einen sehr komplexen zeitlichen und räumlichen Aufbau, der von großskaligen Wirbelstrukturen geprägt ist. Bei Bodenfahrzeugen, wie z. B. Kraftfahrzeugen, die die Form eines stumpfen Körpers besitzen, ist dieses Nachlaufgebiet für den weitaus größten Teil des aerodynamischen Widerstands des Fahrzeugs verantwortlich. Des Weiteren verursacht die Wirbelablösung instationäre Kräfte auf das Fahrzeug, die die Fahrstabilität und -kontrolle negativ beeinflussen können.

Ziel des Projektes ist es deshalb, anhand eines vereinfachten Kraftfahrzeugmodells Methoden zu untersuchen, um das Nachlaufgebiet gezielt zu beeinflussen und dadurch den aerodynamischen Widerstand zu reduzieren sowie die Fahrstabilität zu erhöhen. Als vereinfachtes Modell dient der Ahmed-Body (s. Abbildung 4.9), der in der Vergangenheit bereits mehrfach Gegenstand von experimentellen und numerischen Untersuchungen war. Das Modell weist eine schräge Heckrampe auf, wobei der Heckrampenwinkel einen großen Einfluss auf die Struktur des Nachlaufgebietes und auf den Widerstand des Körpers hat. Mit Hilfe der Large-Eddy-Simulation (LES) sollen Methoden der aktiven Strömungsanregung untersucht werden, um die Struktur des Nachlaufs positiv zu beeinflussen.

**Geometric, electronic and vibrational structure of vanadia catalyst supports****Verantwortliche Wissenschaftler:** M. V. Ganduglia-Pirovano, T. K. Todorova, HU Berlin

The goal of this project is to investigate the electronic, geometric and vibrational properties of vanadia supported model catalysts by performing computer simulations. The focus of this project is a realistic description of the substrate itself since too simple models appear not to be consistent with the experimental findings. Therefore, theoretical studies on well defined model catalysts such as vanadia aggregates (particles and films) of varying size and thickness are essential for understanding the structure, stability and reactivity of supported vanadia oxides and in turn the support effect. Using density functional theory and statistical thermodynamics, the stability of these systems at realistic conditions (varying temperature, oxygen partial pressure and vanadium activity) is obtained and the oxygen defect formation energy is evaluated as a reactivity parameter.

The project is complementary to the project "Periodic density functional calculations of structure, dynamic and reactivity of transition metal oxides" and the results obtained in both projects are to be compared.

**Globale Geometrieoptimierung atomarer und molekularer Cluster****Verantwortliche Wissenschaftler:** B. Hartke, B. Bandow, Christian-Albrechts-Universität Kiel

Theoretische Simulationen chemischer Eigenschaften einzelner, isolierter Moleküle beschränkter Größe sind heutzutage vielfach mit einer Genauigkeit möglich, die quantitative Übereinstimmung mit experimentellen Resultaten bei ähnlichen Isolationsbedingungen erwarten läßt. Reale chemische Vorgänge finden jedoch in der Regel in einer größeren, heterogenen Umgebung einer Vielzahl wechselwirkender Moleküle statt. Für die effiziente Untersuchung derartiger Systeme befindet sich das theoretische Methodenarsenal erst im Entwicklungsstadium.

Ein eigenes, etabliertes Parallelprogramm zur globalen Strukturoptimierung atomarer und molekularer Cluster mit Hilfe evolutionärer Algorithmen und effizienter lokaler Optimierung wurde in diesem Projekt erfolgreich von einer einfachen Parallelisierung des evolutionären Standardalgorithmus mit sukzessiven Generationen auf ein generationenfreies Poolmodell umgestellt. Per Konstruktion konnten dadurch die vorherigen rein seriellen Engpässe völlig eliminiert werden (mit bis zu 50% Gewinn in der Gesamtlaufzeit). Gleichzeitig wurde dadurch die praktische Flexibilität des Programms erheblich verbessert.

Als konkrete Anwendung werden Untersuchungen an reinen, neutralen Wasserclustern mit dem aufwendigen, aber realistischen und exakten TTM2-F-Potential durchgeführt. Ein Ziel dabei ist die Verfolgung und Rationalisierung der Strukturentwicklung, von kleinsten Clustern bis zum Festkörper Eis. Von besonderem Interesse ist dabei die Frage, ab welcher Clustergröße im Clusterinneren Eisstrukturen auftreten.

Der größte Teil der Produktionsrechnungen dafür steht noch aus, trotzdem zeigen sich bereits jetzt interessante Befunde, wie etwa das erste Auftreten eines Rings aus Wassermolekülen im Inneren unserer besten Struktur für einen Cluster aus 65 Wassermolekülen (siehe Abbildung 4.10).

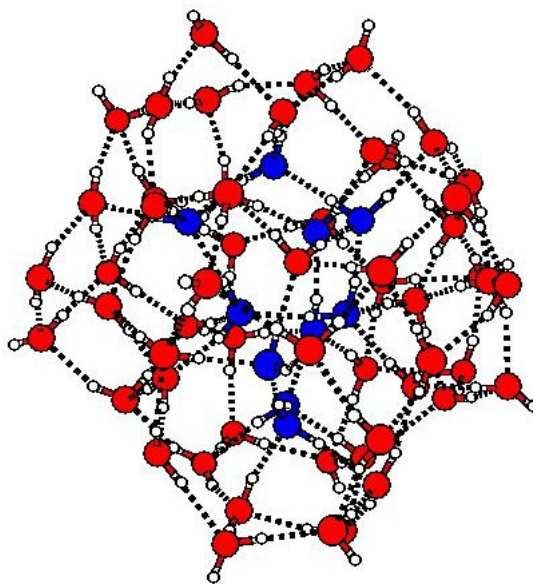


ABBILDUNG 4.10: Optimaler Cluster aus 65 Wassermolekülen (innere Moleküle blau)  
(Webversion ist farbig).

## 4.2 Fachberatung

Das Konzept der Fachberatung ist weiterhin erfolgreich und bewährt sich uneingeschränkt. 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	Bernd Kallies
Bioinformatik	Thomas Steinke
Ingenieurwissenschaften	Wolfgang Baumann
Physik	Hinnerk Stüben
Umwelt-, Klima- und Geowissenschaften	Wolfgang Baumann (kommissarisch)
Allgemeine Fragen zur Rechnernutzung	Wilhelm Vortisch (bis 31.08.2005)
Massendatenhaltung, Archivierung	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 Fachberater sind außerdem zuständig für die Installation und Pflege von Anwendersoftware unabhängiger Soft-

warehersteller für ihr jeweiliges Fachgebiet. Im Berichtszeitraum war dies in der Regel mit Portierungs- und Optimierungsarbeiten für das derzeitige HLRN-System in Zusammenarbeit mit den Softwareherstellern verbunden. Auch die Bereitstellung und Pflege anwendernaher Systemsoftware (z. B. Compiler) wurde von der Fachberatung übernommen.

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 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, Development-Knoten).

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 konzentrieren musste. Darüber hinaus ist die Fachberatung eng eingebunden in das Antragsverfahren für das Nachfolgesystem HLRN-II, das zu Beginn des Jahres 2006 alle Begutachtungsphasen erfolgreich bestanden hat.

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. Die Fachberater sind darüber hinaus über Gruppen ihres jeweiligen Fachgebiets in die Forschung eingebunden. Die Projekte erhalten so eine gezielt verbesserte numerische und algorithmische Unterstützung. 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. Der im Berichtsjahr mit Beiträgen der Projekte erstellte Report *Wissenschaftliche Projekte auf dem HLRN-System 2003–2005*<sup>7</sup> dokumentiert ebenfalls die erfolgreiche Arbeit der Fachberatung, in deren Händen die Konzeption sowie die redaktionelle und technische Betreuung lag.

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 und Anwenderbetreuer aus den Universitätsrechenzentren der am HLRN beteiligten Länder durch.

Schwerpunkte bei der Organisation des über die sechs beteiligten Länder verteilten, dezentralen HLRN-Supports waren im Berichtsjahr

- Aufbau und Inbetriebnahme eines neuen dedizierten Mailservers,
- Aufbau und Inbetriebnahme eines neuen Servers für HLRN-Dienste,
- die weitere Verbesserung und Pflege der technischen Infrastruktur und Nutzung elektronischer Kommunikationsmittel wie z. B. ein web- und datenbank-basiertes Trouble-Ticket-System,
- der weitere Ausbau des Dokumentationssystems einschließlich der notwendigen Webserver sowie

---

<sup>7</sup><http://www.hlrn.de/pr/veroeffentlichungen/HLRN-Report-2005.pdf>

- 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 und flexible 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 vorrangig aus den Ländern Berlin, Mecklenburg-Vorpommern und Schleswig-Holstein. Seit dem Wegfall der korrespondierenden Funktion am Regionalen Rechenzentrum für Niedersachsen hat sich die Zuständigkeit um Nutzer aus den Ländern Niedersachsen und Hamburg erweitert.

Chemie-Großprojekte hatten im Berichtszeitraum einen Anteil von 34,5% am vom Wissenschaftlichen Ausschuss bewilligten Kontingent (s. Abbildung 4.3). Damit ist der Anteil der Chemie an der Nutzung des HLRN-Systems im Vergleich zum Vorjahr konstant hoch und zeigt, dass das HLRN-System ein wesentliches Arbeitsmittel der Chemiker in Norddeutschland geworden ist.

Die Mehrheit der Nutzer aus dem Bereich Chemie macht von den im HLRN angebotenen kommerziellen Softwarepaketen Gaussian03, TURBOMOLE und MOLPRO Gebrauch. Der überwiegende Anteil der abgegebenen Leistung kommt allerdings durch die Nutzung massiv-paralleler Software wie CPMD, VASP und NAMD zustande. Bei der Verwendung von Paketen wie TURBOMOLE und MOLPRO wirkt sich die Verfügbarkeit von standardmäßig 64 GByte Hauptspeicher pro Knoten positiv auf die Akzeptanz des HLRN-Systems für Chemiker aus.

Der Fachberater arbeitete im Berichtszeitraum wissenschaftlich mit den Arbeitsgruppen von Rudi van Eldik (Professur für Anorganische und Analytische Chemie, Universität Erlangen), Hans-Gerd Löhmannsröben (Professur für Physikalische Chemie, Universität Potsdam), Burkhard Micheel (Professur für Biotechnologie, Universität Potsdam) und Wolfgang Höhne (Abteilung Proteinstrukturforschung der Charité Berlin) zusammen.

#### 4.2.2 Geowissenschaften

Das Fachgebiet Geowissenschaften umfasst die Projekte aus dem Bereich Umweltwissenschaften einschließlich seiner Randgebiete 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-System 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 verfolgt. Weitere große Projekte kommen vom Institut für Ostseeforschung Warnemünde an der Universität Rostock und von der Universität Bremen. Auf die geowissenschaftlichen Projekte entfielen 22% der insgesamt bewilligten Rechenzeit.

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 bewilligte Rechenzeitanteil stieg von 13% im Jahr 2004 auf 20% im Jahr 2005.

Die in der Vergangenheit durchgeführten Konfigurationsanpassungen und der mittlerweile stabile Betrieb des IBM-Systems hat den HLRN für ingenieurwissenschaftliche Projekte nach einer längeren Anlaufphase wieder interessant gemacht. Problematisch ist aber für alle arbeitswilligen Projekte die starke Auslastung und die große Konkurrenz um die verfügbaren Ressourcen. Das System ist mittlerweile „zu klein“ geworden. Daher 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 Frank Thiele (Hermann-Föttinger-Institut der TU Berlin (HFI)) auf dem Gebiet *Computational Fluid Dynamics* mit dem Schwerpunkt Modellierung und Berechnung der Austauschvorgänge in Mehrphasen-/Mehrkomponentenströmungen (Wärme, Stoff, Impuls, Turbulenz) zusammen. Er ist außerdem Mitglied des universitären Forschungsschwerpunktes *Fluidsystemtechnik*<sup>8</sup> und Teilprojektleiter im DFG-Graduiertenkolleg 827 *Transportvorgänge an bewegten Phasengrenzflächen*<sup>9</sup>, 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 für Physikprojekte im HLRN bewilligte Rechenzeitanteil beträgt im Berichtsjahr 23,5% und ist damit um 6,5% geringer als im Vorjahr. Die Verschiebung im Anteil der Physik ist unter anderem auf das Auslaufen einiger größerer Projekte zurückzuführen.

Wissenschaftlich arbeitet der Fachberater auf dem Gebiet der Gitterfeldtheorie mit den Gruppen von Michael Müller-Preußker (Humboldt-Universität zu Berlin) und Gerrit Schierholz (DESY Zeuthen) zusammen. Das Schwergewicht liegt auf der Weiterentwicklung des vom Fachberater geschriebenen Simulationsprogramms BQCD.

In der Weiterbildung der Nutzer wurde der integrierte Kurs „Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP“ in Berlin und Bremen durchgeführt. An der Humboldt-Universität wurde vom Fachberater im Sommersemester die Vorlesung „Hochleistungsrechnen für Naturwissenschaftler“ gehalten.

---

<sup>8</sup><http://www.tu-berlin.de/fst/>

<sup>9</sup><http://www.tu-berlin.de/fst/grk827/>

Ein weiteres Tätigkeitsfeld des Fachberaters war die Mitarbeit bei der Vorbereitung der Nachfolgebeschaffung HLRN-II.

### 4.3 Berliner Wissenschaftsnetz (BRAIN)

**Bearbeitet von:** Hubert Busch, Marek Fröhlich, Ursula Droebe

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

Seit nunmehr elf Jahren wird das Berliner Wissenschaftsnetz BRAIN<sup>10</sup> von den Hochschulen, Forschungsinstituten und Bildungseinrichtungen sowie anderen öffentlichen Einrichtungen in Berlin als Hochgeschwindigkeitsdatennetz genutzt. Die technische Grundlage von BRAIN ist das LWL<sup>11</sup>-Netz des Landes Berlin, welches vom IT-Dienstleistungszentrum Berlin (ITDZ<sup>12</sup>) für die Standorte der Berliner Verwaltung sowie – in Zusammenarbeit mit BRAIN – für die Wissenschaftseinrichtungen in weitgehend vorhandene Kabeltrassen im öffentlichen Straßenland verlegt worden ist. 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.

#### BRAIN-Leitungsnetz

Das physikalische Leitungsnetz von BRAIN ist Teil des vom ITDZ 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 (Abbildung 4.11). Hinzu kommen einige interne Leitungen der Universitäten, die ebenfalls in das Netz integriert sind.

Durch den kontinuierlichen Ausbau des LWL-Netzes werden Jahr für Jahr weitere wissenschaftliche und kulturelle Einrichtungen mit ihren Haupt- und Nebenstandorten an das BRAIN angeschlossen.

Im Berichtsjahr wurden folgende Baumaßnahmen abgeschlossen:

- Technische Fachhochschule Berlin (TFH): Kurfürstenstraße
- Stiftung Preußischer Kulturbesitz (SPK): Hamburger Bahnhof
- Max-Planck-Gesellschaft (MPG): Kronprinzessinnenpalais
- Universität der Künste (UdK): Mierendorffstraße
- Humboldt-Universität zu Berlin (HU): Sophienstraße
- BRAIN: Kurfürstenstraße zur Anbindung an den BCIX<sup>13</sup>, den unabhängigen regionalen Peering Point<sup>14</sup>.

<sup>10</sup>Berlin Research Area Information Network

<sup>11</sup>LWL – Lichtwellenleiter

<sup>12</sup>ITDZ, ehemals LIT – Landesbetrieb für Informationstechnik

<sup>13</sup>BCIX – Berlin Commercial Internet Exchange

<sup>14</sup>Peering Point (Verbindungspunkt) – Übergang zwischen den Datennetzen verschiedener Netzprovider zum Austausch von Daten



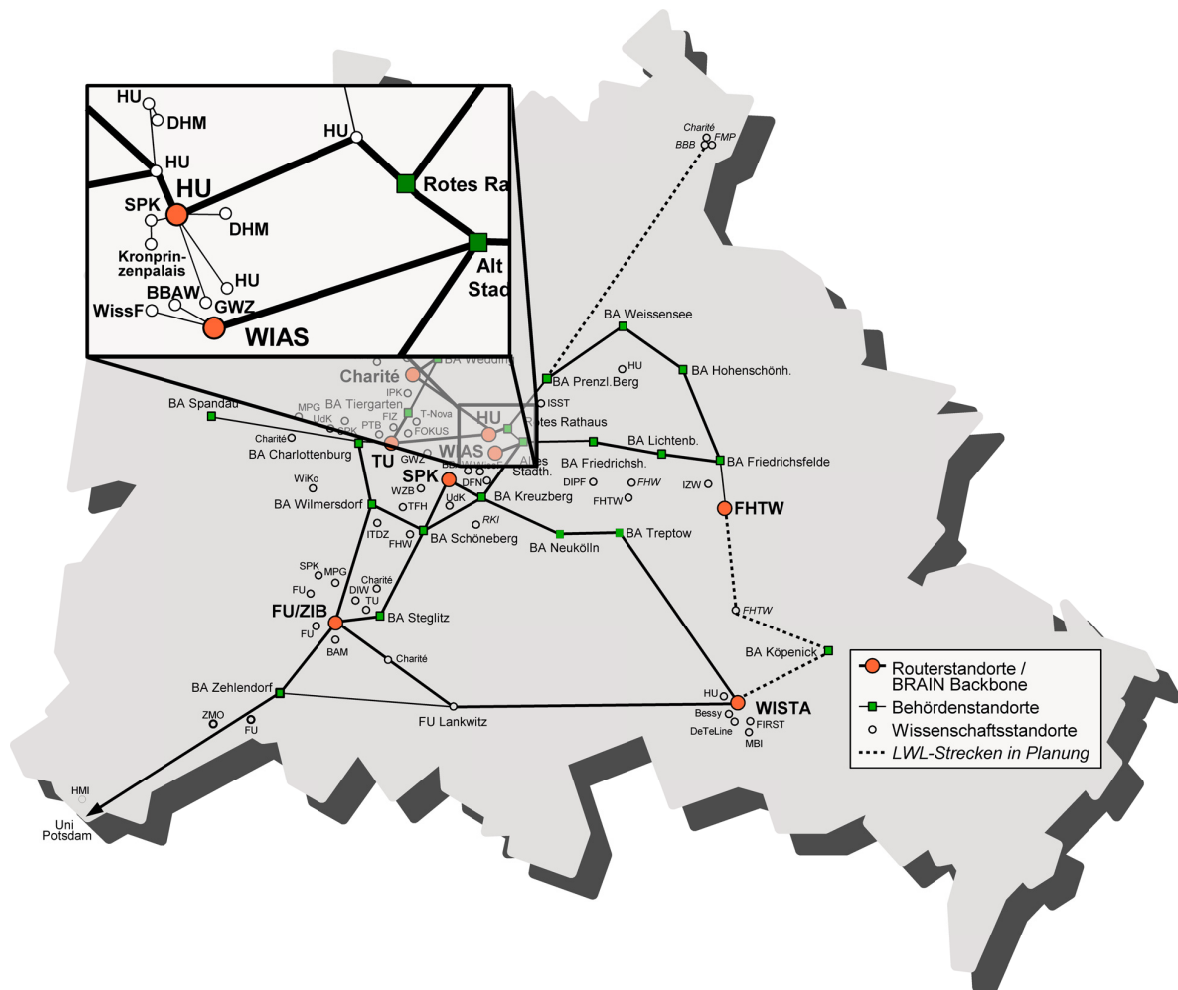


ABBILDUNG 4.11: Kabelnetz mit den wichtigsten Standorten

### BRAIN-Dienste

Über das von BRAIN selbständig verwaltete Glasfasernetz werden vor allem solche Dienste angeboten, für die in der Region ein besonderer Bedarf besteht:

- BRAIN-GE: Betrieb eines Metro-Netzes mit Gigabit-Ethernet-Technik und zentralem Netzwerkmanagement;
- BRAIN-ATM: Betrieb eines Metro-Netzes mit ATM-Technik;
- Betrieb des regionalen WiN<sup>15</sup> mit zusätzlichen Komponenten (ringförmiger Backbone zur Erhöhung der Sicherheit) in Zusammenarbeit mit dem DFN-Verein; Unterstützung bei der Migration G-WiN→X-WiN;
- WiN-Backup über BRAIN: redundanter WiN-Zugang für am BRAIN-GE teilnehmende Einrichtungen; dieser kann genutzt werden, wenn die primäre WiN-Anbindung der Einrichtung unterbrochen ist;

<sup>15</sup>WiN – Wissenschaftsnetz des Vereins zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes

- Bereitstellung von Glasfasern zur internen Vernetzung der in der Stadt verteilten Standorte einzelner Einrichtungen;
- BRAIN-WDM: Bereitstellung dedizierter Bandbreiten über die eigene WDM<sup>16</sup>-Struktur für den Transport beliebiger Protokolle (Ethernet, ATM, SDH, Fibre-Channel);
- Zugang zum Berliner Landesnetz über eine dedizierte LWL-Verbindung zum ITDZ; dies erlaubt den Verwaltungen der wissenschaftlichen Einrichtungen, direkt auf die Formulareserver im Intranet des Landes Berlin zuzugreifen;
- Beratung und Unterstützung der BRAIN-Teilnehmer bei Bau oder Inbetriebnahme neuer LWL sowie der Nutzung neuer Dienste im BRAIN.

Alle von BRAIN angebotenen Dienste werden in einem einheitlichen Vertrag zusammengefasst und die anfallenden Investitions- und Betriebskosten entsprechend der Zahl der Anschlüsse, Anschlussbandbreiten und Streckenlängen auf die Teilnehmer umgelegt. Im Prinzip werden die hierfür geltenden Tarife für jedes Jahr neu ermittelt, wobei auch der Anteil der Grundfinanzierung für die Einrichtung durch das Land Berlin eine entscheidende Rolle spielt. Tatsächlich hat sich jedoch an den seit 2003 geltenden Tarifen bisher nichts geändert.

### BRAIN-GE – Berliner Gigabit-Ethernet-Verbund

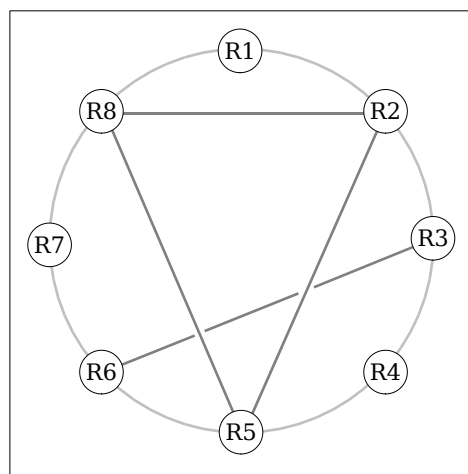


ABBILDUNG 4.12: BRAIN-GE-Verbundnetz: R1..R8 = L2/L3-Router

BRAIN bietet den wissenschaftlichen Einrichtungen neben dem Anschluss an das WiN (WiN-Datenverkehr über BRAIN-Leitungen) die Möglichkeit, die lokalen Daten der in Berlin verteilten Standorte über BRAIN-LWL zu transportieren.

Das BRAIN-GE-Verbundnetz (Abbildung 4.12) verbindet die acht in Berlin verteilten Netzknoten über Gigabit-Ethernet miteinander und wird zentral gemanagt. Die Ringstruktur sowie die zusätzlichen Querverbindungen sorgen für Redundanz im Verbundnetz. Dadurch sind

<sup>16</sup>WDM –Wavelength-Division-Multiplexing: Laserlicht unterschiedlicher Wellenlängen wird benutzt, um gleichzeitig mehrere Kommunikationskanäle (Wellenkanäle) über eine Glasfaser zu übertragen

Unterbrechungen einzelner Backbone-Verbindungen (z. B. durch Leitungsschaden) für den Nutzer nicht spürbar.

Die Verwendung von MPLS<sup>17</sup> als Transportprotokoll ermöglicht den Einsatz von RSVP-TE<sup>18</sup>. Mit RSVP lassen sich die von ATM bekannten Quality-of-Service-(QoS)-Eigenschaften auch für die angebotenen Dienste im Backbone nutzen. Traffic Engineering (TE) kann die Verkehrsströme über festgelegte Stationen im Backbone lenken – so können Knoten mit hohem Verkehrsaufkommen gezielt umgangen und Engpässe vermieden werden.

Im Rahmen ihrer Anbindung wird für jede Einrichtung ein eigenes Layer2-VPN<sup>19</sup> aufgespannt. Ein Layer2-VPN separiert die Datenströme der Einrichtungen auf der untersten Protokollebene, unabhängig von eventuell konfigurierten VLANs<sup>20</sup> auf Einrichtungsseite. Der Anschluss an den Backbone erfolgt wahlweise über 100 Mbit/s oder 1.000 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 Laufe des Berichtsjahres hat die Stiftung Preußischer Kulturbesitz (SPK) ihre Umstellung von der Festnetztelefonie auf Voice-over-IP (VoIP) über den BRAIN-GE-Backbone für weitere Standorte fortgeführt. Dazu wird der Transport der Sprachpakete der SPK gegenüber den normalen Datenpaketen priorisiert. Mit Hilfe der MPLS-Technik ließen sich die entsprechenden QoS<sup>21</sup>-Anforderungen der Stiftung zuverlässig erfüllen. Die Freie Universität Berlin (FU) nutzt seit Beginn des Berichtsjahres ebenfalls für einige ihrer Standorte VoIP über die BRAIN-Infrastruktur.

Im letzten Quartal wurde die Anbindung an den BCIX, dem unabhängigen regionalen Peering Point für Berlin und Brandenburg, realisiert. Diese Anbindung wird schon für das offene Peering<sup>22</sup> genutzt. Eine weitere Nutzungsmöglichkeit ist die Versorgung mit Upstream durch weitere Internet-Provider, um echtes Multihoming für die Berliner Einrichtungen einzurichten. Multihoming ist eine Technik, um die Zuverlässigkeit von Internet-Verbindungen eines IP-Netzwerkes zu verbessern. Hierzu erfolgt die Anbindung ans Internet über mindestens zwei ISP<sup>23</sup> – in Berlin z. B. den DFN und einen ISP am BCIX.

Zum 31.12.2005 waren insgesamt 38 Standorte der folgenden Einrichtungen am Gigabit-Ethernet-Backbone angeschlossen:

- Berliner Elektronenspeicherring-Ges. für Synchrotronstrahlung (BESSY)
- Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM)
- Charité Universitätsmedizin Berlin (Charité)
- Deutsches Historisches Museum (DHM)
- Fachhochschule für Technik und Wirtschaft (FHTW)

<sup>17</sup>MPLS - Multiprotokoll-Label-Switching, RFC 3031, RFC 3032

<sup>18</sup>Ressource-Reservation-Protokoll mit Traffic Engineering Erweiterung, RFC 3209

<sup>19</sup>VPN – Virtual-Private-Network

<sup>20</sup>VLAN – Virtual-LAN, Layer2-Broadcast-Domäne

<sup>21</sup>QoS - Quality of Service: Dienstgüte in Kommunikationsnetzen

<sup>22</sup>Offenes Peering – Peering mit jedem potenziellen Partner, der am Peering Point vertreten ist

<sup>23</sup>Internet Service Provider

- Forschungsverbund Berlin (FVB)
- Fraunhofer-Institut für Rechnerarchitektur und Softwaretechnik (FIRST)
- Freie Universität Berlin (FU)
- Hahn-Meitner-Institut (HMI)
- Humboldt-Universität zu Berlin (HU)
- Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik (ZIB)
- Max-Planck-Gesellschaft (MPG)
- Stiftung Preußischer Kulturbesitz (SPK)
- Technische Fachhochschule Berlin (TFH)
- Technische Universität Berlin (TU)
- Universität der Künste (UdK)
- Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes (DFN)

### **BRAIN-WDM – CWDM-Technik für das BRAIN-Leitungsnetz**

Im Berichtsjahr wurden vier CWDM<sup>24</sup>-Geräte der Serie TS1100 der Firma Transmode beschafft und in Betrieb genommen. Die Geräte, die zentral von BRAIN gewartet werden, multiplexen bis zu 8 Gigabit-Ethernet-, ATM- oder Fibre-Channel-Anwendungen über einen einzigen LWL. Auf diese Weise wurden Faserengpässe behoben und LWL-Strecken eingespart. Der modulare Aufbau (19"-Chassis-Bauweise) der Geräte ermöglicht künftige Erweiterungen, z. B. 10Gbit-Ethernet oder 10Gbit-Fibre-Channel durch steckbare Module.

### **Ausblick**

Im Jahr 2006 werden weitere Einrichtungen mit deren Standorten an den BRAIN-GE-Backbone angeschlossen. Eine Ausdehnung von BRAIN nach Potsdam, d. h. die Installation eines eigenen BRAIN-Routers in Potsdam, über den sämtliche BRAIN-Dienste auch für die Potsdamer Einrichtungen zur Verfügung stehen, wird angestrebt. Die Ausnutzung des verfügbaren Kabelkontingents wird durch Einsatz zusätzlicher WDM-Technik optimiert. Die Möglichkeit zur Erhöhung der Redundanz innerhalb des Kabelnetzes bzw. die Anbindung von Standorten in noch nicht per LWL erschlossenen Lagen, z. B. durch Einsatz von Funktechnik, wird geprüft. Zusätzliche Dienste, die für die BRAIN-Community einen Mehrwert darstellen und über die BRAIN-Infrastruktur etabliert werden können, werden evaluiert und deren Umsetzung angestrebt.

Weitere Informationen zu BRAIN unter <http://www.brain.de>.

---

<sup>24</sup>CWDM – Coarse-Wavelength-Division-Multiplexing, optisches Multiplexing mit großen Abständen zwischen den einzelnen Wellenlängen

## PUBLIKATIONEN

### 5.1 Preprints

Ein Verzeichnis aller Titel mit Abstracts ist im Anhang zu finden. Die Preprints sind abrufbar über

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

und/oder

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

### 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, New York
- Computing and Visualization in Science, Springer, Berlin, Heidelberg, New York
- 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
- Mathematical Methods of Operations Research, Physica Verlag, An Imprint of Springer-Verlag GmbH
- Mathematical Programming A, Springer, Berlin, Heidelberg, New York
- Networks, John Wiley & Sons, New York, 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, USA

- European Journal of Applied Mathematics (EJAM), Cambridge University Press
- Surveys on Mathematics for Industry (merged with EJAM), Cambridge University Press

### Hans-Christian Hege

- Book series „Visualization and Mathematics“, Springer, Berlin, Heidelberg, New York
- Video series „VideoMATH“, Berlin, Heidelberg, New York

### Konrad Polthier

- Special Issue of Computer Aided Geometric Design (CAGD) on „Discrete Geometry“, Elsevier Science, Niederlande (seit 2005, in Vorbereitung)
- Book series „Visualization and Mathematics“, Springer, Berlin, Heidelberg, New York
- Video series „VideoMATH“, Springer, Berlin, Heidelberg, New York
- Journal „Electronic Geometry Models“

### Alexander Reinefeld

- Journal of Grid Computing, Springer, Berlin, Heidelberg New York
- Future Generation Computer Systems, Elsevier Science, Niederlande

## 5.3 Beiträge in Zeitschriften und Tagungsbänden

1. T. Achterberg, T. Koch und A. Martin, *Branching rules revisited*, OR Lett. **33** (2005), 42–54.
2. T. Achterberg, T. Koch und A. Martin, *MIPLIB 2003*, OR Lett. (2005), erscheint demnächst.
3. T. Achterberg, T. Koch und A. Martin, *Branching rules revisited*, OR Lett. **33** (2005), 42–54.
4. T. Achterberg, T. Koch und A. Martin, *emphMIPLIB 2003*, OR Lett. (2005), erscheint demnächst.
5. G. Allen, K. Davis, T. Goodale, A. Hutanu, H. Kaiser, T. Kielmann, A. Merzky, R. van Niewpoort, A. Reinefeld, F. Schintke, T. Schütt, E. Seidel, B. Ullmer: *The Grid Application Toolkit: Toward Generic and Easy Application Programming Interfaces for the Grid*. In: Proceedings of the IEEE, 93(3): 534–550, März 2005.
6. A. Andrzejak, A. Reinefeld, F. Schintke, T. Schütt: *On Adaptability in Grid Systems*. In: M. Cosnard, V. Getov, D. Laforenza, A. Reinefeld (EDS.), *Future Generation Grids*. Dagstuhl Seminar Proceedings, Vol. 04451, Januar 2005.
7. 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.
8. A. Andrzejak, U. Hermann, A. Sahai: *FEEDBACKFLOW – An Adaptive Workflow Generator for System Management*. In Proceedings of the 2nd IEEE International Con-

- ference on Autonomic Computing (ICAC-05), Seattle, Washington, USA, 13–16 Juni 2005.
9. D. Baum. Multiple Semi-flexible 3D Superposition of Drug-sized Molecules. In *Computational Life Sciences: First International Symposium, CompLife 2005, Lecture Notes on Computer Science* Band 3695, Seiten 198–207, Konstanz, 2005. Springer.
  10. W. Benger, H.-C. Hege. *Strategies for direct visualization of second-rank tensor fields*. In J. Weickert und H. Hagen (Hrsg.), *Visualization and processing of tensor fields*, 2006.
  11. A. Bley, *Finding Small Administrative Lengths for Shortest Path Routing*, Tagungsband zur „Second International Network Optimization Conference (INOC 2005)“, Lissabon, März 2005, Seiten 121–128, auch als Report 05-04, ZIB, 2005.
  12. A. Bley, *On the Approximability of the Minimum Congestion Unsplittable Shortest Path Routing Problem*, Tagungsband zur „11th Conference on Integer Programming and Combinatorial Optimization (IPCO 2005)“, Berlin, Juni 2005, Seiten 97–110.
  13. A. Bley und M. Pattloch, *Modellierung und Optimierung der X-WiN Plattform*, DFN-Mitteilungen **67** (2005), Seiten 4–7, auch als Report 05-21, ZIB, 2005.
  14. B. Block, C. Hengel, R. Heuvelmann, C. Katz, B. Rusch, K. Schmidgall, B. Sigrist, *Maschinelles Austauschformat für Bibliotheken und die Functional Requirements for Bibliographic Records. Oder: Wieviel FRBR verträgt MAB?*, Bibliotheksdienst 39. Jg. (2005), Heft 10, S. 1231–1244.
  15. H. L. Bodlaender, A. M. C. A. Koster und F. v. d. Eijkhof, *Pre-processing rules for triangulation of probabilistic networks*, *Comput. Intelligence* **21** (2005), Nr. 3, 286–305.
  16. H. L. Bodlaender, A. Grigoriev und A. M. C. A. Koster, *Treewidth lower bounds with brambles*, *Proc. 13th Annual European Symposium on Algorithms, ESA2005* (G. S. Brodal und S. Leonardi, Hg.), *Lecture Notes in Computer Science*, Bd. 3669, Springer-Verlag, 2005, S. 391–402.
  17. I. Boev, L. Hodoroaba, A. Imhof, *Der KOBV-Metadaten-Austausch-Parser (KMA-Parser): ein Werkzeug für Metadaten-Sharing*, *B.I.T.online* 8 (2005) 1, S. 29–36.
  18. H. Bosse, M. Grötschel und M. Henk, *Polynomial inequalities representing polyhedra*, *Mathematical Programming* 103(1):35–44, 2005.
  19. A. Brandt und M. Brandt, *Individual overflow and freed carried traffics for a link with trunk reservation*, *Telecommunication Syst.* **29** (2005), 283–308.
  20. A. Brandt, M. Brandt, S. Rugel und D. Weber, *Admission control for realtime traffic: improving performance of mobile networks by operating on actual throughput*, *Proc. IEEE Wireless Communications & Networking Conference WCNC 2005* (New Orleans, USA), 2005.
  21. R. Brandt, T. Rohlfing, J. Rybak, S. Krofczik, A. Maye, M. Westerhoff, H.-C. Hege und R. Menzel. A three-dimensional average-shape atlas of the honeybee brain and its applications. *Journal of Comparative Neurology*, 2005. Zur Veröffentlichung angenommen.
  22. S. Burger, R. Klose, A. Schädle, F. Schmidt, L. Zschiedrich, *FEM modelling of 3D photonic crystals and photonic crystal waveguides* in: *Integrated Optics: Devices, Materials, and Technologies IX*, Eds. Y. Sidorin, C. A. Wächter, *Proc. SPIE* Vol. 5728, 2005.

23. S. Burger, L. Zschiedrich, R. Klose, A. Schädle, F. Schmidt, C. Enkrich, S. Linden, M. Wegener, and C. M. Soukoulis. *Numerical Investigation of Light Scattering off Split-Ring Resonators*. In: *Metamaterials*, Proc. SPIE Vol. 5955, 18-26, 2005.
24. S. Burger, R. Köhle, L. Zschiedrich, W. Gao, F. Schmidt, R. März, and C. Nölscher. *Benchmark of FEM, Waveguide and FDTD Algorithms for Rigorous Mask Simulation*. In: *Photomask Technology*, Proc. SPIE Vol. 5992, 368-379, 2005.
25. S. Burger, L. Zschiedrich, R. Klose, A. Schädle, F. Schmidt, C. Enkrich, S. Linden, M. Wegener, C. M. Soukoulis. *Numerical investigation of light scattering off split-ring resonators*. In T. Szoplik, E. Özbay, C. M. Soukoulis, and N. I. Zheludev, editors, *Metamaterials*, volume 5955, pages 18–26. Proc. SPIE, 2005.
26. F. Cassot, F. Lauwers, C. Fouard, S. Prohaska und V. Lauwer-Cances. A novel three-dimensional computer assisted method for a quantitative study of microvascular networks of the human cerebral cortex. *Microcirculation*, 13:15–32, 2006.
27. M. Clasen und H.-C. Hege. Realistic illumination of vegetation in real-time environments. In E. Buhmann, P. Paar, I. Bishop und E. Lange (Hrsg.), *Trends in Real-Time Landscape Visualization and Participation*, Seiten 107–114. Wichmann Verlag, 2005.
28. L. Coconu, C. Colditz, H.-C. Hege und O. Deussen. Seamless integration of stylized renditions in computer-generated landscape visualization. In E. Buhmann, P. Paar, I. Bishop und E. Lange (Hrsg.), *Trends in Real-Time Landscape Visualization and Participation*, Seiten 88–96. Wichmann Verlag, 2005.
29. C. Colditz, L. Coconu, O. Deussen und H.-C. Hege. Real-time rendering of complex photorealistic landscapes using hybrid level-of-detail approaches. In E. Buhmann, P. Paar, I. Bishop und E. Lange (Hrsg.), *Trends in Real-Time Landscape Visualization and Participation*, Seiten 97–106. Wichmann Verlag, 2005.
30. V.-J. Dercksen, S. Prohaska und H.-C. Hege Fast cross-sectional display of large data sets. In *IAPR Conference on Machine Vision Applications*, Seiten 336–339, Tsukuba, Japan, Mai 2005.
31. P. Deuffhard: *Pittori, assassini, matematici*. In: M. Manaresi (ed.), *Matematica e Cultura in Europa*. Springer-Verlag Italia, pp. 145-155, 2005.
32. O. Deussen, C. Colditz, L. Coconu und H.-C. Hege. Efficient modelling and rendering of landscapes. In Ian Bishop und Eckart Lange (Hrsg.), *Visualization in Landscape and Environmental Planning*, Seiten 56–61. Spon Press, London, 2005.
33. D. Draheim, W. Neun, and D. Suliman, *Classifying Mathematical Web Content*, Proceedings of A3L 2005 – Algorithmic Algebra and Logic. Conference in Honour of the 60th Birthday of Volker Weispfenning, Dolzmann, Seidl, Sturm (eds.). Books on Demand GmbH, 2005.
34. K. Ehrhardt und M. C. Steinbach. Nonlinear optimization in gas networks. In H. G. Bock, E. Kostina, H. X. Phu und R. Rannacher, Hrsg., *Modeling, Simulation and Optimization of Complex Processes*, 139–148, Springer, 2005.
35. A. Eisenblätter und H.-F. Geerdes, *A novel view on cell coverage and coupling for UMTS radio network evaluation and design*, Proc. INOC'05 (Lisbon, Portugal), ENOG, March 2005, 7–14.



36. A. Eisenblätter, H.-F. Geerdes, A. Munna und R. Verdone, *Comparison of models for WCDMA downlink capacity assessment based on a MORANS reference scenario*, Proc. VTC-2005 Spring (Stockholm, Sweden), IEEE, May 2005.
37. A. Eisenblätter, H.-F. Geerdes und N. Rochau, *Analytical approximate load control in WCDMA radio networks*, Proc. VTC-2005 Fall (Dallas, TX), IEEE, Sep. 2005.
38. A. Eisenblätter, H.-F. Geerdes und U. Türke, *Public UMTS radio network evaluation and planning scenarios*, Int. J. Mobile Network Design and Innovation **1** (2005), 40–53.
39. C. Enkrich, M. Wegener, S. Linden, S. Burger, L. Zschiedrich, F. Schmidt, J. Zhou, Th. Koschny, and C. M. Soukoulis. *Magnetic metamaterials at telecommunication and visible frequencies*. Phys. Rev. Lett., **95**, 203901, 2005.
40. ESA-MAP-Team AO-99-030. Assessment of bone structure and its changes in microgravity. In A. Wilson, editor, *SP-1290: Microgravity Applications Programme: Successful Teaming of Science and Industry*, Seiten 282–305. European Space Agency, 2005.
41. A. Geschke, U. Kortenkamp, B. Lutz-Westphal, D. Materlik *Visage – Visualization of Algorithms in Discrete Mathematics* Zentralblatt für Didaktik der Mathematik **37** (2005), 395–401
42. M. Grötschel, *In der Mathematik sind sich alle einig und die Gesellschaft hat von ihr nichts zu befürchten: ein Plädoyer*, Wissenschaft Kontrovers: Dokument einer Selbstbefragung über Geld, Kultur und Qualität, Chronos, Edition Collegium Helveticum, 2005.
43. M. Grötschel, *MATHEON: Introducing the DFG Research Center “Mathematics for key technologies” in Berlin*, Jahresbericht der Deutschen Mathematiker-Vereinigung, Band 107, Heft 4, pp. 173–196 (2005).
44. M. Grötschel, *Telota baut das elektronische Hirn der Akademie zusammen*, Circular der BBAW, Heft 31, Juni 2005, pp. 34–35.
45. J. Gross, H. Geerdes, A. Wolisz, *On the signaling overhead in dynamic OFDMA wireless systems*, Proc. of 35. Jahrestagung der Gesellschaft für Informatik (Bonn, Germany), September 2005.
46. C. Gruber, A. M. C. A. Koster, S. Orlowski, R. Wessälly und A. Zymolka, *A computational study for Demand-wise Shared Protection*, Proc. DRCN 2005 (Neapel, Italien), Design of Reliable Communication Networks, 2005, S. 421–428.
47. H.-C. Hege, T. Weinkauff, S. Prohaska und A. Hutanu. Towards distributed visualization and analysis of large flow data. *JSME International Journal, Series B*, 48 (2):241–246, 2005.
48. S. Heinz, S. O. Krumke, N. Megow, J. Rambau, A. Tuchscherer und T. Vredeveld, *The Online Target Date Assignment Problem*, Proceedings of the 3rd Workshop on Approximation and Online Algorithms, Lecture Notes in Computer Science, Bd. 3879, Springer, 2005, 230–243.
49. M. O. Heller, G. N. Duda, R. M. Ehrig, H. Schell, P. Seebeck, W. R. Taylor *Muskuloskeletale Belastungen im Schafshinterlauf: Mechanische Rahmenbedingungen der Heilung*. Materialwissenschaft und Werkstofftechnik, 36 (2005), 775–780
50. M. O. Heller, G. N. Duda, C. König, W. R. Taylor, R. Ehrig, S. Hinterwimmer, H. Graichen, *Validation of a new model of human knee kinematics against in vivo data under*

- physiologic neuromuscular activation patterns*. 51th Annual Meeting of the Orthopedic Society, Washington, 2005.
51. M. O. Heller, G. N. Duda, C. König, W. R. Taylor, R. Ehrig, S. Hinterwimmer, H. Graichen, *Validation of a new model of human knee kinematics against in vivo data in 12 subjects*. combined DGfB/Biomechanica conference, Hamburg 2005
  52. I. V. Hicks, A. M. C. A. Koster und E. Kolotoğlu, *Branch and tree decomposition techniques for discrete optimization*, TutORials 2005 (J. C. Smith, Hg.), INFORMS Tutorials in Operations Research Series, INFORMS Annual Meeting, 2005, S. 1–29.
  53. K. Hildebrandt, K. Polthier und M. Wardetzky. On the convergence of metric and geometric properties of polyhedral surfaces. ZIB Preprint ZR-05-24, 2005.
  54. K. Hildebrandt, K. Polthier und M. Wardetzky. Smooth feature lines on surface meshes. In *Third Eurographics Symposium on Geometry Processing*, Seiten 85–90, 2005.
  55. K. Hildebrandt, K. Polthier und E. Preuß. Evolution of 3d curves under strict spatial constraints. In *IEEE Proceedings on Ninth International Conference on Computer Aided Design and Computer Graphics (CAD/CG 2005)*, Seiten 40–45, 2005.
  56. L. Hodoroaba, A. Imhof, M. Malo, *Das Profil des KOBV-Portals*, Bibliotheksdienst 39. Jg. (2005) 2, S. 216–220.
  57. L. Hodoroaba, *SOAP-interface for MetaLib*, SMUG 4 EU, European Newsletter for SFX/MetaLib Users, Issue 1, May 2005, p. 15.
  58. A. Imhof, *Developed: Metadata exchange parser for MetaLib*, SMUG 4 EU, European Newsletter for SFX/MetaLib Users, Issue 1, May 2005, p. 15.
  59. A. Imhof, *Cannot be without you – why metadata sharing is a must*, SMUG 4 EU, European Newsletter for SFX/MetaLib Users, Issue 2, November 2005, p. 6.
  60. M. Joswig und F. H. Lutz, *One-point suspensions and wreath products of polytopes and spheres*, J. Comb. Theory, Ser. A **110** (2005), 193–216.
  61. R. Kähler, S. Prohaska, A. Hutanu und H.-C. Hege. Visualization of time-dependent remote adaptive mesh refinement data. In *Proc. IEEE Visualization 2005*, Seiten 175–182, Minneapolis, USA, Oktober 2005.
  62. F. Kälberer, K. Polthier, U. Reitebuch und M. Wardetzky. *FreeLence – Coding with Free Valences*. Comput. Graph. Forum, Seiten 469–478, 2005.
  63. V. Kaibel, R. Mechtel, M. Sharir und G. M. Ziegler, *The Simplex Algorithm in Dimension Three*, SIAM J. Comput. **34** (2005), 475–497.
  64. T. Kalkbrenner, U. Håkanson, A. Schädle, S. Burger, C. Henkel, V. Sandoghdar. *Optical microscopy using the spectral modifications of a nano-antenna*. Phys. Rev. Lett., 95:00801, 2005.
  65. R. Klose, S. Burger, F. Schmidt, L. Zschiedrich. *A multilevel method for the computation of eigenmodes in 3d photonic crystals*. In *Proceedings of the 5th International Conference on Numerical Simulation of Optoelectronic Devices*, pages 61–62, 2005.
  66. C. Kober, B. Erdmann, C. Hellmich, R. Sader, H.-F. Zeilhofer, *Consideration of Bone Inhomogeneity and Anisotropy in Deformation Analysis of a Human Mandible*, Proc. BMT 2005, 39th Annual Congress of the German Society of Biomedical Engineering (DGBMT) within the VDE, Nuremberg, Germany, Biomedizinische Technik, Vol. 50,

- Supplementary Vol. Users Meeting 2004 – Internationale FEM Technologietage, Nov. 10–12, Dresden.
67. C. Kober, B. Erdmann, C. Hellmich, R. Sader, H.-F. Zeilhofer, *The influence of the periodontal ligament on overall stress/strain profiles of a human mandible: a comparison of the natural teeth and the implant situation*, Int. Congress on FEM Technology, Biomechanics, 2.7.8, pp. 1–10, Proceedings 23rd CADFEM Users' Meeting 2005, Bonn, Germany, CD\_ROM, CADFEM GmbH, Grafing, Germany (eds.).
  68. B. Kolbeck, T. Schmidt-Gönnner, P. May, E. W. Knapp: *Protein structure alignment based on contact maps and secondary structure*. In: Proceedings of the German Conference on Bioinformatics (GCB), 122–123, 2005.
  69. A. M. C. A. Koster, *Wavelength assignment in multifiber WDM networks*, Proc. INOC 2005 (Lissabon, Portugal), International Network Optimization Conference, 2005, S. 60–66.
  70. A. M. C. A. Koster und A. Zymolka, *Linear programming lower bounds for minimum converter wavelength assignment in optical networks*, Proc. INOC 2005 (Lissabon, Portugal), International Network Optimization Conference, 2005, S. 44–51.
  71. A. M. C. A. Koster und A. Zymolka, *On cycles and the stable multi-set polytope*, Discrete Optim. **2** (2005), Nr. 3, 241–255.
  72. A. M. C. A. Koster und A. Zymolka, *Provably good solutions for wavelength assignment in optical networks*, Proc. ONDM 2005 (Mailand, Italien), The 9th IFIP Working Conference on Optical Network Design & Modelling, 2005, S. 335–345.
  73. A. M. C. A. Koster, A. Zymolka, M. Jäger und R. Hülsermann, *Demand-wise shared protection for meshed optical networks*, J. Network Systems Management **13** (2005), Nr. 1, 35–55.
  74. A. M. C. A. Koster, T. Wolle und H. L. Bodlaender, *Degree-based treewidth lower bounds*, Proc. 4th International Workshop on Experimental and Efficient Algorithms WEA 2005 (S. E. Nikolettseas, Hg.), Lecture Notes in Computer Science, Bd. 3503, Springer-Verlag, 2005, S. 101–112.
  75. H. Lamecker, S. Zachow, H. Haberl und M. Stiller. Medical applications for statistical shape models. *Computer Aided Surgery around the Head, Fortschritt-Berichte VDI - Biotechnik/Medizintechnik*, 17 (258):61, 2005.
  76. H. Lamecker, M. Zöckler, H. Haberl, S. Zachow und H.-C. Hege. Statistical shape modeling for craniostylosis planning. In *2nd International Conference Advanced Digital Technology in Head and Neck Reconstruction 2005, Abstract Volume*, Seite 64, Banff, Alberta, 10.–13. März 2005.
  77. C. Lange und K. Polthier. Anisotropic Fairing of Point Sets. *Special Issue of CAGD*, 2005. auch als ZIB-Preprint 05-16 „Anisotropic Smoothing of Point Sets“.
  78. M. López-Fernández, Ch. Lubich, C. Palencia, A. Schädle. *Fast Runge-Kutta approximation of inhomogeneous parabolic equations*. Numer. Math., 102:277–291, 2005.
  79. J. Lügger, *Google and that's it? Some Remarks on the Brave New World of Searching*, SMUG 4 EU, European Newsletter for SFX/MetaLib Users, Issue 1, May 2005, p. 1.
  80. B. Lutz-Westphal *Wie komme ich optimal zum Ziel? Kürzeste-Wege-Algorithmen für Graphen*, Mathematik lehren **129** (2005), 65–61.

81. B. Lutz-Westphal *Mit angewandter diskreter Mathematik neue (Denk-)Wege gehen* Beiträge zum Mathematikunterricht (2005), 360–363.
82. P. May, B. Kallies, T. Steinke: *Theseus – A parallel threading core for highthroughput protein structure prediction*. In: Proceedings of the 7th Congress of the World Association of Theoretically Oriented Chemists (WARTOC), 196, Januar 2005.
83. P. May, F. Krause, C. Ehrlich, J. Maaskola, T. Steinke: *ZIB threading pipeline – A webservice-based, distributed structure prediction workflow*. In: Proceedings of the German Conference on Bioinformatics (GCB), 125–126, 2005.
84. E. Nkenke, G. Häusler, F. W. Neukam und S. Zachow. Streak artifact correction of CT data by optical 3d imaging in the simulation of orthognathic surgery. In *Computer Assisted Radiology and Surgery (CARS)*, Berlin 22.–25. Juni 2005.
85. E. Nkenke, S. Zachow, G. Häusler und F. W. Neukam. Fusion von optischen 3D- und CT-Daten des Gebisses zur Metallartefaktkorrektur vor computerassistierter Planung MKG-chirurgischer Eingriffe. In *Symposium der Arbeitsgemeinschaft für Kieferchirurgie*, Bad Homburg v.d.H, 5.–6. Mai 2005.
86. Norddeutscher Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HRLN). *Wissenschaftliche Projekte auf dem HLRN-System 2003–2005*, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) und Regionales Rechenzentrum für Niedersachsen (RRZN), Hrsg. Red.: Wolfgang Baumann, Peter Endebrock, 2005.
87. S. Orlowski and R. Wessäly, *Comparing Restoration Concepts using Optimal Network Configurations with Integrated Hardware and Routing Decisions*, Journal of Network and Systems Management 13(1):99–118, März 2005
88. K. Polthier. Computational aspects of discrete minimal surfaces. In J. Hass, D. Hoffman, A. Jaffe, H. Rosenberg, R. Schoen und M. Wol (Hrsg.), *Global Theory of Minimal Surfaces, Proc. of the Clay Mathematics Institute Summer School, CMI/AMS*, 2005.
89. K. Polthier, Discrete Curvature and Surface Optimization. In Reiko Miyaoka and Kotaro Yamada, editors, *Integrable Systems, Geometry and Visualization*. 2005.
90. S. Prohaska und A. Hutanu. Remote data access for interactive visualization. In *13th Annual Mardi Gras Conference: Frontiers of Grid Applications and Technologies*, Seiten 17–22, 2005.
91. T. Röblitz, A. Reinefeld: *Co-Reservation with the Concept of Virtual Resources*. In Proceedings of the 5th IEEE International Symposium on Cluster Computing and the Grid, Cardiff, Wales, UK, 09.–12. Mai 2005.
92. T. Röblitz, F. Schintke, A. Reinefeld: *Resource Reservations with Fuzzy Requests*. Concurrency and Computation: Practice and Experience, 2005.
93. W. Röhricht und M. Clasen. Multum, non multi – Hierarchische BitTrees bei der Pflanzenverteilung mit oik. In J. Wittmann and N.X. Thinh, editors, *Simulation in Umwelt- und Geowissenschaften. Workshop Dresden 2005*, Aachen, 2005. Shaker.
94. J. Rolia, L. Cherkasova, M. Arlitt, A. Andrzejak: *A Capacity Management Service for Resource Pools*. In Proceedings of the Fifth International Workshop on Software and Performance (WOSP2005), Palma de Mallorca, Spain, 11–14 Juli 2005.

95. P. van Roy, A. Ghodsi, S. Haridi, J.-B. Stefani, T. Coupaye, A. Reinefeld, E. Winter, R. Yap: *Self Management of Large-Scale Distributed Systems by Combining Peer-to-Peer Networks and Components*. Institute on System Architecture, CoreGRID Technical Report, TR-0018, 14. Dezember, 2005.
96. B. Rusch, *Let's talk – Instead of an Editorial*, SMUG 4 EU, European Newsletter for SFX/MetaLib Users, Issue 1, May 2005, p. 2.
97. B. Rusch, *IGLU – Just another Acronym?*, SMUG 4 EU, European Newsletter for SFX/MetaLib Users, Issue 1, May 2005, p. 14.
98. B. Rusch, L. Koster, *On death, Google and Karaoke*, SMUG 4 EU, European Newsletter for SFX/MetaLib Users, Issue 2, May 2005, p. 1.
99. J. Sahner, T. Weinkauff und H.-C. Hege. Galilean invariant extraction and iconic representation of vortex core lines. In K. Joy K. Brodlie, D. Duke (Hrsg.), *Proc. Eurographics/IEEE VGTC Symposium on Visualization (EuroVis '05)*, Leeds, UK, June 2005.
100. P. Sapiro, J. Skovhus Thomsen, S. Prohaska, A. Zaikin, J. Kurths, H.-C. Hege und W. Gowin. Quantification of spatial structure of human proximal tibial bone biopsies using 3d measures of complexity. *Acta Astronautica*, 56(9–12):820–830, 2005.
101. F. Schmidt, S. Burger, A. Schädle, R. Klose. *Finite element methods for optical device design*. In *Proceedings of the 5th International Conference on Numerical Simulation of Optoelectronic devices*, pages 57–58, 2005
102. J. Schmidt-Ehrenberg und H.-C. Hege. Visual analysis of molecular conformations by means of a dynamic density mixture model. In *Computational Life Sciences: First International Symposium, CompLife 2005, Lecture Notes on Computer Science Band 3695*, Seiten 229–240, Konstanz, 2005. Springer.
103. T. Schütt, F. Schintke, A. Reinefeld: *Chord#: Structured Overlay Network for Non-Uniform Load Distribution*. Report ZR-05-40, August 2005.
104. W. Sperber, *Suchmaschinen, Strukturierung und Metadaten*, Proceedings: 11. IuK-Tagung „In die Zukunft publizieren“ , 2005, Bonn
105. D. Stalling, M. Westerhoff und H.-C. Hege. Amira: A highly interactive system for visual data analysis. In Charles D. Hansen und Christopher R. Johnson (Hrsg.) *The Visualization Handbook*, Kapitel 38, Seiten 749–767. Elsevier, 2005.
106. H. Stüben, S. Wollny: *Transnational Access to Mass Storage Capacity for Computational QCD*. Proceedings of Science LAT2005 (2005) 109.
107. 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, 23 (2005), 726–734
108. W. R. Taylor, J.-P. Kassi, J. Schwarzkopf, R. Ehrig, H. Schell, G.N. Duda. *The Profile of Mechanical Loading is Independent of Fracture Fixation Principle*. 51th Annual Meeting of the Orthopedic Society, Washington, 2005
109. W. R. Taylor, R. Ehrig, M.O. Heller, H. Schell, P. Seebeck, G.N. Duda. *Animal Models for Knee Injury Frequently Underestimate the Mechanical Conditions of the Clinical Situation*. 51th Annual Meeting of the Orthopedic Society, Washington, 2005

110. H. Theisel, J. Sahner, T. Weinkauff, H.-C. Hege und H.-P. Seidel. Extraction of parallel vector surfaces in 3d time-dependent fields and application to vortex core line tracking. In *Proc. IEEE Visualization 2005*, Minneapolis, USA, Oktober 2005.
111. H. Theisel, T. Weinkauff, H.-C. Hege und H.-P. Seidel. Topological methods for 2d time-dependent vector fields based on stream lines and path lines. *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*, 11(4), Juli–August 2005.
112. J. Skovhus Thomsen, A. Laib, B. Koller, S. Prohaska, L. Mosekilde und W. Gowin. Stereological measures of trabecular bone structure: comparison of 3d micro computed tomography with 2d histological sections in human proximal tibial bone biopsies. *Journal of Microscopy*, 218:171–179, 2005.
113. S. Trissl, K. Rother, H. Muller, T. Steinke, I. Koch, R. Preissner, C. Froemmel, U. Leser: *Columba: an integrated database of proteins, structures, and annotation*. BMC Bioinformatics, 6(1):81–92, 2005.
114. M. Wardetzky. Convergence of the cotan formula – An overview. Preprint, ZIB, 2005. To appear in *Discrete Differential Geometry* (A. I. Bobenko, John M. Sullivan, Peter Schröder, Günter Ziegler, Hrsg.), Oberwolfach Seminars, Birkhäuser Basel’.
115. M. Weber und S. Kube, *Robust Perron Cluster Analysis for Various Applications in Computational Life Science*, Computational Life Sciences, First International Symposium, CompLife 2005, Konstanz, Germany, September 25–27, 2005, Proceedings, pp. 57–66, Lecture Notes in Computer Science 3695. Springer
116. M. Weber, W. Rungtarityotin und A. Schliep, *An Indicator for the Number of Clusters Using a Linear Map to Simplex Structure*, From Data and Information Analysis to Knowledge Engineering Proceedings of the 29th Annual Conference of the Gesellschaft für Klassifikation e.V., Universität Magdeburg, März 2005, pp. 103–110, Studies in Classification, Data Analysis, and Knowledge Organization, Eds. M. Spiliopoulou, R. Kruse, C. Borgelt, A. Nürnberger und W. Gaul
117. T. Weinkauff, H. Theisel, K. Shi, H.-C. Hege und H.-P. Seidel. Topological simplification of 3d vector fields by extracting higher order critical points. In *Proc. IEEE Visualization 2005*, Minneapolis, USA, Oktober 2005.
118. M. Weiser, *Interior point methods in function space*, SIAM J. Control Opt. **44**(5):1766–1786, 2005.
119. M. Weiser, A. Schiela, P. Deuffhard: *Asymptotic Mesh Independence of Newton’s Method Revisited*. SIAM J. Numer. Anal. **42** (5), pp. 1830–1845 (2005).
120. T. H. Wenckeback, H. Lamecker und H.-C. Hege. Capturing anatomical shape variability using b-spline registration. In Gary E. Christensen und Milan Sonka (Hrsg.), *Information Processing in Medical Imaging: 19th International Conference (IPMI 2005)*, Lecture Notes in Computer Science Band 3565/2005, Seite 578, Glenwood Springs, CO, USA, 10.–15. Juli 2005. Springer-Verlag GmbH.
121. J. Wendler, F. Schintke: *Executing and observing CFD applications on the Grid*. Future Generation Computer Systems the International Journal of Grid Computing: Theory, Methods and Applications (FGCS), 21(1), 11.–18. Januar 2005.
122. A. Werner, O. Deussen, J. Döllner, H.-C. Hege, P. Paar und J. Rekitke. *Lenné3D walking through landscape plan*. In E. Buhmann, P. Paar, I. Bishop und E. Lange

- (Hrsg.) *Trends in Real-Time Landscape Visualization and Participation*, Seiten 48–59. Wichmann Verlag, 2005.
123. R. Wessälly, S. Orlowski, A. Zymolka, A. M. C. A. Koster und C. Gruber, *Demand-wise Shared Protection revisited: A new model for survivable network design*, Proc. INOC 2005 (Lissabon, Portugal), International Network Optimization Conference, 2005, S. 100–105.
124. A. Westermark, S. Zachow und B. Eppley. 3d osteotomy planning in maxillofacial surgery, including 3d soft tissue prediction. *Journal of Craniofacial Surgery*, 16(1):100–104, 2005.
125. S. Zachow, H.-C. Hege und 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, Abstract 33*, Seite 64, 2005.
126. S. Zachow, H. Lamecker, B. Elsholtz und M. Stiller. Reconstruction of mandibular dysplasia using a a statistical 3d shape model. In *Proc. Computer Assisted Radiology and Surgery (CARS)*, Seiten 1238–1243, Berlin, 22.–25. Juni 2005.
127. S. Zachow, M. Weiser, H.-C. Hege und P. Deuffhard. Soft tissue prediction in computer assisted maxillofacial surgery planning: A quantitative evaluation of histomechanical modeling using pre- and postoperative ct-data. In Y. Payan (Hrsg.), *Biomechanics Applied to Computer Assisted Surgery*, Kapitel 17, Seiten 277–298. Research Signpost Publisher, 2005.
128. L. Zschiedrich, S. Burger, R. Klose, A. Schädle, F. Schmidt. *JCMmode: An adaptive finite element solver for the computation of leaky modes*. In Y. Sidorin and C. A. Wächter, editors, *Integrated Optics: Devices, Materials, and Technologies IX*, volume 5728, pages 192–202. Proc. SPIE, 2005.
129. L. Zschiedrich, S. Burger, A. Schädle, F. Schmidt. *Domain Decomposition Method for Electromagnetic Scattering Problems: Application to EUV Lithography*. In *Proceedings of the 5th International Conference on Numerical Simulation of Optoelectronic Devices*, pages 55–56, 2005.

## 5.4 Monographien

1. P. Deuffhard: *Newton Methods for Nonlinear Problems. Affine Invariance and Adaptive Algorithms*. Reprint authorized by Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York (for sale in the People’s Republic of China only and not for export therefrom) sciencep, 2005.
2. M. Jünger und V. Kaibel (Hg.), *Integer Programming and Combinatorial Optimization (Proc. IPCO XI, June 2005, Berlin)*, LNCS Vol. 3509, Springer, 2005.
3. P. M. A. Sloot, A. G. Hoekstra, T. Priol, A. Reinefeld, M. Bubak, (Hrsg.): *Advances in Grid Computing - EGC 2005*. Revised Selected Papers, Springer LNCS, Vol. 3470, European Grid Conference, Amsterdam, Niederlande, 2005.
4. M. Cosnard, V. Getov, D. Laforenza, A. Reinefeld (Hrsg.): *Future Generation Grids*. Dagstuhl Seminar Proceedings, Vol. 04451, 2005.  
<http://drops.dagstuhl.de/opus/volltexte/2005/26/>
5. V. Getov, D. Laforenza, A. Reinefeld (Hrsg.): *Future Generation Grids*. Springer-Verlag, ISBN: 0 387 27935-0, 2006.

## 5.5 Dissertationen

### Freie Universität Berlin

**Werner Bengler** (Abt. Visualisierung und Datenanalyse)

*Visualization of General Relativistic Tensor Fields via a Fiber Bundle Data Model*

Betreuer: Peter Deuffhard (FU Berlin und ZIB)

**Ralf Kähler** (Abt. Visualisierung und Datenanalyse)

*Accelerated Volume Rendering on Structured Adaptive Meshes*

Betreuer: Peter Deuffhard (FU Berlin und ZIB)

### Technische Universität Berlin

**Stefan Zachow** (Abt. Visualisierung und Datenanalyse)

*Computergestützte Osteotomieplanung in der Mund-Kiefer-Gesichtschirurgie unter Berücksichtigung der räumlichen Weichgewebeanordnung*

Betreuer: Heinz U. Lemke (Fakultät IV – Elektrotechnik und Informatik)

### Universidad de Buenos Aires

**Javier L. Marengo** (Abt. Optimierung)

*Chromatic Scheduling Polytopes Coming from the Bandwidth Allocation Problem in Point-to-Multipoint Radio Access Systems*

Betreuer: Martin Grötschel und Annegret Wagler (TU Berlin und ZIB/Universität Magdeburg)

## 5.6 Examensarbeiten

### Freie Universität Berlin

**Roland Böhrenz** (Abt. Computer Science Research)

*Verteiltes Rechnen in der Bioinformatik*

Betreuer: Thomas Steinke (ZIB)

**Anika Exner** (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

*Vergleich von 2D- und 3D-Ähnlichkeitsdeskriptoren am Beispiel von HIV-Protease-Inhibitoren*

Betreuer: Frank Cordes (ZIB)



**René Heek** (Abt. Computer Science Research)

*Entwurf und Implementation von Grid-Diensten zur Verwaltung von Dateien, Aufträgen und Arbeitsabläufen in der Bioinformatik*

Betreuer: Alexander Reinefeld (HU und ZIB)

**Benjamin Kettner** (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

*Ein Algorithmus zur prismatoidalen Diskretisierung von unbeschränkten Außenräumen in 2D und 3D unter Einhaltung von Nebenbedingungen*

Betreuer: Frank Schmidt (ZIB)

**Falko Krause** (Abt. Computer Science Research)

*Implementation of Web Services for the ZIB Protein Structure Prediction Pipeline*

Betreuer: Thomas Steinke (ZIB)

**Christiane Krüger** (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

*Bindung von Serum-Albumin basierend auf 3D-Strukturvergleich*

Betreuer: Frank Cordes (ZIB)

**Jörg Meltzer** (Abt. Computer Science Research)

*Vergleich von Co-Reservierungsalgorithmen in Grid-Umgebungen*

Betreuer: Alexander Reinefeld (HU und ZIB)

**Holger Meyer** (Abt. Abteilung Numerische Analysis und Modellierung)

*Die Implementierung und Analyse von HuMFree – einer gitterfreien Methode zur Konformationsanalyse von Wirkstoffen*

Betreuer: Frank Cordes (ZIB)

**Timo Rößner** (Abt. Computer Science Research)

*Fragment-Bibliothek für Threading-Methoden*

Betreuer: Thomas Steinke (ZIB)

**Daniel Ruprecht** (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

*Konstruktion transparenter Randbedingungen für die Wellengleichung mit Hilfe der Polbedingung*

Betreuer: Frank Schmidt (ZIB)

### **Humboldt-Universität zu Berlin**

**Tom Lichtenstein** (Abt. Computer Science Research)

*Implementation eines Ressourcenbrokers im Kontext eines Grid-Datenmanagement-Systems*

Betreuer: Alexander Reinefeld (HU und ZIB)

**Jochen Witte** (Abt. Computer Science Research)

*Implementierung einer NFS-Schnittstelle im Kontext eines Grid-Datenmanagement-Systems*

Betreuer: Alexander Reinefeld (HU und ZIB)

### **Technische Universität Berlin**

**Nadine Abboud** (Abt. Optimierung)

*Kombinatorische Optimierungsprobleme bei der Leiterplattenherstellung*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

- Malte Clasen** (Abt. Visualisierung und Datenanalyse)  
*Beleuchtung von Landschaften in interaktiver Darstellung*  
Betreuer: Heinz U. Lemke (FU Berlin), Hans-Christian-Hege (ZIB)
- Minor Gordon** (Abt. Computer Science Research)  
*Staged Design for Highly Concurrent Web Servers*  
Betreuer: Alexander Reinefeld (HU Berlin und ZIB)
- Stefan Heinz** (Abt. Optimierung)  
*Policies for Online Target Date Assignment Problems: Competitive Analysis versus Expected Performance*  
Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)
- Christoph Hornung** (Abt. Optimierung)  
*Zählen von Gitter-Triangulierungen in der Ebene*  
Betreuer: Volker Kaibel (TU Berlin)
- Felix Kälberer** (Abt. Visualisierung und Datenanalyse)  
*Geometry and Connectivity Compression of Triangle Meshes*  
Betreuer: Konrad Polthier (ZIB), Günter Ziegler (TU Berlin)
- Karoline Kubatzki** (Abt. Optimierung)  
*Komplementär total unimodulare Matrizen, zugehörige Matroide und deren Zyklenspolytope*  
Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)
- Christian Marwitz** (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)  
*Numerische Berechnung von modifizierten Blochmoden in der Bandlücke periodischer Strukturen*  
Betreuer: Frank Schmidt (ZIB)
- Marika Neumann** (Abt. Optimierung)  
*Mathematische Preisplanung im ÖPNV*  
Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)
- Mathias Nieser** (Abt. Visualisierung und Datenanalyse)  
*Diskrete Minimalflächen über Vierecksgittern*  
Betreuer: Konrad Polthier (ZIB)
- The Anh Pham** (Abt. Computer Science Research)  
*Einbettung neuer Verwaltungsmethoden in die hierarchische Dateisystemsicht*  
Betreuer: Alexander Reinefeld (HU und ZIB)
- Christian Raack** (Abt. Optimierung)  
*Employing Mixed-Integer Rounding in Telecommunication Network Design*  
Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)
- Anke Reuter** (Abt. Optimierung)  
*Kombinatorische Auktionen und ihre Anwendungen im Schienenverkehr*  
Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)
- Rüdiger Stephan** (Abt. Optimierung)  
*Polytopes Associated with Length Restricted Directed Circuits*  
Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

**Thomas Thevis** (Abt. Optimierung)

*Efficient survivable reconfiguration in SDH networks*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

**Universität Hamburg**

**Imbo Sim** (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

*Analysis und Numerik der Resonanzen des Schrödinger-Operators in 1D*

Betreuer: Frank Schmidt (ZIB)

**Berufsakademie Berlin**

**Sebastian Schilling** (Abt. IT Services)

*Untersuchung vorhandener Storage-Management-Software und Implementierung eines adäquaten Systems*

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)

## KARDOS

KARDOS löst nichtlineare parabolische partielle Differentialgleichungen in 1D, 2D oder 3D. Es wird die Rothe-Methode verwendet, um die Adaptivität in Zeit und Ort zu implementieren. Als adaptiver Ortslöser wird der FEM-Baukasten KASKADE 2.0 verwendet. Für die Zeitdiskretisierung werden linear-implizite Einschrittmethoden vom Rosenbrock-Typ verwendet. Das Programm ist in Standard-C kodiert.

**Ansprechpartner:** Bodo Erdmann (erdmann@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

*amira* ist ein modulares, objektorientiertes Softwaresystem mit vielfältigen Funktionen zur Bildverarbeitung, Geometrie-Rekonstruktion und Visualisierung. Das System verfügt über eine leicht bedienbare grafische Benutzeroberfläche 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. Im Herbst 2005 wurde *amira* 4.0 veröffentlicht, welches wesentliche Neuerungen enthält. Es werden folgende Betriebssysteme unterstützt:

- Windows 2000/XP, 32-bit code
- Windows XP 2003 x64 Edition (5.2) 64-bit code (AMD64-compatible processors only)
- Linux x86 (Red Hat Enterprise Linux 3.0) 32-bit code
- Linux Itanium 64 bit (Red Hat Enterprise Linux 3.0)
- Linux AMD 64 (Red Hat Enterprise Linux 3.0)
- Mac OS X Tiger (10.4) 32-bit code
- 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

Neu hinzugekommen sind die Unterstützung für Windows in der 64-bit-Version und für Mac OS X. Neben einem überarbeiteten Nutzerinterface wurde viel Wert auf eine verbesserte Unterstützung großer Datenmengen gelegt. So kann auf 64-bit Rechnern nun der gesamte Hauptspeicher adressiert werden.

Das Gesamtpaket wurde in mehrere Teile aufgespalten, die auf einzelne Anwendungsfelder zugeschnitten sind. Neben der Standardversion **amira 4.0 standard**, steht **amira Large Data Pack** zur Visualisierung besonders großer Daten bereit. **amira Quantification+** pack bietet erweiterte Funktionen zur Bildanalyse. **amira Mesh Pack** enthält Module zur Vor- und Nachverarbeitung von Finite-Element-Gittern. Molekulare Strukturen und visuelle Konformationsanalyse ist im **amira Molecular pack** enthalten. Das **amira Developer Pack** bietet eine C++-Schnittstelle, die es erlaubt, **amira** durch um eigene Funktionalität zu erweitern. Multisegment- und Mehrwand-Displaysystem, wie z. B. das 3-Wand-Stereoprojektionssystem („Portal“) des MATHEON, werden durch das **amira VR Pack** angesteuert. Gebräuchliche Dateiformate aus dem CAD- und CAE-Bereich (**amira CAD readers**, **amira CAE readers**, der Medizin (**amira Dicom reader**) und der Geowissenschaften (**amira SEG-Y reader**) werden durch Zusatzmodule eingebunden. Durch **ResolveRT Skeletonization Pack** wird die Merkmalsextraktion aus großen biomedizinischen Daten angeboten.

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

**Ansprechpartner:** Steffen Prohaska ([prohaska@zib.de](mailto:prohaska@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 im Rahmen der Kooperation mit der Tebis AG, der mental images GmbH und der Daimler-Chrysler AG statt. 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 ausgewählten **JavaView**-Modulen wurde im Jahr 2005 von MuPad/SciFace unterstützt.

Aktuelle Informationen finden sich unter <http://www.javaview.de>).

**Ansprechpartner:** Konrad Polthier ([polthier@mi.fu-berlin.de](mailto:polthier@mi.fu-berlin.de))

## 6.3 Optimierung

### CS-OPT

CS-OPT ist ein mathematisches Optimierungstool zur Pairingbildung im Luftverkehr. Es erlaubt die Planung von Pairings ganzer Flugzeugbesatzungen unter Beachtung von komplexen Regelwerken und Kapazitätsbedingungen.

CS-OPT ist in das kommerzielle Planungssystem NetLine/Crew der Lufthansa Systems Berlin GmbH integriert. Die Entwicklung wurde teilweise von der Lufthansa Systems Berlin GmbH finanziert.

**Ansprechpartner:** Ralf Borndörfer (borndoefer@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 (borndoefer@zib.de), Andreas Löbel (loebel@zib.de), Steffen Weider (weider@zib.de)

### SoPlex

SoPlex ist eine Implementierung des revidierten Simplexverfahrens. Es beinhaltet sowohl primale als auch duale Lösungsroutinen und ist als Klassenbibliothek (C++) implementiert.

SoPlex kann als Unterroutine 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 *Paralleler und Objektorientierter Simplex-Algorithmus* (Report 96-09) entwickelt.

Der Code wird derzeit ständig in Zusammenarbeit und im Auftrag von Lizenznehmern 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.

Der Code wurde in diesem Jahr weiter gepflegt und besonders eingesetzt um die exakten Lösungswerte für Testsets zu bestimmen, die bei der Weiterentwicklung von `SoPlex` (Seite 214) benötigt werden.

`perPlex` ist online verfügbar unter <http://www.zib.de/koch/perplex>.

**Ansprechpartner:** Thorsten Koch (koch@zib.de)

### Modellierungssprache Zimpl

`Zimpl` ist eine Programmiersprache zur Modellierung von Problemen mittels linearer (LP) oder gemischt-ganzzahliger Programme (MIP). Das Ergebnis wird als MPS-Datei oder LP-Datei ausgegeben und kann dann von gängigen LP-Lösern wie z. B. `SoPlex` (Seite 214) und MIP-Lösern (siehe Projekt *Gemischt-Ganzzahlige Programmierung*) verarbeitet werden.

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

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

Man erhält dann die zugehörige MPS-Datei:

```

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

```

`Zimpl` wurde auch dieses Jahr wieder in mehreren Projekten und Vorlesungen erfolgreich eingesetzt, insbesondere bei der Blockvorlesung *Combinatorial Optimization at Work*. Das Programm wird weiterhin entsprechend den Anforderungen in den Projekten weiterentwickelt. In 2005 wurden wesentliche Teile von `Zimpl` in eine Programmbibliothek umgewandelt, so dass eine einfache Integration in den MIP-Löser `SCIP` (Seite 216) möglich wurde.

`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, die 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 zehn Jahren ihre Netze qualitativ hochwertiger – 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)

## 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 Probleminstanz 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 0.81 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

### Verfahren für 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), Technische Universität Prag (Tschechien) und Academia Sinica (Beijing, PR China) sowie Software-Händler in Japan, Korea und Polen.

An vielen Modulen wurden im Berichtszeitraum wesentliche Erweiterungen vorgenommen und Fehler korrigiert. Die aktualisierten Versionen sind Bestandteil der aktuellen REDUCE-Version 3.8. In Zusammenarbeit mit den Kollegen in Passau wurde die Benutzerschnittstelle überarbeitet, insbesondere das auf TeXMacS basierende Interface, vgl. <http://www.texmacs.org>

BOOLEAN	Boolesche Algebra (H. Melenk)
DEFINT	Bestimmte Integrale, auch mit unendlichem Intervall (W. Neun, K. Gaskell, S. Kameny)
FPS	Differentialgleichungen und symbolische Potenzreihen (W. Neun, W. Koepf)
GNUPLOT	Interface zum Grafikpaket GNUPLOT (H. Melenk)
GROEBNER	Gröbner-Basen und Lösen algebraischer Gleichungssysteme (H. Melenk, H. M. Möller, W. Neun)
IDEALS	Rechnen in polynomialen Idealen (H. Melenk)
INEQ	Lösen linearer Ungleichungssysteme (H. Melenk)
LINALG	Diverse Funktionen aus der linearen Algebra (M. Rebeck)
MATHML	Interface zu MathML (L. Alvarez)
MSOLVE	Lösen modularer Gleichungen und Systeme (H. Melenk)
NCPOLY	Nichtkommutative Polynome (H. Melenk, J. Apel)
NORMFORM	Normalformen von Matrizen (M. Rebeck, T. Moulders)
NUMERIC	Numerische (approximative) Algorithmen (H. Melenk)
QSUM	Summation von q-hypergeometrischen Termen (H. Böing, W. Koepf)
RATINT	Rationale Integration (N. Langmead)
RATAPRX	Rationale Approximation (L. Temme, W. Koepf)
REACTION	Chemische Reaktionssysteme (H. Melenk)
RDEBUG	Debug im Algebraischen Mode (H. Melenk)
RESIDUE	Berechnung von Residuen (W. Koepf)
SINGULAR	Auffinden von Singularitäten (D. Waugh)
SPARSE	Sparse-Matrizen (S. Scowcroft)
SPECFN	Spezielle Funktionen (W. Neun, C. Cannam et al.)
SYMMETRY	Blockdiagonalformen symmetrischer Matrizen (K. Gatermann)

TAYLOR	Multivariate abgebrochene Taylorreihen (R. Schöpf)
TRIGINT	Trigonometrische Integration (N. Langmead)
TRIGSIMP	Simplifikation von trigonometrischen Ausdrücken (W. Koepf, H. Melenk, A. Bernig)
ZEILBERG	Symbolische Summation (W. Koepf, G. Stölting)
ZTRANS	Z-Transformation und inverse Z-Transformation (W. Koepf, L. Temme)

**Ansprechpartner:** Winfried Neun (neun@zib.de)

## 6.5 Computer Science

### **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 des Rechenzeitaufwands zur 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. Beim Deutschen Wetterdienst wird `dmscp2` für den gesamten Datentransfer zum und aus dem Datenarchiv eingesetzt.

Im Jahr 2005 wurde `dmscp2` mit einigen neuen Eigenschaften ausgestattet. Zusätzlich zur Aufteilung des Datenstroms in mehrere Ströme in einem Netz kann jetzt der Datenstrom auch in mehrere Netze verteilt werden, was Bandbreite spart. Messungen haben ergeben, dass z. B. bei einem Transfer zwischen San Diego und Berlin gegenüber `ftp` ein 40-facher Geschwindigkeitsgewinn erreicht werden kann. Bei Verteilung der Datenströme auf zwei lokale Gigabit-Subnetze wurden 89% der aggregierten Peak-Performance beider Subnetze gemessen.

`dmscp2` hat in der aktuellen Version ein Interface zum Erstellen eines GUI (Graphical User Interface). Neben den Quellen und der Man Page steht jetzt auch ein ausführliches User Manual im WEB zur Verfügung.

Aktuelle Informationen und die Quellen finden sich unter: <http://mss.zib.de/mss>.

**Ansprechpartner:** Manfred Stolle (stolle@zib.de)

### **MetaLooper – ein Framework für die Konfiguration und Durchführung von Batch-experimenten**

MetaLooper ist ein Java/XML-basiertes Framework, das die Durchführung und Konfiguration von numerischen Experimenten (Simulationen) vereinfacht. Bei solchen Experimenten handelt es sich häufig um sogenannte *Parameter sweeps*, bei denen eine große Anzahl von

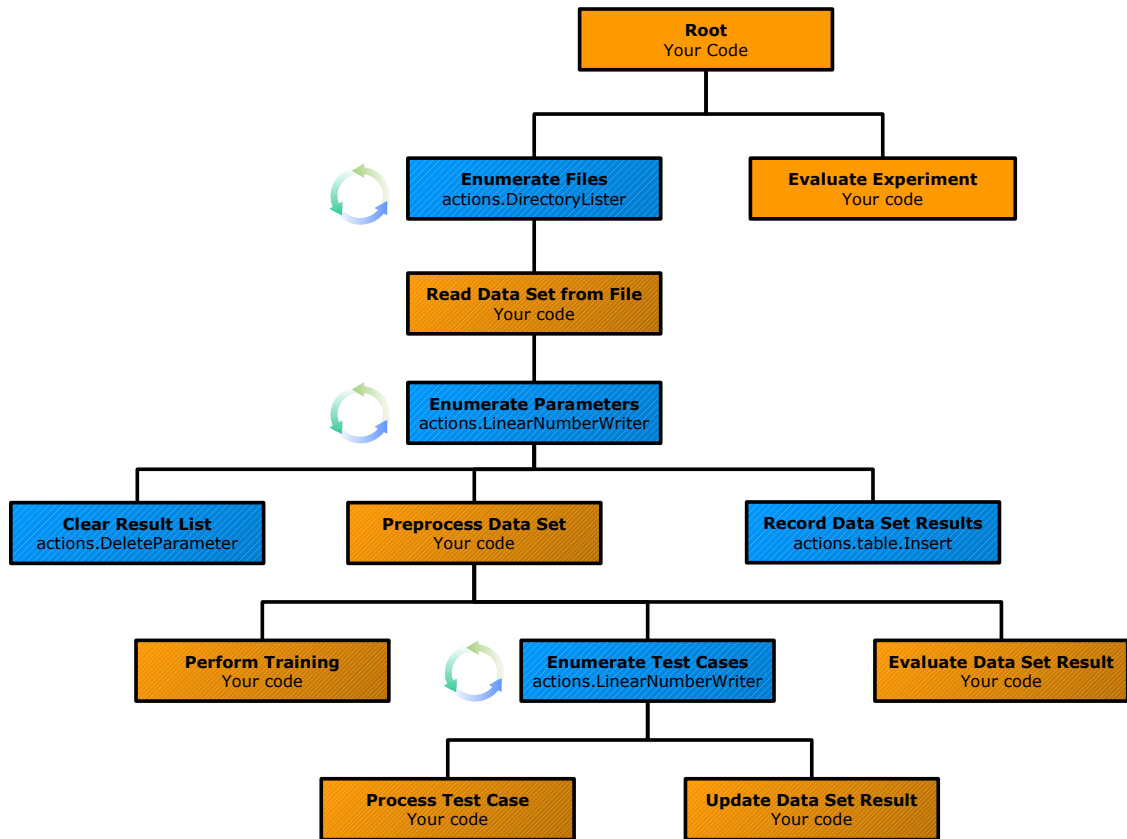


ABBILDUNG 6.1: Beispiel eines Baumes von Codekomponenten, die von MetaLooper ausgeführt werden.

Parameterkombinationen durchprobiert wird. Die Praxis zeigt, dass die Spezifikation dieser Kombinationen möglichst einfach und ohne Codeänderungen erfolgen soll, um diese z. B. in Abhängigkeit von bereits durchgeführten Experimenten schnell anpassen zu können. Eine weitere gewünschte Eigenschaft eines solchen Experiment-Frameworks ist die Möglichkeit des unkomplizierten Zusammenstellens einzelner Komponenten (z. B. Algorithmen), um neue Szenarien testen zu können.

MetaLooper unterstützt beide Anforderungen, wobei die Beschreibung eines Experimentverlaufs mit Hilfe eines XML-basierten Skripts geschieht. Dieses vom Benutzer editierte Skript spezifiziert Parameter, Schleifen über diese Parameter, eingesetzte Java-Codekomponenten, sowie die Ausgabeart einer Experimentdurchführung. Dabei werden die einzelnen Codekomponenten zu einem Baum angeordnet, der durch einen modifizierten Tiefensuchalgorithmus abgearbeitet wird. Beim Besuch eines Baumknotens werden die benötigten Parameter bereitgestellt und der vom Benutzer angegebene Code ausgeführt (s. Abbildung 6.1). Die Implementierung der Schleifen wird dadurch erreicht, dass jeder der Teilbäume wiederholt ausgeführt werden kann, bevor die Tiefensuche zu dem „Eltern-Knoten“ zurückkehrt.

Durch die hohe Universalität kann diese Software auch in anderen Forschungsbereichen für

parametrische Studien oder für die schnelle Integration mehrerer Java-basierter Komponenten eingesetzt werden. Neben den Quellen steht auch ein Tutorium im Web zur Verfügung.

Weitere Informationen unter <http://www.zib.de/CSR/Software/>.

**Ansprechpartner:** Artur Andrzejak (andrzejak@zib.de)

### libfalls – Bibliothek zur Extraktion regelmäßiger Subsamples aus Dateien

libfalls ist eine Bibliothek, die es ermöglicht, regelmäßige Subsamples von Dateien zu beschreiben und diese zu extrahieren. Sie wurde von den ZIB-Abteilungen CSR und Visualisierung entwickelt, um niedrig aufgelöste Abbildungen entfernt gespeicherter Voxel-Modelle zu erstellen. Im Rahmen des GridLab-Projektes wurde die Bibliothek genutzt, um mit Hilfe des GridFTP-Protokolls Subsamples aus entfernten Dateien zu extrahieren. Dadurch konnten während der Laufzeit von Grid-Jobs niedrig aufgelöste Zwischenergebnisse effizient extrahiert und zur Überwachung des Fortschritts des Jobs über ein Portal dargestellt werden.

Die Bibliothek wurde in C++ unter Zuhilfenahme der boost-Bibliotheken implementiert und unter der GNU General Public License veröffentlicht.

Weitere Informationen unter <http://www.zib.de/schuett/pitfalls/>.

**Ansprechpartner:** Thorsten Schütt (schuett@zib.de)

### StorageBox

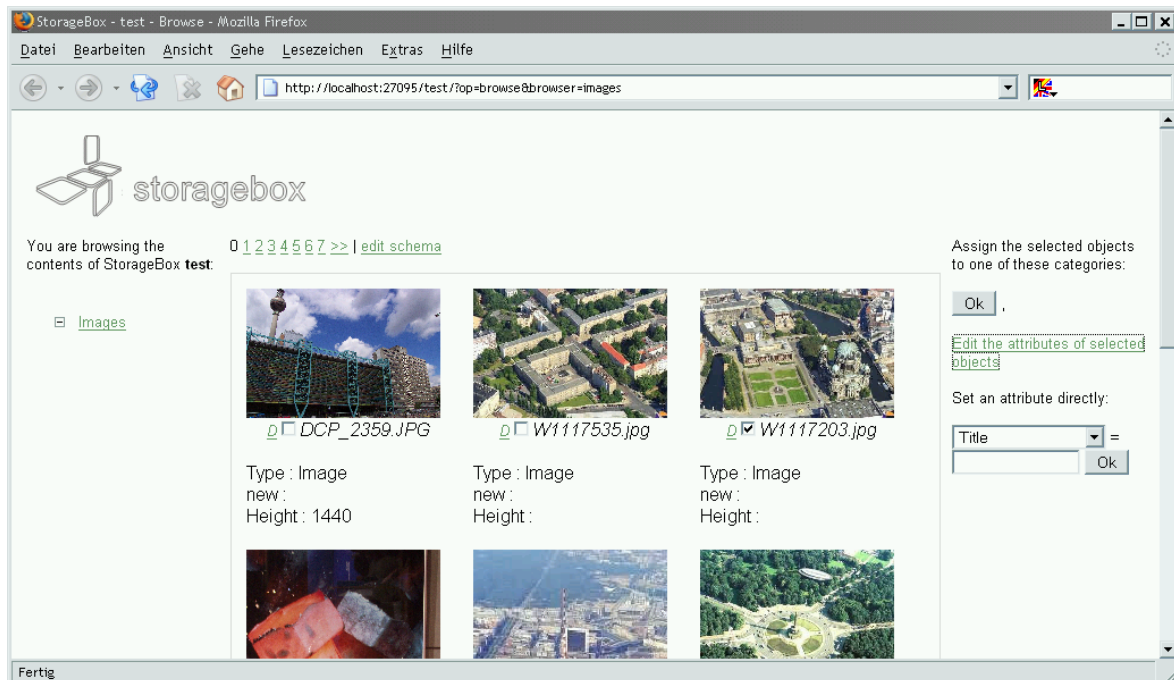


ABBILDUNG 6.2: Die Web Benutzerschnittstelle von StorageBox

Persönliche Daten werden heute meist von Programmen in Dateien auf Festplatten oder in

speziellen Datenbanken 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 (s. Abb. 6.2).

Weitere Informationen unter <http://www.storagebox.org/>.

**Ansprechpartner:** Felix Hupfeld (hupfeld@zib.de)

### Theseus

Die Vorhersage von Proteinstrukturen aufgrund von Sequenzinformationen gehört zu den großen Herausforderungen in den Lebenswissenschaften.

**Theseus** ist ein Framework zur Erkennung des Faltungstyps eines Proteins (*Threading*). Je nach „Grad der Ähnlichkeit“ des strukturell unbekanntes Targetproteins zu bislang bekannten Proteinstrukturen können semi-quantitativ strukturelle und, davon abgeleitet, funktionelle Aussagen zum Targetprotein getroffen werden. Die Targetsequenz wird auf Repräsentanten von Faltungstypen einer Faltungsbibliothek (Template-Datenbank) aligniert, und dieses Alignment wird heuristisch bewertet. Zur Suche des optimalen Sequenz-Struktur-Alignments wird ein Multi-Queue-Branch-and-Bound-Algorithmus benutzt. Das Framework erlaubt eine Integration verschiedener Bewertungsheuristiken und Template-Datenbanken. Die standardmäßig benutzte Bewertungsfunktion enthält Terme, die auf wissensbasierten Potentialen beruhen und die strukturelle Umgebung im Template bewerten, sowie Terme, die die Güte des Alignments von Sekundärstrukturinformationen berücksichtigen.

**Theseus** ist in C++ implementiert und mit MPI parallelisiert.

**Ansprechpartner:** Thomas Steinke (steinke@zib.de)

## 6.6 Informationsdienste

### Math-Net-Informationsserver

Unter der WWW-Adresse <http://www.math-net.org> befindet sich das Portal des Math-Net. Am ZIB selbst werden die Math-Net-Dienste Math-Net-Navigator, Math-Net-Links sowie Math-Net-Software betreut.

**Ansprechpartner:** Wolfgang Dalitz (dalitz@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.

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 jetzt mittlerweile im 13. Jahr. Es wurde 1993 am ZIB entwickelt.

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 in den letzten Jahren aufgebauten Dienste *IMU-Net* und *EWDM* werden weiterhin von der Community positiv angenommen. *IMU-Net* ist der elektronische Rundbrief der IMU. Er dient der weltweiten Verbreitung von Empfehlungen und Entscheidungen der IMU. Den Rundbrief haben über 4.000 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 ca. 1.200 Personen in die Datenbank eingetragen.

**Ansprechpartner:** Wolfgang Dalitz (dalitz@zib.de)

## 6.7 KOBV-Dienste

### Produkte und Dienste der KOBV-Zentrale

Dieser Abschnitt stellt die Produkte und Dienste des KOBV im thematischen Zusammenhang der Leitlinien des KOBV dar, zunächst mit Priorität auf den Nutzer, dann mit Hinblick auf



die Unterstützung der KOBV-Bibliotheken.

Die generelle Leitidee des KOBV stammt aus dem Internet und dem World Wide Web: Auf der Basis von international genormten Protokollen vernetzt der KOBV seine Bibliothekssysteme und Server in einer Art und Weise, die den lokalen Bibliotheken die Freiheit der Wahl ihrer Systeme möglichst weitgehend belässt. Den Bibliotheken fällt damit eine größere Eigenverantwortung zu, als in traditionellen Verbänden. KOBV-Bibliotheken gestalten ihr Angebot, das Portal zu ihren Dienstleistungen und ihre digitale Bibliothek selbst. Sie können dabei in spezifischer Art und Weise auf Anforderungen, die von ihren Nutzern an sie gestellt werden, reagieren. Die KOBV-Bibliotheken werden dabei von der KOBV-Zentrale unterstützt, wo immer dieses sinnvoll und möglich ist. Auf diese Weise bereiten sich die Bibliotheken darauf vor, den steigenden und immer komplexer werdenden Anforderungen der im Entstehen begriffenen Informationsgesellschaft begegnen zu können.

## **I. Basisdienste für Nutzer**

### **Virtueller Verbund**

Die KOBV-Suchmaschine entstand auf der Grundlage der Empfehlungen, die OPACs aus den verschiedenen Bibliothekssystemen und die Gesamtkataloge der öffentlichen Verbände der Region mittels der verteilten Suche zu einem virtuellen OPAC zu verbinden und gleichzeitig einen gemeinsamen Index zu schaffen, der die lokalen Systeme und Subverbände in ihren Eigenheiten bestehen lässt. Die technische Grundlage für die Realisierung dieser dem Internet entlehnten Idee bilden die international standardisierten Protokolle des Internet und des World Wide Web. Diese Leitidee lebt heute in den diversen Ausprägungen der Produkte des KOBV fort, in der KOBV-Suchmaschine bzw. dem KOBV-Portal auf der Basis der MetaLib-Software von Ex Libris wie auch im gemeinsamen KOBV-Index auf der Basis des Bibliothekssystems Aleph500. Der virtuelle Verbund zeigt sich im Nutzerinterface der KOBV-Suchmaschine im Web und Katalogisierern im Zugriff auf das Datenangebot über das Z39.50-Protokoll. Die KOBV-Suchmaschine ist heute auf der Basis des OpenURL-Standards mit Lieferdiensten, wie der Online-Fernleihe und der Subito-Dokumentenlieferung vernetzt.

### **Virtueller Gesamtkatalog der Verbände und der Nationalbibliotheken**

Der virtuelle Verbund des KOBV reicht heute weit über die Region Berlin-Brandenburg hinaus und erlaubt die Suche in den großen National- und Staatsbibliotheken. Er ist durch die Online-Fernleihe und Linking-Dienste auf der Basis von SFX bezüglich des Zugriffs auf die in entfernten Regionen vorhandenen Bücher und Dokumente erweitert. In der Online-Fernleihe kooperieren die deutschen Verbände in der Art einer virtuellen Organisation und realisieren gemeinsam einen nationalen Ausleihverbund.

### **Virtuelle Fachverbände FILM und JUDAICA in Deutschland**

Die Stärken des Konzeptes der Virtualisierung liegen darin, dass es im KOBV möglich ist, die OPACs und Bibliothekssysteme der unterschiedlichsten technischen Provenienzen nach wesentlicheren Gesichtspunkten als nach technisch-organisatorischen zusammenzufassen und zu ordnen. Am KOBV können auch Bibliotheken teilnehmen, die sich anderen Verbänden angeschlossen haben. Sie sind trotzdem über die KOBV-Suchmaschine in die Welt des KOBV integriert und können, wie z. B. die Staatsbibliothek Preußischer Kulturbesitz SBB, auf diese Weise sogar am nationalen Ausleihverbund teilnehmen. Mit denselben Mitteln hat sich ein national operierender Verbund der Filmbibliotheken über die KOBV-Suchmaschine zusam-

mengeschlossen. Noch im Aufbau befindet sich ein ebenfalls national operierender *Virtueller Fachverbund JUDAICA*.

### **Direkter Zugang mit dem Bibliothekenführer und Online-Fernleihe**

Berlin und Potsdam bilden zusammen mit ihrem Umland eine Metropole, in der sich eine Vielzahl der unterschiedlichsten Bibliotheken (etwa 800 Einrichtungen) hoher Attraktivität befindet, die mit dem Öffentlichen Nahverkehr zu erreichen sind. Viele Wissenschaftler und Studenten können anders als in vielen Teilen Deutschlands diesen Vorteil in besonderer Weise nutzen, einfach, indem sie sich den Zugang zu mehreren Bibliotheken und deren Ressourcen sichern. Für diese Zwecke ist eine Suchmaschine, die Bücher und andere Bestände nachweist, in Kombination mit einem Bibliothekenführer, wie ihn der KOBV im Internet betreibt, schlechthin ideal, weil sie dem Nutzer einen unmittelbaren Zugang zum Buch ermöglicht. Für den Flächenstaat Brandenburg gilt das weitgehend nicht. Selbst in großen Hochschulbibliotheken sind viele Titel nicht vorhanden. Fortbildung und lebenslanges Lernen sind in den Städten und den ländlichen Gebieten Brandenburgs nicht selten mit gewissen Beschwerden verbunden. Die Möglichkeit, sich vor Ort nicht vorhandene Bücher direkt im Anschluss an die Suche online in die eigene Bibliothek zu bestellen, ist für Nutzer deshalb eine hilfreiche Erweiterung der KOBV-Suchmaschine. Aber selbst in einer Metropole internationalen Rangs sind nicht alle Bücher vorhanden, die in Wissenschaft und Gesellschaft vonnöten sind. Der KOBV arbeitet deshalb mit den deutschen Verbundsystemen zusammen, um einen weitestgehend automatisierten nationalen Ausleihverbund zu betreiben.

### **SFX und Open-Access-Zugang zu Volltexten**

Immer mehr Dokumente und Bücher sind heute online im Internet zu finden und dort im Volltext offen zugänglich (Open Access). Selbst bei Titeln, die in einer Bibliothek in der unmittelbaren Umgebung gefunden werden, kann es deshalb günstiger und effektiver sein, ein Buch oder ein Dokument aus dem Internet direkt auf den eigenen PC herunter zu laden, um es dort auszudrucken oder anderweitig maschinell weiter zu verarbeiten. Die KOBV-Suchmaschine bietet dem Nutzer mit dem integrierten SFX-Open-Linking-System entsprechende Dienste an, um einen wissenschaftlichen Aufsatz mittels Google Scholar oder einen Volltext mittels der Google-Web-Suche im Internet lokalisieren zu können. Ist der Nutzer hierbei nicht erfolgreich, so findet er ein von ihm gesuchtes Dokument vielleicht auf dem Server eines Verlages, zu dem er selbst oder aber seine Bibliothek über eine Zugrifflizenz verfügt. In manchen Fällen kann die Bestellmöglichkeit der digitalen Version eines Dokumentes mittels der Subito-Dokumentenlieferung helfen, die an dieser Stelle ebenfalls in die Suchmaschine integriert ist.

## II. Basisdienste für Bibliotheken

Eines der primären Ziele bei der Gründung des KOBV war es, Kosten für die Beschaffung von Bibliothekssystemen zu senken und personellen Aufwand zu sparen. Durch die Realisierung des KOBV als virtuellem Verbund war es nicht mehr erforderlich, dass der Anschluss an den Verbund mit der Beschaffung und Umstellung auf ein und dasselbe integrierte Bibliothekssystem verbunden war. Die Bibliotheken Brandenburgs konnten beispielsweise mit den ihnen vertrauten Bibliothekssystemen weiterarbeiten. Eine landesweite Neubeschaffung von Bibliothekssystemen war nicht mehr notwendig. In Berlin waren nicht alle Bibliotheken gezwungen, sich im Zuge des Aufbaus des KOBV der im Verlauf des KOBV-Projektes getroffenen Entscheidung der großen Universitätsbibliotheken für das Aleph500-System anzuschließen. Eine relativ kleine KOBV-Zentrale konnte ferner anders als andere Verbünde auf eine zentrale Fachredaktion und den damit verbundenen Abstimmungsaufwand verzichten, weil die Arbeit der Zusammenführung der Katalogisate nun durch einen rechnerischen Prozess erledigt wurden. Dies ist nur eines der Beispiele für den Ersatz von personellem Aufwand im KOBV durch die Entwicklung und Einführung von neuen Technologien.

### Virtuelle Katalogisierung und Virtueller Katalogisierungsverbund

Im Zentrum des Gemeinsamen KOBV-Index steht gewissermaßen ein abstraktes Katalogisat, das nach einem spezifischen Algorithmus aus den lokalen Katalogisaten, die sich rechnerisch zu einem einzigen zusammenfassen lassen, ausgewählt wird. Dieser Datensatz repräsentiert die Gesamtheit der lokalen Katalogisate ein und desselben Titels im Verbundkatalog und ist mit seinen unterschiedlichen Exemplaren des Titels in einer Art und Weise verlinkt, die den Nutzer mit einem Klick vom virtuellen Titel zum konkreten Titel in seiner lokalen Bibliothek führt. Dort kann der Nutzer nach einer erfolgreichen Suche im Gemeinsamen KOBV-Index vor Ort auf sein Exemplar zugreifen, es ausleihen oder über die online-Fernleihe bestellen. Neben den Daten des Gemeinsamen KOBV-Index, bietet der Verbund den Bibliotheken für die Katalogisierung eine sequentiell verteilte Suche an, in der die Bibliothek die Suchreihenfolge der verteilten in einer für die eigene Katalogisierung geeigneten Weise selbst bestimmen und priorisieren kann. Die Bibliothek kann mit der sequentiell verteilten Suche gewissermaßen ihren eigenen virtuellen Katalogisierungsverbund bilden.

### Zentrales Fremd- und Normdatenangebot des KOBV

Die Katalogisate des Virtuellen Verbundes, die einer jeden KOBV-Bibliothek, des virtuellen Gesamtkatalogs der Verbünde, der Nationalbibliotheken und der virtuellen Fachverbänden stehen damit nicht nur dem Nutzer der KOBV-Suchmaschine zur Verfügung, sondern auch dem Katalogisierer in der KOBV-Bibliothek. Zur Unterstützung seiner Bibliotheken stellt der KOBV überdies ein umfangreiches Fremd- und Normdatenangebot bereit: die Fremddaten der Deutschen Bibliothek (DDB), der Library of Congress (LOC, in Kooperation mit dem BVB), des Retro-VK und der Zeitschriftendatenbank (ZDB). Ferner bilden die Daten der Gemeinsamen Körperschaftsdatei (GKD), der Schlagwortnormdatei (SWD) und der Personennamendatei (PND) das zentrale Normdatenangebot des KOBV. In Kooperation mit dem Südwestdeutschen Bibliotheksverbund (SWB) können sich die Bibliotheken zudem frühzeitig über die neu gemeldeten Titel in den verschiedenen Reihen der Deutschen Nationalbibliographie informieren lassen (Alerting-Service für Fachreferenten). Zur retrospektiven Anreicherung mit Normdaten oder Sacherschließungsinformationen generiert die KOBV-Zentrale ferner für einzelne Bibliotheken bedarfsgerechte Datenselektionen.

### **Autonome Z39.50-Suchmaschine ZACK**

Nicht alle Bibliothekssysteme im KOBV verfügen über einen integrierten Z39.50-Client für die Katalogisierung. Eine Vielzahl von vor allem kleineren und Spezialbibliotheken setzt zum Beispiel das mit Unterstützung der DFG entwickelte Allegro-System ein. Um auch solchen Bibliotheken den Zugang zu dem umfangreichen Datenangebot des KOBV zu ermöglichen, hat der KOBV die Z39.50-basierte Suchmaschine ZACK für den autonomen Einsatz in den örtlichen Bibliotheken entwickelt, die eine parallel verteilte Suche realisiert und – sie ist im Source-Code verfügbar – als flexibler Softwarebaustein in die lokalen Anwendungen einer jeden KOBV-Bibliothek integriert werden kann.

### **III. Portal und Verteilte Digitale Bibliothek**

Wissenschaftliche Bibliotheken sehen sich ständig wachsenden Anforderungen gegenübergestellt. Der Wissenschaftsrat fordert in seinen Empfehlungen vom August 2001 die Integration einer Vielfalt von Informations- und Kommunikationsdiensten:

- Online-Kataloge der eigenen Bibliothek und die anderer Bibliotheken des In- und Auslandes
- eigene Verbundkataloge und die anderer Regionen
- den nationalen Katalog und die anderer Länder
- Abstract- und Indexdienste von Verlagen, Zeitschriftenagenturen
- digitale Zeitschriften von Verlagen, wissenschaftlichen Gesellschaften und Institutionen
- digitale Texte von Verlagen von Autoren direkt, von Bibliotheken und von Preprint-Archiven
- multimediale Materialien von Verlagen, von Lehrenden direkt und von Bibliotheken
- Bestände in Spezielsammlungen (Karten, Audio-, Video-, Bildarchive)
- retrodigitalisierte Materialien von der eigenen Bibliothek oder von anderen Bibliotheken und Verlagen
- sonstige Informationsressourcen im WWW, zu finden über Suchmaschinen
- Web-Verzeichnisse und fachliche Information Gateways

Diese Dienste sollen unter der einfachen und nutzerfreundlichen graphischen Oberfläche eines Virtuellen OPAC präsentiert werden. Dabei darf sich für den Anwender „... durch die Verzahnung der Funktionalität und der Nutzungsmöglichkeiten der verschiedenen Datenbanken ... nicht mehr die Frage stellen, in welchem System er aktuell arbeitet.“

#### **Das KOBV-Portal**

Den Empfehlungen des Wissenschaftsrates folgend, ist es das Ziel des KOBV-Portals, die ständig wachsende Zahl der digitalen Ressourcen der KOBV-Bibliotheken auf regionaler Ebene nachzuweisen und in ähnlicher Art und Weise, wie die KOBV-Suchmaschine dieses für die Online-Kataloge leistet, unter einer einheitlichen Oberfläche zusammenzufassen und, wo immer dies möglich ist, der parallel verteilten Suche zugänglich zu machen. Das KOBV-Portal ist eine direkte Verallgemeinerung der KOBV-Suchmaschine und beruht mit MetaLib und SFX von Ex Libris auf derselben Softwarebasis. Diese ist um ein Softwaremodul ergänzt, mit dem die Metadaten der digitalen Ressourcen der Bibliotheken, die unterschiedliche Portalsysteme

verwenden können, mit ihren „Zwillingspartnern“ im zentralen Portal synchronisiert werden. Ein Portal ist für sich allein noch keine digitale Bibliothek, sondern nur das Zugangssystem. Erst durch die Integration von „echtem“ Content, wie Volltexten, Bild- und Tonsammlungen, Video-Kollektionen und anderen Multimedia wird aus dem Ganzen eine digitale Bibliothek. In dieser Richtung unternimmt der KOBV die ersten Schritte.

### **Digitale Open Access-Journale**

Eine erste Sammlung von im Web im freien Zugriff verfügbaren digitalen Zeitschriften ist im KOBV-Portal auf der Basis des Ex Libris-Werkzeugs SFX integriert. Hierbei handelt es sich um ein alphabetisches, nach Zeitschriftentiteln geordnetes Zugangssystem zu Open Access-Materialien im Web, das mittels einer so genannten Knowledge-Base auch auf lizenzierte elektronische Zeitschriften und Datenbanken angewendet werden kann.

### **Konsortiallösung des KOBV-Portals**

Dieses Verfahren setzen Partnerbibliotheken ein, die im KOBV ebenfalls Ex Libris-Software verwenden. Sie betreiben die Basis-Portalsoftware im Verbund konsortial, d. h. sie verwenden MetaLib und SFX als technische Grundsoftware und konfigurieren auf dieser Basis ihre eigenen Portale entsprechend den Bedürfnissen ihrer Benutzer vor Ort. Diese Bibliotheken integrieren ihre lizenzierten Ressourcen und Datenbanken nahtlos in ihr lokales Portal. Einige Bibliotheken haben sich nur für die Open-Linking-Lösung SFX entschieden, um so ihren Nutzern aus ihrer Umgebung heraus den Zugriff auf den von der Bibliothek lizenzierten Volltext geben zu können. Sowohl für MetaLib als auch für SFX bietet der KOBV einen Hosting-Service an.

### **Dokumentenserver und Opus-Basis**

Einzelne KOBV-Bibliotheken setzen Dokumentenserver für die Speicherung von Preprints, Hochschulschriften und digitalisierten Versionen gedruckter Materialien ein. Die Server sind technisch unterschiedlich, sie werden aber auf der Grundlage der flexiblen Portal-Technologie in das zentrale KOBV-Portal eingebunden. Bibliotheken, die es wünschen, steht ein zentraler Hosting-Service auf Basis des Opus-Systems zur Verfügung. Dabei handelt es sich um einen leistungsfähigen und in der Handhabung einfachen Dokumenten-Server, der im KOBV auf Basis des Internet-Robots Swish-e um eine Volltextindexierung erweitert wurde. Zielvorstellung ist es aber, mittelfristig einen Gesamtindex aller Dokumenten- und Volltext-Server im KOBV durch Einsatz einer anderen Internetsuchmaschine zu erreichen, einer Kombination aus dem Indexierer Lucene und dem Crawler Nutch, beides Instrumente des Internet-Archivs.

### **Archivserver für Backfiles und FAK**

Das Friedrich-Althoff-Konsortium ist mit seiner Geschäftsstelle in der KOBV-Zentrale am ZIB angesiedelt, wird jedoch fachlich unabhängig vom KOBV geleitet. Die KOBV-Zentrale unterstützt das FAK durch Räume, technische Ausstattung und Beratung. Das FAK verhandelt und schließt für Bibliotheken aus der Region, aber auch bundesweit Verträge über die Nutzung digitaler Zeitschriften und Datenbanken ab, an denen Bibliotheken je nach ihrem eigenen Bedarf teilnehmen können. Verträge des FAK beinhalten das Recht der Bibliotheken, nach Ablauf eines Vertrages die Backfiles der in Lizenz genommenen Journale und Jahrgänge zu erhalten und durch einen Host ihrer Wahl zur eigenen Verfügung zu haben. Der KOBV hat einen Volltextserver für die entsprechenden Backfiles von Elsevier-, Springer- und Kluwer-Journalen aufgebaut, der mit dem Internet-Robot Swish-e sowohl nach Metadaten als auch im Volltext indexiert wurde und nun im KOBV-Portal zugänglich ist. Den Zugriff auf konkrete Artikel erhalten dabei aber nur solche Nutzer, deren Bibliotheken die entsprechenden

Zeitschriften in den betreffenden Jahren lizenziert haben.

### **Die Verteilte Digitale Bibliothek des KOBV**

Die Gesamtheit der Server und digitalen Ressourcen der KOBV-Bibliotheken bildet zusammen mit dem KOBV-Portal die Verteilte Digitale Bibliothek des KOBV. Diese ist technisch ausgedrückt eine Distributed Digital Library, die eine Vielzahl von heterogenen Bibliotheks- und Speichersystemen und von Servern, die in den lokalen Bibliotheken stehen, für den Nutzer im Internet unter einer einheitlichen Oberfläche integriert. Die Portalsoftware MetaLib und SFX bietet dabei dem Nutzer die Möglichkeiten der verteilten Suche in Ressourcen an, die hier als durchsuchbar eingebunden sind. Auf der Ebene der Katalogisate sind die OPACs der lokalen Bibliotheken mittels SFX dynamisch mit der Online-Fernleihe und anderen zum KOBV externen Diensten, wie Dokumentenlieferung und Web-Suche verlinkt. Die MetaLib bietet dem Nutzer ferner zusätzliche Möglichkeiten der Personalisierung und Anpassung der Nutzeroberfläche des Portals an seine spezifischen Bedürfnisse an.

### **IV. Perspektive für die Zukunft**

Die KOBV-Suchmaschine und das KOBV-Portal befinden sich in ständiger Entwicklung. In Zukunft soll an die Stelle der verteilten Suche eine einfache „Google-artige“ Suche mit einem zu Google Scholar konkurrenzfähigen Relevanz-Ranking und einer grafischen Oberfläche treten. Die Planungen dafür reichen über die nächsten drei bis vier Jahre hinaus.

**Ansprechpartner:** KOBV-Zentrale im ZIB (kobv-zt@zib.de)

VORTRÄGE UND LEHRVERANSTALTUNGEN VON  
ZIB-MITARBEITERN

7.1 Vorträge und Gastaufenthalte

**Tobias Achterberg**

- 04.04.2005** *Chip Verification with Constraint Integer Programming*  
Center Days 2005, TU Berlin
- 01.06.2005** *SCIP – Solving Constraint Integer Programs*  
MATHEON MF1 Workshop – Optimization Software, TU Berlin
- 15.07.2005** *Conflict Analysis in Mixed Integer Programming*  
Berliner Algorithmen-Tag 2005, FU Berlin
- 28.07.2005** *Conflict Analysis in Mixed Integer Programming*  
IMA Hot Topics Workshop „Mixed-Integer Programming“, Minneapolis, USA
- 18.08.2005** *Chip Verification - Proving Infeasibility of Constraint Integer Programs*  
TU Magdeburg
- 05.10.2005** *Chip Verification*  
Block Course Combinatorial Optimization at Work", ZIB, Berlin
- 17.11.2005** *Chip Verification with Constraint Integer Programming*  
Dash Optimization, Leamington Spa, Großbritannien
- 29.11.2005** *Chip Verification with Constraint Integer Programming*  
INFORM GmbH, Aachen
- 01.12.2005** *Chip Verification with Constraint Integer Programming*  
Siemens AG, München

**Artur Andrzejak**

- 01.06.2005** *System Architecture in CoreGRID*  
EGTD05 – Concertation Meeting- Technical Group 2, Architecture, Brüssel, Belgien

**Daniel Baum**

- 02.02.2005** *Chemie in 3D – wissenschaftliche Visualisierung*  
Gesellschaft Deutscher Chemiker, Jungchemikerforum Marburg
- 04.03.2005** *Optimale Überlagerung zweier Punktmengen bei gegebenem Matching*  
Software-Praktikum, Bachelor-Studiengang BioInformatik, FU Berlin

**22.06.2005** *Multiple Semi-flexible 3D Superposition of Drug-sized Molecules*  
Berliner Centrum fuer Genombasierte Bioinformatik – BCB-Symposium, Berlin

**27.09.2005** *Multiple Semi-flexible 3D Superposition of Drug-sized Molecules*  
Computational-Life-Science-Konferenz, Konstanz

### Andreas Bley

**21.03.2005** *Finding Small Administrative Lengths for Shortest Path Routing*  
2nd International Network Optimization Conference, Lissabon, Portugal

**08.6.2005** *On the Approximability of the Minimum Congestion Unsplittable Shortest Path Routing Problem*  
11th Conference on Integer Programming and Combinatorial Optimization, Berlin

**24.07.2005** *Optimierung des Deutschen Wissenschaftsnetzes*  
COM FN T Research Workshop, Siemens AG, München

### Ralf Borndörfer

**18.01.2005** *Linien- und Preisplanung im ÖPNV*  
IVU Traffic Technologies AG, Berlin

**10.02.2005** *Preisplanung im ÖPNV*  
IVU Traffic Technologies AG, Berlin

**23.02.2005** *Kombinatorische Auktionen*  
Workshop Methodenkompetenz, ZIB, Berlin

**23.02.2005** *Set Partitioning/Covering*  
Workshop Methodenkompetenz, ZIB, Berlin

**15.03.2005** *Optimization in Public Transit*  
PSI Transportation GmbH, Berlin

**17.03.2005** *Auctioning Rail Capacity*  
Optimierungsseminar, ZIB, Berlin

**18.04.2005** *Umlauf- und Dienstplanoptimierung im ÖPNV*  
IVU Traffic Technologies AG, Berlin

**17.06.2005** *Dienstplanoptimierung*  
IVU Traffic Technologies AG, Berlin

**23.06.2005** *Trassenbörse*  
Vollversammlung DisKon, Universität Göttingen

**07.09.2005** *Solving Large-Scale Integrated Vehicle and Duty Scheduling Problems*  
Operations Research 2005, Universität Bremen

**08.09.2005** *Fare Planning in Public Transport*  
Operations Research 2005, Universität Bremen

**12.09.2005** *Strategic Optimization Problems in Public Transit*  
Workshop, s'Hertogenbosch, Niederlande

**14.09.2005** *Integrated and Strategic Planning Problems in Public Transport*  
Carmen Optimization Workshop IV, Göteborg, Schweden



**06.10.2005** *Optimization in Public Transit*

IVU Italia User Meeting, San Vincenzo, Italien

**19.10.2005** *Umlauf- und Dienstplanoptimierung mit MICROBUS*

Workshop über Optimierung bei den Berliner Verkehrsbetrieben, IVU Traffic Technologies AG, Berlin

**Manfred Brandt****23.09.2005** *A sample path relation for the sojourn times in G/G/1-PS systems and its applications*

16. Internationaler Kongress der Österreichischen Mathematischen Gesellschaft, Klagenfurt, Österreich

**Sven Burger****25.01.2005** *FEM Modelling of 3D Photonic Crystals and Photonic Crystal Waveguides*

Photonics West, San Jose, USA

**03.02.2005** *Computational Photonics – Applications to Photonic Crystals*

Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Berlin

**14.02.2005** *Finite-element simulation of photonic crystals*

Institut für Laserphysik, Universität Hamburg

**23.02.2005** *Finite-Elemente-Methoden für Photomasken-Simulationen*

Abteilung Optik, Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Braunschweig

**20.06.2005** *FEM simulations of nanooptical components*

Institut für Festkörperphysik, Technische Universität Berlin

**28.06.2005** *Numerical investigation of metamaterials*

DFG Meeting on Metamaterials, Physikzentrum Bad Honnef

**30.06.2005** *Finite-element methods for eigenvalue and scattering problems in nano-optics*

Institut für Nanooptik, Humboldt-Universität zu Berlin

**30.08.2005** *Numerical Investigation of Light Scattering off Split-Ring Resonators*

Optics and Optoelectronics SPIE Conference, Warsaw, Polen

**27.10.2005** *Finite element methods for eigenvalue and scattering problems in nano-optics*

University of Surrey, Guildford, Großbritannien

**01.12.2005** *Finite element methods for eigenvalue and scattering problems in nano-optics*

Institut für Festkörpertheorie und Theoretische Optik, Friedrich-Schiller-Universität Jena

**Frank Cordes****26.04.2005** *Virtual Screening and the role of metastability*

Workshop am Max-Planck-Institut für Molekulare Genetik, Berlin

**01.11.2005** *Screening of molecular conformations*

Seminar Institut für Umweltphysik IUP Bremen

**Wolfgang Dalitz****9.-11.05.2005** *Suchmaschinen – Ein Testbericht*

11. Kongress der IuK-Initiative der Wissenschaftlichen Fachgesellschaften in Deutschland, Bonn

**18.-23.09.2005** *Search Engines – A Test Report*

16. Internationaler Kongress der ÖMG, Jahrestagung der DMV/ÖMG, Klagenfurt, Österreich

**Peter Deuffhard****11.02.2005** *Wie simuliert man einen Tsunami?*

MATHEON-Lounge, TU Berlin

**07.03.2005** *Robuste Perron-Cluster-Analyse beim Entwurf von Medikamenten*

Oberseminar „Wissenschaftliches Rechnen und Modellbildung“, Zentrum Mathematik, TU München

**15.03.2005** *Cancer therapy regional hyperthermia. Mathematical modelling, simulation and optimization*

Institut für Mathematik, Karl-Franzens-Universität und Technische Universität Graz, Österreich

**31.03.2005** *Thermoregulation in the cancer therapy regional hyperthermia*

2nd International Symposium on „Modelling of Physiological Flows – MPF 2005“, Instituto Superior Técnico, Sesimbra, Portugal

**12.06.2005** *Painters, Murderers, Mathematicians*

4th International Symposium of Science and Art (ScArt4), Hyatt-Regency Hotel, New Brunswick, USA

**14.06.2005** *The DFG Research Center Matheon in Berlin*

8th Hermann-von-Helmholtz-Symposium, Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Berlin

**12.08.2005** *Maler, Mörder, Mathematiker, Mediziner*

Symposium anlässlich der Verabschiedung von Prof. Cornelius Frömmel, Charité Berlin

**03.08.2005** *Affine similar convergence theorems for collocation methods*

Conference on „Adaptivity and Beyond: Computational Methods for Solving Differential Equations“, Vancouver, Kanada

**16.09.2005** *The Smile of the Mathematicians. Mathematical Modelling and Simulation in Facial Surgery*

International Conference on Advances in Numerical Mathematics, Russian Academy of Sciences, Moskau, Russland

**26.09.2005** *Das Lächeln der Mathematiker. Mathematik im Dienst der Mund-Kiefer-Gesichtschirurgie*

Mathematisches Kolloquium, Fakultät für Mathematik und Physik, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg

**03.10.2005** *Mathematical Modelling and Simulation in Medicine*

First International Seminar on Innovative Scientific Computing for Challenging Multi-disciplinary Applications: Methods, Tools and Collaborative Environments, Center for

Scientific Computing and Optimization in Multidisciplinary Applications, University of Jyväskylä, Finland

**21.10.2005** *Painters, murderers, mathematicians*

International Conference on Differential Equations: From Theory to Computational Science and Engineering, ETH Zürich, Schweiz

**07.11.2005** *Dynamic dimension reduction for differential equations*

Workshop on Model Reduction, DFG Research Center MATHEON, TU Berlin

**10.11.2005** *Painters, murderers, mathematicians*

International Max Planck Research School, Berlin

**10.12.2005** *Das Bild vom Inneren des menschlichen Körpers im Wandel der Zeit*

Workshop „Bildwelten der Weltbilder“, Berlin-Brandenburgische Akademie der Wissenschaften (BBAW), Berlin

### **Andreas Eisenblätter**

**14.01.2005** *UMTS Radio Network Evaluation and Design*

Workshop „Optimization and Applications“, Oberwolfach

**22.03.2005** *Novel View on Cell Coverage and Coupling for UMTS Radio Network Evaluation and Design*

INOC 2005, Lissabon, Portugal

**11.07.2005** *Bewertung und Planung von UMTS-Funknetzen*

Optimierungsseminar, TU Darmstadt

**10.11.2005** *Analytical Approximate Load Control in WCDMA Radio Networks*

Post-COST 273 Meeting, Lissabon, Portugal

### **Philipp Friese**

**04.02.2005** *Steuerung von Aufzugssystemen mit Reoptimierungsalgorithmen*

Klausurtagung des DFG-Graduiertenkollegs 621 MAGSI, TU Berlin

**23.02.2005** *Online-Optimierung – Reoptimieren in Echtzeit*

Methoden-Kompetenz Workshop, ZIB, Berlin

**23.02.2005** *Das Traveling Salesman Problem mit mehreren Servern und Zeitfenstern*

Methoden-Kompetenz Workshop, ZIB, Berlin

**23.05.2005** *Optimization, Simulation, and Visualization of Multi-Elevator Transport Systems*

Gemeinsamer Workshop der Graduiertenkollegs, Schloss Dagstuhl

**30.05.2005** *Optimization, Simulation, and Visualization of Multi-Elevator Transport Systems*

Eingeladener Vortrag, TFH Berlin

### **Hans-Florian Geerdes**

**20.01.2005** *A Novel View on Cell Coverage and Coupling for UMTS radio Network Evaluation and Design*

COST 273 12th MCM, Bologna, Italien

- 04.02.2005** *Optimizing the UMTS Radio Interface*  
Graduiertenkolleg MAGSI, Klausurtagung, Berlin
- 02.03.2005** *The UMTS Radio Interface: Research at MATHEON*  
Seminar „Anwendungen der Optimierung“, Universität Bayreuth
- 31.05.2005** *Comparison of Models for WCDMA Downlink Capacity Assessment Based on a MORANS Reference Scenario*  
IEEE VTC-2005 Spring, Stockholm, Schweden
- 27.09.2005** *Analytical Approximate Load Control in WCDMA Radio Networks*  
IEEE VTC-2005 Fall, Dallas, USA
- 11.10.2005** *Coverage and Capacity Optimization for UMTS*  
Blockvorlesung „Combinatorial Optimization at Work“, ZIB
- 13.10.2005** *Optimizing the UMTS Radio Interface*  
Graduiertenkolleg MAGSI-Doktorandenworkshop, Eggersdorf
- 09.12.2005** *WLAN Planning in Indoor Office Environments*  
Graduiertenkolleg MAGSI-Doktorandenseminar, TU Berlin

### Martin Grötschel

- 18.01.2005** *What is going on in linear and integer programming?*  
Colloquium talk, Institute of Mathematics, Vietnamese Academy of Sciences and Technology, Hanoi, Vietnam
- 19.01.2005** *Mathematics: Teaching and Research in Germany*  
University of Natural Sciences, Hanoi, Vietnam
- 21.01.2005** *Studying Mathematics in Germany*  
University of Technology, Ho Chi Minh City, Vietnam
- 21.01.2005** *Mathematics: Teaching and Research in Germany*  
Vietnam National University, Ho Chi Minh City, Vietnam
- 08.02.2005** *Industrial impact of optimization: Some examples*  
Seminar „Optimization – How industry can learn from the German and Australian experience“ NSW Department of State and Regional Development, Sydney, Australien
- 09.02.2005** *Solving transportation problems by integer programming*  
MASCOS seminar, The University of New South Wales (UNSW), Sydney, Australien
- 10.02.2005** *Graph colouring and frequency assignment*  
Seminar, Australian National University (ANU), Canberra, Australien
- 10.02.2005** *Linear and integer programming: The state of the art*  
Colloquium talk, Australian National University (ANU), Canberra, Australien
- 11.02.2005** *Mathematical challenges in telecommunication*  
Departmental seminar, University of Melbourne, Australien
- 15.02.2005** *Industrial impact of optimization: Some examples*  
FASTER, CHEAPER, BETTER Seminar: International Case Studies in Supply Chain/Value Chain, Transportation and Logistics Optimization, Investment Centre Victoria, Melbourne, Australien

- 13.03.2005** *Math-Net and Related Issues: Status and Perspectives*  
Meeting of the IMU Committee on Electronic Information and Communication, Grenoble, Frankreich
- 21.03.2005** *Optimizing the radio interface in mobile telecommunication*  
International Network Optimization Conference (INOC 2005), University of Lisbon, Lissabon, Portugal
- 08.04.2005** *Transportation and Integer Programming*  
Landau Center Anniversary Symposium, Jerusalem, Israel
- 11.04.2005** *LP and IP: current practice and some new theory*  
Institute of Mathematics, Hebrew University, Jerusalem, Israel
- 25.04.2005** *TSP: State and art*  
Workshop on Contemporary Mathematics, IMPA, Rio de Janeiro, Brasilien
- 28.04.2005** *Telecommunication, graphs, and combinatorial optimization*  
GRACO 2005 (2nd Brazilian Symposium on Graphs, Algorithms and Combinatorics), Angra dos Reis (RJ), Brasilien
- 19.05.2005** *Drilling Holes*  
Ringvorlesung „Modeling in Natural Sciences and Engineering“, TU Berlin
- 24.05.2005** *Online-Optimierung*  
5. Workshop der BBAW-Studiengruppe „Strukturbildung und Innovation: Transdisziplinäre Aspekte, Analyse und Optimierung“, Berlin-Brandenburgische Akademie der Wissenschaften, Berlin
- 26.05.2005** *Mathematische Behandlung mehrkriterieller Strukturbildung*  
Berlin-Brandenburgische Akademie der Wissenschaften, Berlin
- 10.06.2005** *Offene Archive und Open Access*  
4. KOBV-Forum „Vernetzte Dienste – Kooperation und Partnerschaft im KOBV“, ZIB, Berlin
- 13.06.2005** *Radio interface planning in mobile telecommunication*  
ETH Zürich, Schweiz
- 16.06.2005** *Digital dreams*  
2nd Joint Meeting of the AMS, DMV and ÖMG, Mainz
- 25.07.2005** *Mathematical Aspects of Public Transport*  
Plenary lecture at the Conference “Mathematics: Opportunity and Challenge“ with the celebration of the 70th anniversary of the Chinese Mathematical Society, Weihai, China
- 28.07.2005** *The State of Linear and Integer Programming in Theory and Application*  
Fudan University, Shanghai, China
- 29.07.2005** *Solving Transportation Problems by Integer Programming: Network & Line Planning and Railway Track Auctioning*  
Distinguished Scientist Lecture, CAS Academy of Mathematics & Systems Science and Sino-German Center for Research Promotion, Peking, China
- 31.10.2005** *Vehicle Circulation and the Hungarian Method*  
Celebration day of the 50th anniversary of the Hungarian Method, Eötvös Loránd University, Budapest, Ungarn

**Tobias Harks**

- 02.03.2005** *Utility Proportional Fair Resource Allocation – An Optimization Oriented Approach*  
Tagung „QoS in Multiservice IP Networks“, Catania, Italien
- 19.03.2005** *Utility Fair Congestion Control for Real-Time Traffic*  
8th IEEE Global Internet Symposium, Miami, USA
- 19.03.2005** *Priority Pricing Using Model Predictive Control*  
Tagung der DFG Graduiertenkollegs, Dagstuhl
- 07.11.2005** *Priority Pricing in Utility Fair Networks*  
Tagung „13th IEEE Inter. Conf. on Network Protocols (ICNP)“, Boston, USA

**Jörn Hasenclever**

- 10.06.2005** *Kooperative Erschließung von e-Ressourcen im KOBV*  
4. KOBV-Forum „Vernetzte Dienste – Kooperation und Partnerschaft im KOBV“, ZIB, Berlin

**Lavinia Hodoroaba**

- 11.05.2005** *OPUS- und Archivierungsdienste – ein neuer Service der KOBV-Zentrale*  
KOBV-Workshop zur Vorstellung des OPUS-Dienstes, ZIB, Berlin
- 10.06.2005** *Suchen, finden, lesen – Dienste im KOBV-Portal*  
4. KOBV-Forum „Vernetzte Dienste – Kooperation und Partnerschaft im KOBV“, ZIB, Berlin

**Hans-Christian Hege**

- 27.01.2005** *Supporting Cognition and Communication in Science: Past, Present and Future Visualization Tools*  
Festvortrag zur Eröffnung eines Graduiertenkollegs, Universität Konstanz
- 11.03.2005** *Statistical Shape Modeling for Craniostylosis Surgery Planning*  
Int. Conf. on Advanced Digital Technology in Head and Neck Reconstruction, Banff, Kanada
- 12.04.2005** *Bilder aus der Wissenschaft*  
Koordinationstreffen der Arbeitsgruppe „Welt als Bild“ der Berlin-Brandenburgischen Akademie der Wissenschaften, ZIB, Berlin
- 09.05.2005** *New Methods for Digital Neuroanatomy*  
Begutachtung der überregionalen Forschergruppe „The insect brain: reconstructed“, DFG, Bonn
- 27.05.2005** *Die Vision einer individuellen quantitativen Medizin*  
Symposium „Medizinischer Arbeitsplatz 2020“, Charité, Campus Mitte
- 07.06.2005** *Challenges for Visualization in Systems Biology*  
Seminar „Scientific Visualization: Challenges for the Future“, Dagstuhl
- 08.07.2005** *Neue Bilder für die Medizin?*  
MATHEON-Lounge, TU Berlin

- 10.08.2005** *Terrain-Visualisierung – mögliche Beiträge des ZIB zur Modellierung*  
Tsunami Early Warning System, Workshop der Arbeitsgruppe „Geobasisdaten, Risiko-  
modellierung und Lagezentrum“, DLR Oberpfaffenhofen
- 30.09.2005** *Why are topological methods not included in commercial visualization systems?*  
Workshop TopoInVis 2005 – Topology-Based Methods in Visualization, Budmerice, Slo-  
wakei
- 17.10.2005** *Virtuelle Labors in der Neurobiologie – neue Ziele*  
Workshop „Virtuelle Labors in der Neurobiologie“, ZIB, Berlin
- 08.12.2005** *Virtual Labs – Integrated Visualization, Data Analysis and Simulation*  
Präsentation anlässlich des Besuches von Rick Rashid, Microsoft Research, ZIB, Berlin

### **Stefan Heinz**

- 10.03.2005** *The Online Target Date Assignment Problem*  
Operations Research Seminar, Universität Maastricht, Niederlande

### **Klaus Hildebrandt**

- 05.06.2005** *Smooth Feature Lines on Surface Meshes*  
Third Eurographics Symposium on Geometry Processing, Wien, Österreich
- 08.09.2005** *Web-based software for geometry*  
INRIA - Summer School on Open Software for Algebraic and Geometric Computation,  
Sophia Antipolis, Frankreich
- 11.11.2005** *Smooth Feature Lines on Surface Meshes*  
Meeting on Multimedia Technology for Mathematics and Computer Science Education,  
Belgrad, Serbien

### **Benjamin Hiller**

- 24.01.2005** *A Tight Bound on Approximating Arbitrary Metrics by Tree Metrics*  
Mittagsseminar DFG-Forschergruppe „Algorithmen, Struktur, Zufall“, ZIB, Berlin
- 20.06.2005** *Online Bin Coloring*  
Mittagsseminar DFG-Forschergruppe „Algorithmen, Struktur, Zufall“, TU Berlin
- 28.10.2005** *Online-Optimierung des Pannenhilfsdienstes des ADAC*  
Treffen der GOR-Arbeitsgruppe Supply Chain Management, IBM Deutschland GmbH,  
Mainz
- 14.11.2005** *The Online Optical Call Admission Problem*  
Mittagsseminar DFG-Forschergruppe „Algorithmen, Struktur, Zufall“, ZIB, Berlin
- 24.11.2005** *Online-Dispatching: Von Pannenhilfefahrzeugen zum Hochregallager*  
SimForumSteyr '05, Linz, Österreich
- 05.12.2005** *Online Primal-Dual Algorithms for Covering and Packing Problems*  
Mittagsseminar DFG-Forschergruppe „Algorithmen, Struktur, Zufall“, TU Berlin

**Lavinia Hodoroaba**

- 11.05.2005** *OPUS- und Archivierungsdienste – ein neuer Service der KOBV-Zentrale*  
KOBV-Workshop zur Vorstellung des OPUS-Dienstes, ZIB, Berlin
- 10.06.2005** *Suchen, finden, lesen – Dienste im KOBV-Portal*  
4. KOBV-Forum „Vernetzte Dienste – Kooperation und Partnerschaft im KOBV“, ZIB, Berlin

**Andres Imhof**

- 15.03.2005** *Ein regionales Portal und sein Profil*  
2. SMUG-DACH-Treffen im Rahmen des Bibliothekartages 2005, Universitätsbibliothek Düsseldorf
- 10.06.2005** *e-Ressourcen-Austausch im KOBV*  
4. KOBV-Forum „Vernetzte Dienste – Kooperation und Partnerschaft im KOBV“, ZIB, Berlin
- 06.07.2005** *e-Ressourcen-Austausch im KOBV und Vorstellung des KOBV-Portals/SFX*  
Kolloquium für Berliner BibliotheksreferendarInnen, ZIB, Berlin

**Ralf Kähler**

- 21.04.2005** *Interactive Visualization of Large Remote AMR Data*  
Visualisierungsworkshop, Universitätszentrum der Universität Innsbruck, Obergurgl, Österreich
- 27.10.2005** *Visualization of Time-Dependent Remote Adaptive Mesh Refinement Data*  
IEEE Visualization 2005, Minneapolis, USA
- 25.11.2005** *Visualization of Adaptive Mesh Refinement Data with Amira*  
Seminarvortrag MPI für Gravitationsphysik, Potsdam

**Volker Kaibel**

- 24.02.2005** *Neuigkeiten vom Random-Edge-Simplex-Algorithmus*  
Optimierungsseminar, ZIB, Berlin
- 08.03.2005** *Face-Numbers of Random 0/1-Polytopes*  
Workshop on Random Graphs and Probabilistic Methods, HU Berlin
- 14.03.2005** *New Bounds on the Random-Edge Simplex Algorithm*  
9th Workshop on Combinatorial Optimization, Aussois, Frankreich
- 18.06.2005** *Revlex-Initial 0/1-Polytopes*  
2nd Joint Meeting of AMS, DMV, ÖMG, Mainz
- 01.07.2005** *0/1-Polytopes: Random Walks and Phase Transitions*  
Workshop „Inside the Cube“, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg
- 28.09.2005** *Graphs of 0/1-Polytopes*  
Kolloquium, Istituto di Analisi dei Sistemi ed Informatica, Rom
- 07.10.2005** *0/1-Polytope: Zur Geometrie der Kombinatorischen Optimierung*  
Kolloquium, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg



**05.12.2005** *Breaking Symmetries by Orbitopes*  
Optimierungsseminar, ETH Zürich, Schweiz

**08.12.2005** *0/1-Polytope in der Kombinatorischen Optimierung*  
Kolloquium, Philipps-Universität Marburg

### Uta Kaminsky

**17.06.2005** *Erwerbungs Kooperation in der Region Berlin-Brandenburg: das Friedrich-Althoff-Konsortium e. V.*  
Seminar „Nationale und internationale Aspekte des Verlagswesens“, Institut für Bibliothekswissenschaften, HU Berlin

### Roland Klose

**21.09.2005** *A multilevel method for the computation of eigenmodes in 3D photonic crystals*  
Konferenz NUSOD Berlin

### Thorsten Koch

**31.01.2005** *Rapid Mathematical Programming*  
AG7-Seminar, TU Darmstadt

**09.03.2005** *Introduction to Branch-and-Bound for MIP Solvers*  
Blockvorlesung Diskrete Optimierung in Telekommunikation, Logistik und Verkehr, Universität Bayreuth

**15.03.2005** *Recent results in Linear und Integer Programming*  
„Siemens meets Eötvös University and ZIB“, Workshop bei Siemens Corporate Technology, München

**01.06.2005** *SoPlex and Zimpl*  
MATHEON MF1 Workshop on Optimization Software, ZIB, Berlin

**13.09.2005** *The GAP or utilizing the power of mathematical programming*  
Eingeladener Vortrag bei einem Empfang des Department of State and Regional Development/MATHEON/MASCOS, Sydney, Australien

**16.09.2005** *Integer Programming at Work*  
OR Seminars on Useful Material/MASCOS, Melbourne, Australien

**10.10.2005** *Die Cholesky-Zerlegung*  
TFH Berlin

**15.10.2005** *Optimizing the Intermediate Storage Area*  
Combinatorial Optimization at Work, ZIB, Berlin

**20.10.2005** *Planung einer Containerverladeeinrichtung in Australien*  
ZIB-Optimierungsseminar, Berlin

**28.11.2005** *Introduction to MATHEON and ZIB*  
INFORM GmbH Optimierungsseminar, Aachen

**28.11.2005** *Finding the Strategic Corridor*  
INFORM GmbH Optimierungsseminar, Aachen

**Arie M. C. A. Koster**

- 09.02.2005** *Provably Good Solutions for Wavelength Assignment in Optical Networks*  
The 9th IFIP Working Conference on Optical Network Design & Modelling (ONDM 2005), Mailand, Italien
- 09.02.2005** *Recent Advances in Wavelength Assignment in Multi-Fiber WDM Networks*  
COST 293 Meeting, Mailand, Italien
- 21.03.2005** *Wavelength Assignment in Multi-Fiber WDM Networks*  
International Network Optimization Conference (INOC), Lissabon, Portugal
- 15.04.2005** *Survivable Optical Network Design by Mathematical Optimization*  
Invited Talk, 2nd Workshop on the Optimization of Optical Networks, Montreal, Kanada
- 22.04.2005** *Graphenfärbung und Telekommunikationsnetzen*  
Besuch am ZIB der Graduate School „Mathematics as a Key Technology“, Universität Kaiserslautern
- 11.05.2005** *Degree-based Treewidth Lower Bounds*  
4th International Workshop on Efficient and Experimental Algorithms, WEA 2005, Santorini Island, Griechenland
- 15.06.2005** *Listening to Treewidth Algorithms ...*  
TACO-Projekttag, Maastricht, Niederlande
- 30.06.2005** *Optimierung von Telekommunikationsnetzen am Zuse-Institut Berlin*  
Treffen mit PSI Telco, Berlin
- 30.06.2005** *Generalized Edge Coloring for Wavelength Assignment in WDM Networks*  
ZIB Optimierungsseminar
- 01.10.2005** *Observations of the Multi-Layer Networks Working Group*  
COST 293 Discussion Workshop, Barcelona, Spanien
- 28.10.2005** *Comparing Imperfection Ratio and Imperfection Index*  
5th ALIO/EURO Conference on Combinatorial Optimization, Paris, Frankreich
- 09.11.2005** *Modelle und Algorithmen zur integrierten Multilayer Netzoptimierung*  
Kick-off Meeting des BMBF-Förderschwerpunktes Eibone, Bonn
- 14.11.2005** *Edge Coloring for Wavelength Assignment in WDM Networks*  
INFORMS Annual Meeting, San Francisco, USA
- 15.11.2005** *Branch and Tree Decomposition Techniques for Discrete Optimization*  
Tutorial, INFORMS Annual Meeting, San Francisco, USA
- 01.12.2005** *Conflict-free Wavelength Assignment and Generalized Edge-Coloring*  
Technical University of Denmark, Kopenhagen, Dänemark
- 02.12.2005** *Graph-theoretic challenges in the Design of Survivable Optical Networks*  
Invited Talk, Graph Theory 2005, Nyborg, Dänemark

**Susanna Kube**

- 21.03.2005** *Clustering of Metastable Sets given by Transition Rates*  
Informelles Seminar der Arbeitsgruppe um Prof. Schuster, Institut für Theoretische Chemie und Molekulare Strukturbiologie, Universität Wien, Österreich

**21.10.2005** *Results of Cluster Analysis in the Occasion of the Autumn Meeting of AG DANK*  
Herbsttagung der Arbeitsgemeinschaft für Datenanalyse und Klassifizierung, München

### **Monika Kuberek**

**22.02.2005** *Verbundkatalog Film*

13. Tagung des Arbeitskreises Filmbibliotheken, Amerika-Gedenkbibliothek, Berlin

**15.03.2005** *KOBV-Konsortialportal – eine Dienstleistung der KOBV-Zentrale zum Aufbau und Betrieb lokaler Portale*

94. Deutscher Bibliothekartag „Geld ist rund und rollt weg, aber Bildung bleibt (Heinrich Heine)“, Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf

**10.06.2005** *Überregionale Zusammenarbeit der Verbände*

4. KOBV-Forum „Vernetzte Dienste – Kooperationen und Partnerschaft im KOBV“, ZIB

**09.09.2005** *KOBV-Volltextserver – Langfristiger Zugriff auf Kluwer-, Springer- und Elsevier-Zeitschriften*

Tagung der Arbeitsgemeinschaft der Spezialbibliotheken (ASpB) 2005 „Spezialbibliotheken zwischen Auftrag und Ressourcen“, Technische Universität München

**24.09.2005** *KOBV-Informationdienstleistungen – für Bibliotheken – für Bildung und Wissenschaft*

Tag der Bibliotheken in Berlin und Brandenburg „Seid Net(z) zueinander. Wissen – Netze – Bildung“, DBV-Landesverbände Berlin und Brandenburg gemeinsam mit den regionalen Landesverbänden von BIB und VDB, Technische Universität Berlin

### **Hans Lamecker**

**10.05.2005** *Statistical Shape Modeling*

AO Development Institute, Davos, Schweiz

**02.03.2005** *Statistical Shape Modeling for Planning of Craniosynostosis Surgery*

GI Arbeitskreis Medizinische Visualisierung, Magdeburg

**26.08.2005** *Medical Applications for 3D Statistical Shape Models*

Int. Conf. on Computer Aided Surgery around the Head, Berlin

**24.09.2005** *Medical Applications for 3D Statistical Shape Models*

GI-Arbeitskreis Medizinische Visualisierung, Berlin

### **Monika Lill**

**22.02.2005** *Vortrag zum Verbundkatalog Film – Vorführung*

Treffen des Arbeitskreises Filmbibliotheken, Amerika-Gedenkbibliothek, Berlin

**15.03.2005** *Konsortiallösung – Rechtsmanagement*

2. SMUG-DACH-Treffen, Universität Düsseldorf

### **Stefan Lohrum**

**14.03.2005** *Web-Katalogisierungsschnittstelle für den KOBV-Bibliothekenführer*

Alph-DACH-Tagung, Universität Düsseldorf

- 10.06.2005** *Bestellung per Mausklick – Online-Fernleihe für Endnutzer*  
4. KOBV-Forum „Vernetzte Dienste – Kooperation und Partnerschaft im KOBV“, ZIB, Berlin
- 14.06.2005** *Integration der Verbundfernleihe in den SISIS-InfoGuide*  
20. Anwenderforum Berlin-Brandenburg, Cottbus
- 15.06.2005** *The Cooperative Library Network Berlin-Brandenburg*  
Workshop „Municipal libraries as modern public institutions“, Warschau, Polen

### Joachim Lügger

- 15.02.2005** *The Virtual Document Store of the KOBV*  
Short Contribution to the Joint Ex Libris/Customer Strategy Group, Boston, USA
- 16.02.2005** *The Berlin School of Mathematics – Vision of Some Design Features of a Scientific Portal*  
Contribution to the Joint Ex Libris/Customer Strategy Group, Boston, USA
- 14.09.2005** *Verzicht auf internationale Standards?*  
Beitrag zur Podiumsdiskussion der 9. Verbundkonferenz des GBV, Universitätsbibliothek, HSU Hamburg

### Frank Lutz

- 07.01.2005** *Zufällig realisierte Flächen*  
Sächsischer Geometrietag 2005, Dresden
- 07.02.2005** *Flächen, Sphären und Bälle*  
Optimierungsseminar, TU Darmstadt
- 14.02.2005** *Farben und Flächen: Computergestützte Theorie für angewandte Probleme*  
Zentrum Mathematik, TU München
- 01.07.2005** *Triangulated Manifolds*  
Workshop on Computational Geometry and Topology, FoCM'05, Universidad de Cantabria, Santander, Spanien
- 02.11.2005** *Triangulierte Mannigfaltigkeiten in Geometrie, Topologie und Kombinatorik*  
Mathematisches Kolloquium, Philipps-Universität Marburg
- 07.11.2005** *Extremal examples of triangulations*  
Conference on Combinatorial Geometries and Applications: Oriented Matroids and Matroids, CIRM, Marseille-Luminy, Frankreich
- 13.12.2005** *Constructive, Enumerative and Randomized Methods in Computational Topology*  
Habitationsvortrag, TU Berlin

### Brigitte Lutz-Westphal

- 01.03.2005** *Mit angewandter diskreter Mathematik neue (Denk-)Wege gehen*  
Universität Bielefeld
- 22.04.2005** *Wozu Mathematik? Lernziel: den Sinn von Mathematik erleben*  
technische Universität Darmstadt

**03.05.2005** *Unterrichtsvorschläge zur diskreten Mathematik*

Universität Hamburg

**16.06.2005** *Kombinatorische Optimierung als Baustein einer fundierten mathematischen Schulbildung*

Universität Dortmund

**12.07.2005** *Kombinatorische Optimierung als Baustein einer fundierten mathematischen Schulbildung*

Universität Jena

**01.11.2005** *Diskrete Mathematik für die Schule*

Universität Marburg

### **Patrick May**

**22.06.2005** *CASP6: Insights and results*

BCB-Symposium, Berlin

### **Sebastian Orłowski**

**10.01.2005** *An Integer Programming Approach to Multi-Layer Network Design*

Graduiertenkolleg CGC, TU Berlin

**23.06.2005** *Modelling and Solving Multi-layer Network Design Problems*

DEI Politecnico di Milano, Italien

**18.10.2005** *A Computational Study for Demand-wise Shared Protection*

DRCN 2005, Ischia, Italien

### **Marc Pfetsch**

**10.02.2005** *Linienplanung im Öffentlichen Verkehr*

Workshop über Strategische Planung im ÖPNV, IVU Traffic Technologies AG, Berlin

**04.04.2005** *Strategic Planning in Public Transport*

Center Days 2005, Berlin

**08.09.2005** *Routing in Line Planning for Public Transport*

Operations Research 2005, Bremen

**21.11.2005** *Line Planning in Public Transport*

Optimierungsseminar, TU Darmstadt

### **Konrad Polthier**

**14.02.2005** *Effective Optimization of Polyhedral Shapes*

Institut für Mathematik, TU München

**31.03.2005** *Effective Optimization of Polyhedral Shapes*

Dept. Mathematics and Computational Science, IU Bremen

**15.04.2005** *Surface Optimization and Compression*

Informatik Kolloquium, FU Berlin

- 28.04.2005** *Efficient Optimization of Curves and Surfaces in CAD*  
„Colloquium Jacques Morgenstern“, INRIA Sophia Antipolis, Frankreich
- 01.06.2005** „*Surface optimization and feature extraction*“, MATHEON *workshop on optimization software*, ZIB, Berlin
- 24.06.2005** *Effective Optimization of Polyhedral Shapes*  
Institut für Mathematik, FU Berlin
- 11.11.2005** *Computing periodic discrete minimal surfaces*  
Serbian Academy of Sciences and Art (SANU), Belgrad, Serbien

### **Eike Preuss**

- 08.09.2005** *Workshop on JavaView*  
Summer School on Open Software for Algebraic and Geometric Computation, INRIA, Sophia Antipolis, Frankreich
- 08.12.2005** *Evolution of 3D Curves under Strict Spatial Constraints*  
CAD/Graphics Conference 2005, HKUST, Hongkong

### **Steffen Prohaska**

- 03.02.2005** *Remote Data Access for Interactive Visualization*  
13th Annual Mardi Gras Conference: Frontiers of Grid Applications and Technologies, Baton Rouge, USA
- 21.04.2005** *Interactive Visualization of Large Remote AMR Data*  
Visualisierungsworkshop, Universitätszentrum der Universität Innsbruck, Österreich
- 27.04.2005** *Highly Interactive Data Analysis and Visualization with Amira*  
SGI VizDays, Rüsselsheim
- 17.10.2005** *Rekonstruktion von Blutgefäßnetzwerken*  
Neuro-Workshop, ZIB, Berlin

### **Alexander Reinefeld**

- 01.02.2005** *Requirements for Grid Operating Systems: Scalability, Autonomicity, Mobility*  
IST Call 5 Preparatory Workshop, Brüssel, Belgien
- 16.03.2005** *Requirements for GridOSs from an Application and User View*  
Workshop on Network Centric Operating Systems, Brüssel, Belgien
- 18.03.2005** *Verteiltes Storage- und Datenmanagement*  
IBM Academic Days, Böblingen
- 20.04.2005** *The German D-Grid Initiative and the Data-Management Challenge*  
Keynote, Western Grid Summit, Banff, Kanada
- 02.06.2005** *Die Entwicklung der Spielprogrammierung: Von John von Neumann zur hochparallelen Schachmaschine*  
Ringvorlesung, HU Berlin
- 14.06.2005** *Data Grids: Challenges in World-Wide Data Management*  
Hermann-von-Helmholtz-Symposium, Berlin

- 21.-24.06.2005** *Scalable Data Management on Distributed Systems and Grids*  
International Supercomputer Conference, Heidelberg
- 27.09.2005** *Overview of GridCoord SSA*  
FP7 Consultation Workshop: From Grids towards service-oriented knowledge utilities,  
Brüssel, Belgien
- 21.10.2005** *Management verteilter Rechen- und Datenressourcen*  
IBM Research Day, HU Berlin

### Thomas Röblitz

- 06.04.2005** *Co-Reservation of Resources*  
Research Visit at IMAG ID, Grenoble, Frankreich
- 18.08.2005** *Co-Reservation of Resources in the Grid*  
Forschungsseminar der AG H.-U. Heiß an der TU Berlin
- 25.11.2005** *Co-Reservation of Resources in the Grid*  
Forschungsseminar der AG B. Schnor an der Universität Potsdam

### Robert Roggenbuck

- 10.05.2005** *Glossare als Informationsdienste – Das Beispiel Math&Industry*  
11. IuK-Jahrestagung 2005, Bonn-Bad Godesberg
- 12.09.2005** *Angewandte Mathematik im Netz: Die Math&Industry-Dienste*  
Berliner XML-Tage 2005
- 20.09.2005** *Expert Databases, Glossaries and Further Services for Mathematics and Industry*  
Jahrestagung der DMV 2005, im Rahmen des Minisymposiums „Applied Mathematics  
on the Web“, Klagenfurt, Österreich

### Beate Rusch

- 15.03.2005** *Weiterentwicklung gleich Funktionsverlust? Verlust + Gewinn in MetaLib Version 3*  
2. SMUG-DACH-Treffen, Universität Düsseldorf
- 12.05.2005** *Portals at KOBV*  
Consortia-Workshop, University of Helsinki, Finnland
- 10.06.2005** *Fremddatenübernahme: regional – überregional – international*  
4. KOBV-Forum „Vernetzte Dienste – Kooperation und Partnerschaft im KOBV“, ZIB,  
Berlin
- 15.09.2005** *Report from SMUG-DACH: SFX-MetaLIB User Group of German Speaking Countries*  
International SMUG-Conference, 15–16.09.2005, London British Library, London, Groß-  
britannien
- 28.10.2005** *SMUG-D-A-CH-Li-Lux: Business und Berichte*  
3. Treffen der deutschsprachigen SFX/MetaLib-Anwendergruppe, Generalverwaltung  
der Max-Planck-Gesellschaft, München

**Carlos Saro**

**12.05.2005** *Der Einsatz von GOS am Deutschen Historischen Museum*  
Fachhochschule für Technik und Wirtschaft Berlin, Bereich Museologie

**06.07.2005** *Einsatz von kontrolliertem Vokabular in GOS*  
Tagung der AG Software der Fachgruppe Dokumentation „Museumssoftware im Verbund – Thesaurusmodule und Nutzung von kontrolliertem Vokabular“, ZIB, Berlin

**Achim Schädle**

**13.01.2005** *Schwarz methods for Helmholtz scattering problems using the PML method at interfaces*  
DD16, (16th International Conference on Domain Decomposition methods) Courant Institute, New York City, USA

**30.03.2005** *Domain Decomposition for the 2D Helmholtz equation*  
GAMM 2005, Luxemburg

**13.05.2005** *A non-overlapping Schwarz-algorithm for scattering problems using the PML method at interfaces*  
Arbeitsgemeinschaft Numerische Mathematik, Universität Tübingen

**20.06.2005** *A non-overlapping Schwarz-algorithm for scattering problems using the PML method at interfaces*  
Arbeitsgruppe Angewandte Mathematik, Universität Düsseldorf

**30.06.2005** *Fast and oblivious convolution*  
NA05 (Conference on Numerical Analysis), Dundee, Großbritannien

**Anton Schiela**

**20.07.2005** *A Function Space oriented Interior Point Optimization Algorithm for Hyperthermia Treatment Planning*  
CIM Workshop on Optimization in Medicine, Coimbra, Portugal

**28.07.2005** *The Control Reduced Interior Point Method*  
CIM Workshop on PDE Constrained Optimization, Tomar, Portugal

**Florian Schintke**

**20.-21.09.2005** *Distributed Data Management in the Grid*  
C3Grid Workshop, Alfred-Wegener-Institut Bremerhaven

**12.10.2005** *SRB – Storage Resource Broker*  
DGI-Meeting, DESY Hamburg

**24.11.2005** *SRB – Storage Resource Broker*  
Scheduling und Datenmanagement Workshop, Dortmund

**Thomas Schlechte**

**08.09.2005** *A Column Generation Approach to Airline Crew Scheduling*  
Symposium über Operations Research 2005, Universität Bremen



**06.10.2005** *Railway Slot Exchange Auctioning*

Conference on Applied Infrastructure Research, Technische Universität Berlin

**Frank Schmidt****14.01.2005** *Spezielle mathematische Probleme bei der Analyse nano-strukturierter Materials*

Vortrag am Fachbereich Mathematik, Universität Marburg

**20.09.2005** *Finite Element Methods for Optical Device Design*

5th International Conference Numerical Simulation of Optoelectronic Devices (NUSOD) 2005, Berlin

**05.10.2005** *Benchmark of FEM, Waveguide and FDTD Algorithms for Rigorous Mask Simulation*

25th Annual BACUS Symposium on Photomask Technology, Monterey, USA

**03.02.2005** *Numerische Lösung der Maxwell'schen Gleichungen mit der Finite-Elemente-Methode*

Arbeitstreffen Metrologie von EUV-Masken, AG EUV Radiometry, Physikalisch-Technische Bundesanstalt Berlin

**17.06.2005** *Computational Photonics*

Arbeitstreffen mit der Arbeitsgruppe Bimberg, Institut für Festkörperphysik, Technische Universität Berlin

**28.09.2005** *Pole Condition: A General Scheme for the Construction of Transparent Boundary Conditions for PDEs*

Workshop New Trends in PDEs, WIAS Berlin

**Johannes Schmidt-Ehrenberg****02.02.2005** *Chemie in 3D – wissenschaftliche Visualisierung*

Gesellschaft Deutscher Chemiker, Jungchemikerforum Marburg

**22.06.2005** *A molecular alignment strategy based on stable substructures*

Berliner Centrum fuer Genombasierte Bioinformatik – BCB Symposium, Berlin

**27.09.2005** *Visual Analysis of Molecular Conformations by Means of a Dynamic Density Mixture Model*

Computational Life Sciences, First International Symposium, Konstanz

**08.12.2005** *Controllability of complex systems, Vortrag mit Online-Stereodemonstrationen, Sprecher: Hans-Christian Hege, Christof Schütte*

Besuch von Richard F. Rashid, Senior Vice President, Research, Microsoft, am ZIB

**Wolfram Sperber****10.05.2005** *Suchmaschinen, Strukturierung und Metadaten*

11. IuK Jahrestagung 2005, Bonn-Bad Godesberg

**12.09.2005** *Angewandte Mathematik im Netz: Die Math&Industry-Dienste*

Berliner XML-Tage 2005

**20.09.2005** *Applied Mathematics on the Web – Needs, Initiatives and Perspectives*

Jahrestagung der DMV 2005, Minisymposium „Applied Mathematics on the Web“, Klagenfurt, Österreich

**Marc Steinbach**

- 18.01.2005** *Tree-Sparse Modeling and Solution of Multistage Stochastic Programs*  
Algorithms for Optimization with Incomplete Information, Dagstuhl
- 04.03.2005** *NLP Approaches to MINLP in Nonlinear Network Dynamics*  
University of Cambridge, England
- 14.03.2005** *Betriebsoptimierung der Berliner Trinkwasserversorgung*  
Fachhochschule Nürnberg
- 01.04.2005** *Sparse Solvers for Nonlinear Stochastic Programs on Scenario Trees*  
GAMM-Jahrestagung 2005, Luxemburg
- 11.04.2005** *Nichtlineare Optimierung über Bäumen und Netzwerken*  
Universität Hannover
- 18.04.2005** *Entscheidung unter Unsicherheit mittels stochastischer Optimierung*  
Fachhochschule Vorarlberg, Dornbirn, Österreich
- 18.05.2005** *Fast NLP Solution for Operating Gas Pipeline Networks*  
SIAM Conference on Optimization, Stockholm, Schweden
- 26.05.2005** *Gemischt-ganzzahlige nichtlineare Optimierung zur Betriebsplanung in Trinkwassernetzen*  
Seminar Optimierung, ZIB, Berlin
- 01.06.2005** *Topological Rank Criteria in Operative Planning for Water Networks*  
Forschungsseminar „Numerik stochastischer Modelle“, HU Berlin
- 01.06.2005** *Modular Codes for NLP, QP, and KKT systems*  
MATHEON-Workshop “Optimization Software”, Berlin
- 09.06.2005** *Discrete Decisions in Nonlinear Planning Models for Water Supply Networks*  
IWR, Universität Heidelberg
- 07.09.2005** *MINLP for Pump Operation in Incompressible Network Flow*  
International Conference on Operations Research, Bremen
- 09.09.2005** *NLP Structure in Operative Planning for Gas and Water Networks*  
International Conference on Operations Research, Bremen
- 22.09.2005** *Transient Technical Optimization in Gas Networks*  
Workshop in Optimized Gas Transportation, Bergen, Norwegen
- 29.09.2005** *Fast Solution of Nonlinear Multistage Stochastic Programs*  
Conference on Optimization Under Uncertainties, Heidelberg
- 14.10.2005** *Industry Projects and Scientific Consulting at Zuse Institute Berlin*  
Industrial Workshop, Coimbra, Portugal
- 20.10.2005** *Fast Algorithms for Nonlinear Multistage Stochastic Programs*  
GOR Workshop Optimization Under Uncertainty, Bad Honnef
- 05.12.2005** *Szenariobaum-Optimierung im Portfoliomanagement*  
Fachhochschule Vorarlberg, Dornbirn, Österreich

**06.12.2005** *Effiziente Algorithmen zur Szenariobaum-Optimierung*

Workshop PortMaSt, Dornbirn, Österreich

**09.12.2005** *DAE-Randwertprobleme zur Betriebsplanung in Versorgungsnetzen*

TU Dresden

### **Thomas Steinke**

**25.04.2005** *MediGRID – DGrid-Verbundvorhaben*

DGrid-Plenarsitzung, Heidelberg, mit Otto Rienhoff (Universität Göttingen), Dagmar Krefting (Charité Berlin), Ulrich Sax (Universität Göttingen), Sebastian Semler (TMF Berlin), Anette Weisbecker (Fraunhofer-Institut für Arbeitswirtschaft und Organisation IAO, Stuttgart)

**13.10.2005** *Structure Prediction Pipeline@ZIB*

HOBIT-Meeting, Berlin

**22.11.2005** *MediGRID – Anwendungen und -Ressourcenprovider*

MediGRID-Anwender- und Entwickler-Workshop, Berlin

### **Rüdiger Stephan**

**06.12.2005** *Polytope in Verbindung mit längenbeschränkten gerichteten Kreisen*

Dies Mathematicus, TU Berlin

### **Manfred Stolle**

**05.04.2005** *Optimizing reasonably secure long distance data transfer*

4th HLRS/hww Workshop on Scalable Global Parallel File Systems

**13.04.2005** *Optimizing reasonably secure long distance data transfer – How to transfer data while being poor*

22nd IEEE – 13th NASA Goddard Conference on Mass Storage Systems and Technology

**05.09.2005** *How to transfer data while being poor*

GRID-Day, Albert-Einstein-Institut Potsdam, Golm

### **Hinnerk Stüben**

**25.-30.7.2005** *Transnational Access to Mass Storage Capacity for Computational QCD*

Poster, Lattice 2005 – The XXII International Symposium on Lattice Field Theory, Dublin, Irland

**17.09.2005** *Mass Storage Capacity for Computational Hadron Physics*

Workshop on Computational Hadron Physics, Nicosia, Griechenland

### **Andreas Tuchscherer**

**08.04.2005** *Optimierung von Roboterschweißpfaden*

Abschlusspräsentation einer Studie für Volkswagen, Wolfsburg

**06.10.2005** *The Online Target Date Assignment Problem*

Workshop on approximation and online algorithms (WAOA 2005), Palma de Mallorca, Spanien

**28.10.2005** *Das Online-Terminvergabe-Problem*

Treffen der GOR-Arbeitsgruppe Supply Chain Management, IBM Deutschland GmbH, Mainz

**Max Wardetzky****11.11.2005** *A Las-Vegas algorithm for computing harmonic vector fields on polyhedral surfaces*

Meeting on Multimedia Technology for Mathematics and Computer Science Education, Belgrad, Serbien

**Marcus Weber****09.03.2005** *Indicator for the Number of Clusters using a Linear Map to Simplex Structure*

29. Tagung der deutschen Gesellschaft für Klassifizierung, Magdeburg

**21.03.2005** *Clustering of Metastable Sets given by Transition Rates*

Arbeitsgruppe Prof. Schuster, Institut für Theoretische Chemie und Molekulare Strukturbiologie, Universität Wien, Österreich

**26.05.2005** *Meshfree Methods in Conformation Dynamics*

2005 International Conference on Scientific in Nagoya, Japan

**22.06.2005** *Meshfree Methods in Conformation Dynamics*

Symposium im Berliner Centrum für Genombasierte Bioinformatik (BCB), Berlin

**27.09.2005** *Robust Perron Cluster Analysis for Various Applications in Computational Life Science*

The 1st International Symposium on Computational Life Science, Konstanz

**24.11.2005** *Meshless Methods in Conformation Dynamics*

Arbeitsgruppe M. Dellnitz, Institut für Angewandte Mathematik, Universität Paderborn

**Tino Weinkauff****22.06.2005** *Coherent Structure Tracking in Time-Dependent Flows*

Gastvortrag an der TU Berlin

**29.09.2005** *Feature Flow Fields in Out-of-Core Settings*

TopoInVis 2005, Budmerice, Slowakei

**27.10.2005** *Extracting Higher Order Critical Points and Topological Simplification of 3D Vector Fields*

IEEE Visualization 2005, Minneapolis, USA

**Martin Weiser****30.03.2005** *Affine conjugate adaptive Newton methods for nonlinear elastomechanics*

76th annual GAMM conference, Luxemburg

**20.07.2005** *Primal and primal-dual interior point methods for optimal control with PDEs*

22nd IFIP TC 7 Conference on System Modelling and Optimization, Turin, Italien

**11.08.2005** *Control reduced interior point methods in function space*

4th International Conference on Complementarity Problems, Stanford University, USA

**26.09.2005** *Optimization and identification in hyperthermia treatment planning, Workshop New Trends in Simulation and Control of PDEs*  
WIAS Berlin

**11.11.2005** *Interior Point Methods and Parametric Sensitivity in Optimal Control*  
Third German-Polish Conference on Optimization Methods and Applications, Będlewo, Polen

### **Roland Wessäly**

**21.03.2005** *Demand-wise Shared Protection: A computational study*  
2nd International Network Optimization Conference (INOC 2005), Lissabon, Portugal

**04.05.2005** *Demmand-wise shared protection*  
6. ITG Fachtagung, Leipzig, Deutschland

**27.05.2005** *A proposal for a network design library*  
COST 293, Paris, Frankreich

**20.06.2005** *Optimization in Telecommunications*  
Kolloquium, Lehrstuhl Informatik, Universität Würzburg

**28.09.2005** *Optimization in Telecommunications*  
Business School, Fribourg, Schweiz

**18.10.2005** *Official launch of the survivable network design data library*  
5th International Workshop on Design of Reliable Communication Networks (DRCN 2005), Ischia, Italien

### **Stefan Zachow**

**04.02.2005** *Computergestützte 3D-Osteotomieplanung in der MKG-Chirurgie: Modellgenerierung, Planung, Weichgewebesimulation*  
Disputationsvortrag an der Technischen Universität Berlin

**12.03.2005** *Maxillofacial Surgery Planning with 3D Soft Tissue Prediction – Modeling, Planning, Simulation*  
2nd Int. Conference on Advanced Digital Technology in Head and Neck Reconstructions, Banff, Kanada

**22.04.2005** *Computergestützte Operationsplanung in der Gesichtschirurgie*  
Vortrag mit 3D-Präsentation für Studenten der Universität Kaiserslautern, Graduate School „Mathematics as a Key Technology“

**19.05.2005** *Bilder aus der Wissenschaft – Visualisierung am ZIB*  
3D-Präsentation für die Arbeitsgruppe „Das Technische Bild“ des Hermann von Helmholtz-Zentrums für Kulturtechnik, ZIB, Berlin

**17.06.2005** *Die Mimik in der Virtuellen Realität*  
1. Bernd-Spiessl-Symposium für innovative und visionäre Technologien, Basel, Schweiz

**24.06.2005** *Reconstruction of Mandibular Dysplasia using a Statistical 3D Shape Model*  
11. Computed Maxillofacial Imaging Congress, Berlin

**Lin Zschiedrich**

- 25.01.2005** *JCMmode: An Adaptive Finite Element Solver for the Computation of Leaky Modes*  
Photonics West 2005, San José, USA
- 01.04.2005** *Computation of Resonances in Optical Devices*  
GAMM 2005, Luxemburg
- 21.09.2005** *Domain Decomposition Method for Electromagnetic Scattering Problems: Application to EUV Lithography*  
Numerical Simulation of Optoelectronic Devices (NUSOD), Berlin

**Adrian Zymolka**

- 10.02.2005** *Optimization in Optical Network Design*  
Besuch von Michal Pioro (Warschau), ZIB, Berlin
- 21.03.2005** *Linear Programming Lower Bounds for Minimum Converter Wavelength Assignment in Optical Networks*  
International Network Optimization Conference (INOC 2005), Lissabon, Portugal
- 15.04.2005** *A Column Generation Approach for Wavelength Assignment with Converters*  
Second Workshop on Optimization of Optical Networks (OON 2005), Montreal, Kanada
- 20.04.2005** *Wavelength Assignment in WDM Networks by Integer Programming*  
IBM T. J. Watson Research Center, Yorktown, USA
- 21.04.2005** *A Column Generation Approach for Wavelength Assignment with Converters*  
Columbia University, New York, USA
- 29.07.2005** *Optimization of Survivable Optical Networks*  
Siemens AG, München

## 7.2 Vorlesungen und Seminare

### Artur Andrzejak: FU Berlin

**SS 05** *Anwendungen und spezielle Themen in Data Mining* (Seminar)

**WS 05/06** *Data Mining – Algorithmen und Anwendungen* (Vorlesung)

### Wolfgang Baumann: TU Berlin

**WS 04/05** *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, TU Berlin)

**SS 05** *Verkehrsoptimierung* (Vorlesung, TU Berlin)

**WS 05/06** *Crew Scheduling Problems, Vehicle Scheduling Problems, Combinatorial Auctions and Rail Track Scheduling* (3 Vorlesungen mit Übungen im Blockkurs Combinatorial Optimization at Work, ZIB)

### Manfred Brandt: HU Berlin

**SS 05** *Geometrische Funktionentheorie* (Vorlesung)

### Frank Cordes: FU Berlin

**WS 04/05** *Visualisierung, Modellierung, Dynamik und Simulation von Biomolekülen* (Softwarepraktikum, Mitveranstalter: T. Steinke, ZIB)

**WS 04/05, SS 05** *Moleküle im Rechner* (Seminar, Mitveranstalter: Ch. Schütte, W. Huisinga, und B. Schmidt, FU Berlin)

**SS 05** *Der lange Weg zum Wirkstoff* (Seminar, Mitveranstalter: W. Huisinga, FU Berlin)

### Peter Deuffhard: FU Berlin

**WS 04/05, SS 05, WS 05/06** *Oberseminar Numerische Mathematik und Scientific Computing*  
(Mitveranstalter: R. Klein (FU Berlin/PIK/ZIB), R. Kornhuber (FU Berlin), Ch. Schütte (FU Berlin), J. Sprekels (HU/WIAS), F. Tröltzsch (TUB))

**WS 04/05, SS 05, WS 05/06** *Seminar für Diplomanden und Doktoranden*  
(Mitveranstalter: R. Klein (FU Berlin/PIK/ZIB), R. Kornhuber (FU Berlin), Ch. Schütte (FU Berlin))

**SS 05** *Numerik III* (Vorlesung, Mitveranstalter: M. Weiser, ZIB)

**SS 05** *Mathematische Modellierung und Simulation in Medizin und Biologie* (Projektseminar, Mitveranstalter: M. Weiser, ZIB)

**SS 05** *Seminar Homogenisierung – Analysis und Numerik*  
(Mitveranstalter: R. Hochmuth (TU Bergakademie Freiberg/Universität Kassel))

**WS 05/06** *Seminar Modellierung und Simulation in Medizin und Biologie*

(Mitveranstalter: R. Kornhuber (FU Berlin))

**WS 05/06** *Proseminar Numerische Lineare Algebra*

(Mitveranstalter: R. Kornhuber (FU Berlin))

**Martin Grötschel: TU Berlin**

**WS 04/05** *Spieltheorie und kombinatorische Auktionen* (Blockseminar)

**WS 05/06** *Combinatorial Optimization at Work* (Blockseminar)

**WS 05/06** *Spieltheorie in der Telekommunikation* (Blockseminar)

**Tobias Harks: TU Berlin**

**WS 05/06** *Spieltheorie in der Telekommunikation* (Blockseminar)

**Hans-Christian Hege: FU Berlin**

**WS 04/05** *Rechnen in der Wissenschaft (Computing in Science)* (Ringvorlesung)

**WS 04/05** *Quantenmechanik – visualisiert* (Seminar)

**Hans-Christian Hege: Hochschule für Digitale Medienproduktion, Elstal**

**WS 04/05** *Scientific Visualization and Simulation* (Blockkurs)

**SS 05** *Scientific Visualization and Simulation* (Blockkurs)

**WS 05/06** *Scientific Visualization and Simulation* (Blockkurs)

**Hans-Christian Hege: Universidad Pompeu Fabra, Barcelona, Spanien**

**WS 04/05** *Advanced Image Processing and Computer Graphics* (Blockkurs, Mitveranstalter: V. Caselles (UPF Barcelona), Jean-Michel Morel (Centre de Mathématiques et de Leurs Applications, Cachan, Frankreich))

**WS 05/06** *Advanced Image Processing and Computer Graphics* (Blockkurs, Mitveranstalter: V. Caselles (UPF Barcelona), Jean-Michel Morel (Centre de Mathématiques et de Leurs Applications, Cachan, Frankreich))

**Hans-Christian Hege: Université de Valenciennes et Maubeuge, Frankreich**

**SS 05** *Summer school „Mathematical Visualization“, Lecture Series on „Discrete Differential Geometry and Visualization“* (Vorlesung)

**Volker Kaibel: TU Berlin**

**SS 05** *Fortgeschrittene Methoden der Ganzzahligen Linearen Programmierung* (Vorlesung)

**WS 05/06** *Analysis I für Ingenieure* (Vorlesung)

**Thorsten Koch: Berufsakademie Berlin**

**WS 05/06** *Graphentheorie* (Vorlesung)



**Arie M. C. A. Koster: TU Berlin**

SS 05 *Mathematics for Engineers I (GPE)* (Vorlesung)

SS 05 *Mathematics for Engineers I (GPE)* (Übung)

WS 05/06 *Mathematics for Engineers II (GPE)* (Vorlesung)

WS 05/06 *Mathematics for Engineers II (GPE)* (Übung)

**Monika Kuberek: HU Berlin**

WS 04/05 *Bibliothekarische Verbände* (Seminar)

WS 05/06 *Bibliothekarische Verbände* (Seminar)

**Frank Lutz: TU Berlin**

WS 04/05 *Schnellkurs Ingenieurmathematik (Analysis I und II und Lineare Algebra)* (Vorlesung)

WS 04/05 *Spieltheorie und kombinatorische Auktionen* (Seminar)

WS 04/05 *Schnellkurs Ingenieurmathematik (Analysis I und II)* (Vorlesung)

**Marc Pfetsch: TU Berlin**

WS 05/06 *Analysis I für Ingenieure* (Vorlesung)

WS 05/06 *Spieltheorie in der Telekommunikation* (Blockseminar)

**Konrad Polthier: FU Berlin und TU Berlin**

WS 04/05 *Einführung in Scientific Visualization, zusammen an FU Berlin und TU Berlin* (Vorlesung)

WS 05/06 *Einführung in Scientific Visualization, zusammen an FU Berlin und TU Berlin* (Vorlesung)

**Konrad Polthier: Université de Valenciennes et Maubeuge, Frankreich**

SS 05 *Summer school „Mathematical Visualization“, Lecture Series on „Discrete Differential Geometry and Visualization“* (Vorlesung)

**Alexander Reinefeld: HU Berlin**

SS 05 *Verteilte Systeme: Konzepte und Basisalgorithmen* (Vorlesung), Mitveranstalter: A. Andrzejak (ZIB)

SS 05 *Ressourcen-Management im Cluster und Grid* (Seminar), Mitveranstalter: T. Röblitz (ZIB)

SS 05 *Forschungsseminar Grid Computing* (Seminar)

WS 05/06 *Parallele Algorithmen in der Bioinformatik* (Seminar), Mitveranstalter: T. Steinke (ZIB)

WS 05/06 *Forschungsseminar Grid Computing* (Seminar)

**WS 05/06** *FPGA-Programmierung für die Bioinformatik auf der Cray XD1* (Projekt), Mitveranstalter: T. Steinke, T. Schütt (ZIB)

**Achim Schädle: Freie Universität Berlin**

**WS 05/06** *Numerische Lineare Algebra* (Proseminar)

**Thomas Schlechte: TU Berlin**

**WS 05/06** *Combinatorial Auctions and Rail Track Scheduling* (Übung im Blockkurs Combinatorial Optimization at Work, ZIB)

**WS 05/06** *Spieltheorie in der Telekommunikation* (Blockseminar)

**Marc Steinbach: HU Berlin**

**WS 04/05** *Forschungsseminar Numerik stochastischer Modelle* (Seminar, mit R. Henrion und W. Römisch)

**SS 05** *Forschungsseminar Numerik stochastischer Modelle* (Seminar, mit R. Henrion und W. Römisch)

**Thomas Steinke: TFH Berlin**

**SS 05** *Einführung in das Molecular Modeling* (Vorlesung)

**Thomas Steinke: HU Berlin**

**WS 2005/06** *Parallele Algorithmen in der Bioinformatik* (Seminar), Mitveranstalter: A. Reinefeld (ZIB)

**WS 2005/06** *FPGA-Programmierung für die Bioinformatik auf der Cray XD1* (Projekt), Mitveranstalter: A. Reinefeld, T. Schütt (ZIB)

**Hinnerk Stüben: TU Berlin**

**WS 04/05** *Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP* (Integrierte Veranstaltung), Mitveranstalter: W. Baumann (ZIB)

**Hinnerk Stüben: HU Berlin**

**SS 05** *Hochleistungsrechnen für Naturwissenschaftler* (Vorlesung)

**Martin Weiser: FU Berlin**

**SS 05** *Mathematische Modellierung und Simulation in Medizin und Biologie* (Projektseminar, Mitveranstalter: P. Deuffhard, ZIB)

**SS 05** *Numerische Mathematik III* (Vorlesung, Mitveranstalter: P. Deuffhard, ZIB)

### 7.3 Mitveranstalter auswärtiger Tagungen

#### Artur Andrzejak

**17.01.2005** *1st CoreGRID Workshop on GRID and P2P Systems Architecture (Chair)*, Heraklion, Griechenland

#### Wolfgang Dalitz, Wolfram Sperber

**18.–23.09.2005** *Minisymposium „Mathematik und Internet“*, der Fachgruppe Information und Kommunikation (IuK) bei der Jahrestagung 2005 der DMV/ÖMG, Klagenfurt, Österreich

#### Peter Deuffhard

**22.–24.09.2005** *7<sup>th</sup> Hellenic European Research on Computer Mathematics and its Applications (HERCMA) Conference* (Member of the Scientific Programme Committee), Athen, Griechenland

#### Martin Grötschel

**01.06.2005** *MATHEON MF I-Workshop „Optimization Software“*, ZIB

**06.06.–10.06.2005** *IPCO XI (Eleventh Conference on Integer Programming and Combinatorial Optimization)*, TU Berlin

**05.09.–09.09.2005** *EuroComb 2005 (European Conference on Combinatorics, Graph Theory and Applications)*, TU Berlin

#### Volker Kaibel

**06.06.2005–10.06.2005** *Eleventh Conference on Integer Programming and Combinatorial Optimization (IPCO)*, TU Berlin

#### Arie M. C. A. Koster

**09.–11.02.2005** *2nd COST 293 Management Committee meeting und 1st Discussion Workshop*, Mailand, Italien

**27.–28.05.2005** *3rd COST 293 Management Committee meeting*, Paris, Frankreich

**29.09.–01.10.2005** *4th COST 293 Management Committee meeting und 2nd Discussion Workshop*, Barcelona, Spanien

#### Konrad Polthier

**20.–23.06.2005** *Co-Organizer of International Summerschool on “Mathematical Visualization”*, Univ. of Maubeuge and Valenciennes, France

**30.10.–03.11.2005** *Co-Organizer of SIAM “Geometric Design and Computing”*, Phoenix, USA

**01.11.2005** *Co-Organizer of Minisymposium on “Feature Sensitive Mesh Processing” at SIAM “Geometric Design and Computing”*, Phoenix, USA

**Alexander Reinefeld**

**14.–16.02.2005** *EGC 2005 – European Grid Conference (Co-Organisator)*, Amsterdam, Niederlande

**16.–17.03.2005** *CoreGRID Workshop on Network Centric Operating Systems (Co-Organisator)*, Brüssel, Belgien

## TAGUNGEN UND GÄSTE AM ZIB

### 8.1 Gastvorträge

- 14.01.2005** Thomas Severiens (Universität Osnabrück/Institute for Science Networking Oldenburg GmbH, Universität Oldenburg):  
*PhysNet, Math-Net oder lieber gleich e-Science?*
- 10.02.2005** Michal Piore (Warsaw University of Technology, Warschau, Polen):  
*Max Min Fairness and Its Applications in Telecommunication Network Design including Multi-Layer Problems*
- 18.02.2005** Stefan Ulbrich (Fachbereich Mathematik, AG10, Technische Universität Darmstadt):  
*Innere-Punkte-Mehrgitter-Verfahren für Optimierungsprobleme mit partiellen Differentialgleichungen*
- 25.02.2005** Roland Griesse (Johann Radon Institute for Computational and Applied Mathematics (RICAM), Austrian Academy of Sciences, Linz, Austria):  
*Parametric Sensitivity Analysis for Constrained Optimal Control Problems*
- 25.02.2005** Moritz Diehl (IWR, Universität Heidelberg):  
*The astonishing power of sequential quadratic programming in parametric optimization with inequality constraints*
- 25.02.2005** Christian Hellmich (Institut für Mechanik der Werkstoffe und Strukturen, Technische Universität Wien, Österreich):  
*Universelle mechanische Elementarbausteine in Bio- und Baumaterialien: Knochen – Holz – Beton*
- 04.03.2005** Stefan Linden, Christian Enkrich (DFG-Forschungszentrum CFN, Karlsruhe):  
*Hin zu Metamaterialien mit negativem Brechungsindex bei optischen Frequenzen*
- 18.04.2005** Alexander Bockmayr (FU Berlin und DFG-Forschungszentrum MATHEON):  
*Discrete optimization problems in structural biology*
- 18.04.2005** Jose Neto (Institut National des Télécommunications Evry, Frankreich):  
*Acceleration of cutting plane algorithms*
- 28.04.2005** Fanie Terblanche (School for Computer, Statistical and Mathematical Sciences North-West University, Potchefstroom, Südafrika):  
*Experiences with multi-hour survivable network design*
- 02.05.2005** Anand Srivastav (Universität Kiel):  
*Probabilistic Analysis for a Multiple Depot Vehicle Routing Problem*
- 30.05.2005** Guntram Berti (NEC Europe Ltd., C & C Research Laboratories, St. Augustin):  
*Geometric Model Generation for Maxillo-facial Surgery Planning*

- 30.05.2005** Jens Georg Schmidt (NEC Europe Ltd., C & C Research Laboratories, Sankt Augustin):  
*Physical and Numerical Models for Maxillo-facial Surgery Planning*
- 03.06.2005** Romeo Anghelache (MPI für Gravitationsphysik, Potsdam):  
*Hermes – from TeX to MathML*
- 21.06.2005** Susanne Lutz (BIK Beratungsstelle Berlin):  
*Barrierefreie Internetseiten – Sensibilisierung zum Thema Barrierefreiheit*
- 27.06.2005** Burkhard Wünsche (University of Auckland, Australien, Biomedical Imaging & Visualization):  
*Visualization of Biomedical Tensor Fields*
- 28.06.2005** Wolfgang Sander-Beuermann (Regionales Rechenzentrum für Niedersachsen, Universität Hannover):  
*Aktuelle Entwicklungen und Probleme internetbasierter Suchtechnologie*
- 07.07.2005** Bernd Fischer (Universität zu Lübeck, Institut für Mathematik):  
*On Recent Advances in Medical Image Registration*
- 08.07.2005** Shmuel Onn (Technion–Israel Institute of Technology, Haifa, Israel):  
*Convex Combinatorial Optimization*
- 08.07.2005** Joachim Schöberl (Johann Radon Institute for Computational and Applied Mathematics (RICAM)):  
*High Order Finite Elements for Maxwell Equations*
- 13.09.2005** Eitan Grinspun (Columbia University New York, Computer Science Department):  
*Discrete Curvature-Based Energy for Thin Shell Simulation*
- 13.09.2005** Dominique Attali (Laboratoire LIS-CNRS, Grenoble, Frankreich):  
*Medial Axes: Stability and Computation*
- 15.09.2005** Adrienne Fusco (Lehigh University, Bethlehem, Pennsylvania, USA):  
*Base Station Location and Assignment Problem for WCDMA/UMTS Wireless Network Design*
- 28.10.2005** Angela Kunoth (IAM, Universität Bonn):  
*Adaptive Methods for Stationary Variational Problems from a Wavelet Perspective*
- 17.11.2005** Pietro Belotti (DEI, Politecnico di Milano, Mailand, Italien):  
*Optimal oblivious routing with box and statistical uncertainty*
- 22.11.2005** Akiyoshi Shioura (Graduate School of Information Sciences, Tohoku University, Sendai, Japan):  
*Algorithms for M-convex Function Minimization*
- 24.11.2005** Iana Siomina (Dept. of Science and Technology, Linköping University, Schweden):  
*Pilot Power Optimization in Radio Network Planning for UMTS Networks*
- 05.12.2005** Stefan Gumhold (Universität Dresden, Institut für Informatik):  
*GPU Support for Visualization Primitives*
- 21.12.2005** G. Jäger (Universität Halle):  
*Greedy-Heuristiken für das ATSP*

## 8.2 Gastaufenthalte

**Cornelia Kober** (FH Osnabrück)

11.–12.01.2005

**Thomas Severiens** (Universität Osnabrück und Institute for Science Networking Oldenburg GmbH an der Carl-von-Ossietzky-Universität Oldenburg)

14.01.2005

**Marta Szilvasi-Nagy** (Institut für Mathematik, Technische Universität Budapest, Ungarn)

16.–29.01.2005

**Friedel Albat** (Tebis Technische Informationssysteme AG)

26.–27.01.2005

**Fanie Terblanche** (North-West University, Potchefstroom, Südafrika)

01.02.–30.04.2005

**Michal Pioro** (Warsaw University of Technology, Warschau, Polen)

08.02.–11.02.2005

**Roland Griesse** (RICAM, Linz, Österreich)

21.–25.02.2005

**Moritz Diehl** (IWR Heidelberg)

23.02.–01.03.2005

**Konstantin Popov** (Swedish Institute of Computer Science, Stockholm)

28.02.–04.03.2005

**Markus Wacker** (Institut für Informatik, WSI/GRIS, Universität Tübingen und Zuse-Fellow)

01.–11.03.2005

**Stefan Linden** (DFG-Forschungszentrum CFN, Karlsruhe)

04.03.2005

**Christian Enkrich** (DFG-Forschungszentrum CFN, Karlsruhe)

04.03.2005

**Matthias Klein** (DFG-Forschungszentrum CFN, Karlsruhe)

04.03.2005

**Kai Bongs** (Institut für Laserphysik, Universität Hamburg)

04.03.2005

**Peter Moraczewski** (Institut für Laserphysik, Universität Hamburg)

04.03.2005

**Peter Braun-Munzinger** (GSI-Gesellschaft für Schwerionenforschung mbH, Darmstadt)

07.03.2005

**Volker Lindenstruth** (Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg)

07.03.2005

**Johanna Stachel** (Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg)

07.03.2005

**Bo Zhang** (Quantum Optics Group, Universität Potsdam)

15.03.2005

- Anthony Hearn** (RAND, Santa Monica, USA)  
27.03.–29.03.2005
- Norbert Ascheuer** (atesio GmbH, Berlin)  
01.04.–31.12.2005
- José Neto** (Institut National des Télécommunications Evry, Frankreich)  
01.04.–30.06.2005
- Martin Kilian** (Walldürn)  
07.04.2005
- Steffen Weider** (Löbel, Borndörfer & Weider GbR, Berlin)  
01.05.–31.12.2005
- Andrei Hutanu** (CCT, Louisiana State University, USA)  
09.–15.05.2005
- Plamen Simeonov** (Technische Universität Berlin)  
11.05.2005, 24.08.2005, 24.10.2005
- Romeo Anghelache** (Max-Planck-Institut für Gravitationsphysik Potsdam)  
03.06.2005
- Wolfram Büttner** (Infineon Technologies AG)  
06.–08.06.2005
- Thomas Liebling** (Département de Mathématiques, EPFL, Lausanne, Schweiz)  
06.–09.06.2005
- Erhard Winter** (E-Plus Mobilfunk GmbH, Düsseldorf)  
06.–08.06.2005
- Wolfgang Branoner** (Microsoft Deutschland GmbH)  
07.–08.06.2005
- Alfred Louis** (Universität des Saarlandes, Saarbrücken)  
07.–08.06.2005
- Joachim Römelt** (Bayer AG, Leverkusen)  
07.–08.06.2005
- Karl-Viktor von Schöning** (Volkswagen AG, Wolfsburg)  
07.–08.06.2005
- Grosio Stanilov** (Faculty of Mathematics and Informatics, Sofia University, Bulgarien)  
07.–08.06.2005
- Hans-Ulrich Heiß** (Technische Universität Berlin)  
16.06.2005
- Michal Piore** (Warsaw University of Technology, Warschau, Polen)  
16.06.–18.06.2005
- Michal Zagozdzon** (Warsaw University of Technology, Warschau, Polen)  
16.06.–18.06.2005
- Susanne Lutz** (BIK Beratungsstelle Berlin)  
21.06.2005



- Wolfgang Sander-Buermann** (Regionales Rechenzentrum für Niedersachsen, Universität Hannover)  
28.06.2005
- Dietrich Braess** (Institut für Mathematik, Ruhr Universität Bochum)  
04.–08.07.2005
- Joachim Schöberl** (Johann Radon Institute for Computational and Applied Mathematics (RICAM), Linz, Österreich)  
04.–08.07.2005
- Markus Wacker** (Fakultät für Informatik, WSI/GRIS, Universität Tübingen)  
04.–18.07.2005
- Sabine Zaglmayr** (Johann Radon Institute for Computational and Applied Mathematics (RICAM), Linz, Österreich)  
04.–08.07.2005
- Shmuel Onn** (Technion-Israel Institute of Technology, Haifa, Israel)  
08.07.2005
- Seif Haridi** (Swedish Institute of Computer Science, Stockholm)  
13.–14.07.2005, 26.08.2005, 06.–08.12.2005
- Annegret K. Wagler** (Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg)  
13.07.–14.07.2005
- Peter Moraczewski** (Institut für Laserphysik, Universität Hamburg)  
20.–21.07.2005
- Akiyoshi Shioura** (Graduate School of Information Sciences, Tohoku University, Sendai, Japan)  
21.07.–31.12.2005
- Lionel Walter** (damals: Analysis and Scientific Computing Institute, EPFL, Lausanne, Lausanne, Schweiz, jetzt: ZIB, Berlin)  
01.08.–30.09.2005
- Thomas Wolf** (Brock University, St. Catherines, Kanada und ZIB-Fellow)  
04.08.2005–21.12.2005
- Russel Cafilisch** (Department of Mathematics, University of California, Los Angeles, USA)  
11.–26.08.2005
- Maria Lopez-Fernandez** (Departamento de Matemática aplicada, Universidad de Valladolid, Spanien)  
19.–27.08.2005
- María López Fernández** (Departamento de Matemática Aplicada, Valladolid, Spanien)  
22.–26.08.2005
- Pierre Guillaume** (Vrije Universiteit, Amsterdam)  
26.08.2005
- Thorsten Hohage** (Institut für Numerische und Angewandte Mathematik, Georg-August-Universität Göttingen)  
29.08.–02.09.2005

**Lothar Nannen** (Institut für Numerische und Angewandte Mathematik, Georg-August-Universität Göttingen)  
29.08.–02.09.2005

**Adrienne Fusco** (Lehigh University, Bethlehem, USA)  
01.09.–30.11.2005

**Anders Dellson** (Mitronics AB, Schweden)  
12.09.2005

**Sven O. Krumke** (TU Kaiserslautern)  
19.09.–23.09.2005

**Tjark Vredeveld** (Universiteit Maastricht, Niederlande)  
19.09.–23.09.2005

**Gordana Manic** (Instituto de Matemática e Estatística, Universidade de São Paulo, Brasilien)  
03.10.–15.10.2005

**Louise Tranberg** (Centre for Traffic and Transport, Technical University of Denmark, Kgs. Lyngby, Dänemark)  
03.10.–26.10.2005

**Michał Zagózdzon, Mariusz Mycek** (Institute of Telecommunications, Warsaw University of Technology, Polen)  
03.–05.10.2005

**Andres Medaglia** (Universidad de los Andes, Bogota, Kolumbien)  
04.10.–15.10.2005

**Harold Kuhn** (Princeton University, USA)  
24.10.2005

**Carlo D'Angelo** (Institut d'Analyse et Calcul Scientifique (IACS), EPFL Lausanne, Schweiz)  
31.10.–04.11.2005

**Pietro Belotti** (DEI, Politecnico di Milano, Italien)  
01.11.–30.11.2005

**Iana Siomina** (Dept. of Science and Technology, Linköping University, Schweden)  
01.11.–30.11.2005

**Alexander Papaspyrou** (Universität Dortmund)  
04.11.2005

**Ramin Yahyapour** (Universität Dortmund)  
04.11.2005

**Barry Linnert** (Technische Universität Berlin)  
14.12.2005

**Jörg Schneider** (Technische Universität Berlin)  
14.12.2005

**Gerold Jäger** (Universität Halle)  
21.12.2005

### 8.3 Tagungen und Veranstaltungen

**15.02.2005** BCB-Seminar

Veranstalter: Frank Cordes, Thomas Steinke

**23.02.2005** Methoden-Kompetenz-Workshop

Veranstalter: Abteilung Optimierung

**19.05.2005** Workshop der Fachredaktion freie Ressourcen

Veranstalter: Jörn Hasenclever, Andres Imhof, Monika Kuberek

**01.06.2005** MATHEON MF I-Workshop „Optimization Software“

Veranstalter: Martin Grötschel

**10.06.2005** 4. KOBV-Forum: „Vernetzte Dienste – Kooperation und Partnerschaft im KOBV“

Veranstalter: KOBV-Zentrale

**05.07–06.07.2005** Museumssoftware im Verbund – Thesaurusmodule und Nutzung von kontrolliertem Vokabular. Tagung der AG Software der Fachgruppe Dokumentation, (<http://www.museumbund.de/cms/index.php?id=494&L=0>)

Veranstalter: Carlos Saro, Regine Stein

**06.07.2005** Kolloquium für Berliner BibliothekarsreferendarInnen

Veranstalter: Hildegard Franck, Lavinia Hodoroaba, Andres Imhof, Monika Kuberek, Beate Rusch

**20.09.–22.09.2005** Vokabular und Vokabularkontrolle in der Museumsdokumentation: Listen, Klassifikation, Thesauri, (<http://www.museumbund.de/cms/index.php?id=586&L=0>)

Veranstalter: Carlos Saro, Regine Stein

**28.09.2005** Multiplikatoren-schulung für AuskunftsbibliothekarinInnen „Alle Wege führen zum KOBV! – Literaturrecherche und Internetdienste im KOBV-Portal“, ZIB, Berlin, KOBV-Multiplikatoren-schulung I. Teil: „Suchen und Finden“: Dienste und Navigation im KOBV-Portal.

Veranstalter: Jörn Hasenclever

**28.09.2005** Multiplikatoren-schulung für AuskunftsbibliothekarinInnen „Alle Wege führen zum KOBV! – Literaturrecherche und Internetdienste im KOBV-Portal“, ZIB, Berlin, KOBV-Multiplikatoren-schulung II. Teil: „Finden und Erhalten“: Zugang zu elektronischen Volltexten, Tipps und Tricks.

Veranstalter: Andres Imhof

**04.10.–15.10.2005** „Combinatorial Optimization at Work“

Veranstalter: Martin Grötschel

**17.10.2005** Workshop „Virtuelle Labors in der Neurobiologie“, ZIB

Veranstalter: Hans-Christian Hege

**17.10.–19.10.2005** Berliner Herbsttreffen zur Museumsdokumentation

Veranstalter: Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund, Institut für Museumskunde Staatliche Museen zu Berlin <http://www.museumbund.de/cms/index.php?id=608&L=0>)

- 27.-28.10.2005** GridCoord Retreat  
Veranstalter: Alexander Reinefeld
- 10.11.2005** Workshop der Fachredaktion freie Ressourcen  
Veranstalter: Jörn Hasenclever, Andres Imhof
- 08.12.2005** C3-Grid-Treffen  
Veranstalter: Alexander Reinefeld, Florian Schintke

#### 8.4 Ausstellungen und Softwaredemonstrationen

- 24.–27.01.2005** Photonics West, San Jose, USA, Präsentation der Softwareprogramme JCMmode und JCMharmony  
Veranstalter: Sven Burger, Lin Zschiedrich
- 15.03.–18.03.2005** 94. Bibliothekartag Düsseldorf, Demonstration des KOBV-Portals  
Veranstalter: Hildegard Franck, Andres Imhof, Monika Kuberek, Stefan Lohrum, Beate Rusch
- 13.-16.06.2005** Conference on Lasers and Electrooptics & Laser2005, München, Präsentation der Softwareprogramme JCMmode und JCMharmony  
Veranstalter: Sven Burger
- 21.09.2005** 39. Sitzung des Friedrich-Althoff-Konsortiums, ZIB, Berlin, Präsentation des KOBV-Zeitschriftenartikelservers  
Veranstalter: Jörn Hasenclever
- 13.10.2005** Infineon Technologies AG, München, Präsentation des Softwareprogramms JCMharmony  
Veranstalter: Sven Burger, Lin Zschiedrich
- 28.10.2005** 3. SMUG-DACH-Anwendertreffen, München, KOBV-Portal – Entwicklungen in 2005: Highlights. Postersession, Vorstellung zweier Zusatzmodule und Vorstellung von Statistik-Ergebnissen  
Veranstalter: Andres Imhof
- 08.12.2005** Microsoft Research Day, Optimization in Public Transport  
Veranstalter: Ralf Borndörfer

#### 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.

- 18.01.2005** Mathematik in der Planung von Telekommunikationsnetzen, Vortrag in der Reihe „MathInside – überall ist Mathematik“ des DFG-Forschungszentrums MATHEON, Urania, Berlin  
Veranstalter: Roland Wessäly
- 18.01.2005** Mathematik in Hollywood, Vortrag in der Urania Berlin vor der Preisverleihung beim Digitalen Adventskalender des DFG-Forschungszentrums MATHEON  
Veranstalter: Peter Deuffhard
- 04.02.2005** Der Fußball und das Geld – Geometrie löst Probleme, Schülervortrag, Herder-Oberschule, Berlin  
Veranstalter: Marc Pfetsch
- 15.02.2005** Besuch von Studenten der TU Berlin, Vortrag zum High Performance Computing und Besichtigung der Hochleistungsrechner  
Veranstalter: Wolfgang Baumann
- 16.02.2005** Besuch der Arbeitsgruppe „Welt als Bild“ der Berlin-Brandenburgischen Akademie der Wissenschaften, 3D-Visualisierung  
Veranstalter: Daniel Baum, Peter Deuffhard, Stefan Zachow
- 16.02.2005** Der Fußball und das Geld – Geometrie löst Probleme, Schülervortrag, Kopernikus-Gymnasium, Blankenfelde  
Veranstalter: Marc Pfetsch
- 23.02.2005** Mathematik für die Müllabfuhr: das chinesische Postbotenproblem, Schülervortrag, Heinrich-Hertz-Gymnasium Berlin  
Veranstalter: Brigitte Lutz-Westphal
- 24.02.2005** Mathematik: Schlüsselwissenschaft für Schlüsseltechnologien, Vortrag im Rahmen der G.-Ch.-Lichtenberg-Festtage, Georg-Christoph-Lichtenberg-Oberschule, Berlin  
Veranstalter: Martin Grötschel
- 24.02.2005** Alles läuft mit Mathematik, Vortrag im Rahmen der G.-Ch.-Lichtenberg-Festtage, Georg-Christoph-Lichtenberg-Oberschule, Berlin  
Veranstalter: Marc Steinbach
- 15.03.2005** Morphing, Mathematik, Medizin, MathInside, Urania, Berlin  
Veranstalter: Hans Lamecker
- 15.03.2005** Mit angewandter diskreter Mathematik neue (Denk-)Wege gehen, Klett-Verlag, Berlin  
Veranstalter: Brigitte Lutz-Westphal
- 24.03.2005** Mathematik auf den Spuren verbesserter Medikamente. Aufwändige Berechnungen können die Interaktion von Wirkstoffen modellieren, 3sat: Nano – die Welt von morgen  
Veranstalter: Peter Deuffhard
- 22.04.2005** Graduate School „Mathematics as a Key Technology“, Universität Kaiserslautern (Fachrichtung Mathematik/Techno- und Wirtschaftsmathematik)

Veranstalter: Volker Kaibel, Bernd Kallies, Arie Koster, Olaf Paetsch, Johannes Schmidt-Ehrenberg, Stefan Zachow

**26.04.2005** Das Lächeln der Mathematiker, Informationsdienst Wissenschaft (idw)

Veranstalter: Peter Deuffhard

**30.04.2005** Moleküle, Motten und Mathematiker, Bild der Wissenschaft

Veranstalter: Peter Deuffhard

**10.05.2005** WeltRaumMathematik: Wie sieht das Universum aus?, Vortrag im Rahmen der Reihe „MathInside – alles ist Mathematik“, Urania, Berlin

Veranstalter: Frank Lutz

**10.05.2005** „Wer baut das schönste Auto – Geometrie für optimale Oberflächen“, Urania-Schüler-Vortragsreihe „MathInside – Überall ist Mathematik“, Berlin

Veranstalter: Konrad Polthier

**12.05.2005** Das Lächeln der Mathematiker. Mathematik im Dienst der Mund-Kiefer-Gesichts-Chirurgie, Akademievorlesungen Sommersemester 2005, Berlin-Brandenburgische Akademie der Wissenschaften (BBAW)

Veranstalter: Peter Deuffhard

**19.05.2005** Besuch der Arbeitsgruppe „Technisches Bild“ des Helmholtz-Zentrums, 3D-Visualisierung

Veranstalter: Daniel Baum, Peter Deuffhard, Stefan Zachow

**23.05.2005** The DFG Research Center MATHEON, Treffen der mathematischen Fachreferenten der Europäischen Forschungsförderungsorganisationen, Berlin

Veranstalter: Martin Grötschel

**23.05.2005** From the perspective of a working mathematician and mathematics manager: What is needed and what is still missing for the successful further promotion of mathematics on an international/European level, Treffen der mathematischen Fachreferenten der Europäischen Forschungsförderungsorganisationen, Berlin

Veranstalter: Martin Grötschel

**25.-28.05.2005** Die Arbeitsgruppen *Numerische Analysis und Modellierung* und *Visualisierung und Datenanalyse* des ZIB waren dieses Jahr beim 30. Evangelischen Kirchentag vertreten. Das Zelt „Der virtuelle Mensch“ zeigte den Einsatz moderner mathematischer Methoden in den Lebenswissenschaften (Medizin und Biologie) anhand dreier exemplarischer Bereiche (computerunterstützte Chirurgie, Krebstherapie und Medikamentenentwicklung). Dabei wurden nicht nur die Möglichkeiten und Erfolge der mathematischen Zugänge thematisiert, sondern auch die Herausforderungen, Grenzen und die nach wie vor offenen Fragen diskutiert, die aus der Individualität und der schiereren Komplexität der Schöpfung resultieren. Interaktive Exponate, wie z. B. eine Wärmekamera, luden die Besucher ein, einen Zugang zu komplexen Sachverhalten zu finden. Mit ca. 2.500 Besuchern war das Ausstellungszelt eines der meistbesuchtesten Zelte beim Kirchentag.

Veranstalter:

An der Durchführung waren vom ZIB beteiligt: Daniel Baum, Peter Deuffhard, Evelyn Dittmer, Susanne Gerber, Hans-Christian Hege, Wilhelm Huisinga, Hans-Eberhard Koralewski, Hans Lamecker, Andre Massing, Johannes Schmidt-Ehrenberg, Marcus Weber, Martin Weiser, Andrea Weisse, Stefan Zachow

**01.06.2005** „Surface optimization and feature extraction“, MATHEON workshop on optimization software, ZIB, Berlin  
Veranstalter: Konrad Polthier

**05.06.2005** Der schnellste Weg zum Ziel – Mathematik in Transport und Verkehr, 10. Tag der Mathematik, HU Berlin  
Veranstalter: Ralf Borndörfer

**11.06.2005** Herausragende, publikumswirksame Veranstaltung im Jahr 2005 war wieder die Beteiligung des ZIB mit acht 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 mit mehr als 1.600 Besuchern die gegenüber 2004 mehr als doppelte Anzahl von Besuchen im ZIB gezählt. Etwa 400 Personen nahmen an den Supercomputerführungen teil, obwohl wieder teilweise längere Wartezeiten in Kauf genommen werden mussten, da die Führungen aus Sicherheitsgründen nur in Kleingruppen stattfinden konnten.

Veranstalter:

Mit Vorträgen waren an der Langen Nacht der Wissenschaften beteiligt:

- Maro Bader: 3D-Wissenschaftskino
- Wolfgang Baumann: Besichtigung von Supercomputer und Datenroboter
- Hubert Busch: Besichtigung von Supercomputer und Datenroboter
- Malte Clasen: Wiedergeburt eines Gartens
- Hans-Hermann Frese: Besichtigung von Supercomputer und Datenroboter
- Hans-Florian Geerdes: UMTS verstehen
- Hans-Christian Hege: 3D-Wissenschaftskino
- Ralf Kähler: 3D-Wissenschaftskino
- Bernd Kallies Besichtigung von Supercomputer und Datenroboter
- Gordon Minor: StorageBox – Persönliche Informationsverwaltung der nächsten Generation
- Philip Paar: Wiedergeburt eines Gartens
- Konrad Polthier: Schöne Formen – Schöne Autos
- Eike Preuß: Schöne Formen – Schöne Autos
- Frank Schmidt: Vom Regenbogen zur Nanotechnologie
- Detlev Stalling: 3D-Wissenschaftskino
- Marcus Weber: 3D-Wissenschaftskino
- Stefan Zachow: 3D-Wissenschaftskino

**11.06.2005** Feierliche Enthüllung des MATHEON-Buddy-Bären zur Eröffnung der „Langen Nacht der Wissenschaften“ an der TU Berlin  
Veranstalter: Martin Grötschel

**17.06.2005** Das Lächeln der Mathematiker, Festveranstaltung „10 Jahre Studiengang Informatik“, Universität Lübeck  
Veranstalter: Peter Deuffhard

- 21.06.2005** Die Geometrie des Universums, Seminar zur Didaktik der Geometrie, PH Freiburg  
Veranstalter: Frank Lutz
- 28.06.2005** Kollidierende Schwarze Löcher, SommerUni am Max-Planck-Institut für Gravitationsphysik  
Veranstalter: Ralf Kähler
- 26.08.2005** Mathematik ist überall drin, 4. Kongress des Berliner Vereins zur Förderung des mathematischen und naturwissenschaftlichen Unterrichts (MNU-Berlin), FU Berlin  
Veranstalter: Peter Deuffhard
- 27.08.2005** Kollidierende Schwarze Löcher, Präsentation im Rahmen des *Tag der offenen Tür* am MPI für Gravitationsphysik, Potsdam  
Veranstalter: Ralf Kähler
- 08.09.2005** BBAW, MATHEON & Combinatorics in Berlin, Eurocomb 2005 Award Ceremony, BBAW Berlin  
Veranstalter: Martin Grötschel
- 10.09.2005** Schülerseminar  
Veranstalter: Daniel Baum, Frank Cordes, Peter Deuffhard, Bernd Kallies, Olaf Paetsch, Thomas Steinke
- 13.09.2005** Mathematik: Schlüsselwissenschaft für Schlüsseltechnologien, Vortrag vor Schülern des Albert-Schweitzer-Gymnasiums Gera, TU Berlin  
Veranstalter: Volker Kaibel
- 21.10.2005** Visualisierung in den Naturwissenschaften  
Veranstalter: MATHEON-Präsentation für Referendare, ZIB, Berlin Hans-Christian Hege
- 22.10.2005** TSPism, Conference on the occasion of Rolf Jeltsch's 60th birthday: „Differential Equations: From Theory to Computational Science and Engineering“, Zürich, Schweiz  
Veranstalter: Martin Grötschel
- 26.10.2005** Computergestützte Planung in der Gesichtschirurgie, Vortrag vor Schülern des Albert-Schweitzer-Gymnasiums Eisenhüttenstadt  
Veranstalter: Peter Deuffhard, Bernd Kallies, Marc Pfetsch, Olaf Paetsch, Stefan Zachow
- 27.10.2005** Vortrag „Was macht die Mathematik im Telefon?“ beim Tag der Akademievorträge, Emil-Fischer-Gymnasium, Schwarzheide  
Veranstalter: Hans-Florian Geerdes
- 27.10.2005** Vortrag „Was macht die Mathematik im Telefon?“ am Carl-Anwandter-Gymnasium, Calau  
Veranstalter: Hans-Florian Geerdes
- 27.10.2005** Wo steckt die Mathematik im Telefon?, Brandenburgische Schule für Blinde und Sehbehinderte, Königs Wusterhausen  
Veranstalter: Martin Grötschel
- 27.10.2005** Wo steckt die Mathematik im Telefon?, Katholische Schule Bernhardinum, Fürstenwalde  
Veranstalter: Martin Grötschel



- 
- 28.10.2005** Mathematik: Schunck-Konstellationen, Festkolloquium zur Verabschiedung von Hermann Schunck, DESY, Hamburg  
Veranstalter: Martin Grötschel
- 08.11.2005** Verborgenes sichtbar machen: 3D-Blicke in den menschlichen Körper, MATHEON-Vortragsreihe „MathInside – Mathematik ist überall“, Urania, Berlin  
Veranstalter: Hans-Christian Hege
- 22.11.2005** Optimierung im ZIB und am MATHEON, Besuch einer Gruppe von Studierenden der FH Zittau am ZIB Berlin  
Veranstalter: Volker Kaibel
- 23.11.2005** Mathematik: Schlüsselwissenschaft für Schlüsseltechnologien, Besuch von Schülern des Droste-Hülshoff-Gymnasiums, Berlin  
Veranstalter: Daniel Baum, Peter Deuffhard, Martin Grötschel, Bernd Kallies, Olaf Paetsch
- 06.12.2005** Besuch von Schülern der Herder-Oberschule Berlin  
Veranstalter: Peter Deuffhard, Bernd Kallies, Olaf Paetsch, Marcus Weber



## ORGANISATORISCHES

Das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) wurde durch Gesetz über das Zentrum für Informationstechnik (ZInfG) vom 17. Juli 1984<sup>1</sup> gegründet. Das ZIB ist eine rechtsfähige Anstalt des öffentlichen Rechts mit kaufmännischer Buchführung. Zur Erfüllung seiner Aufgaben erhält das ZIB einen Zuschuss des Landes Berlin, das auch Dienstherr und Arbeitgeber für die Beschäftigten des ZIB ist.

### 9.1 Organe

Organe des ZIB sind der Verwaltungsrat und der Präsident.

Der Verwaltungsrat setzte sich im Jahre 2005 wie folgt zusammen:

- Prof. Dr. Hans Jürgen Prömel, HUB, Vorsitzender
- Prof. Dr.-Ing. Klaus Petermann, TUB, stellvertretender Vorsitzender
- 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 02. Februar und 30. Juni 2005.

Präsident des ZIB ist Prof. Dr. Dr. h.c. Peter Deuffhard.

Als Vizepräsident amtiert Prof. Dr. Martin Grötschel.

### 9.2 Satzung

Die vom Verwaltungsrat in seiner Sitzung am 30.06.2005 beschlossene Satzung legt Funktionen und Verfahrensweisen der einzelnen Organe des ZIB fest, definiert die Aufgaben in Forschung und Entwicklung, beschreibt die Dienstleistungsfunktion des Rechenzentrums und regelt die Zusammensetzung und die Aufgabenstellung des Wissenschaftlichen Beirates<sup>2</sup>.

---

<sup>1</sup><http://www.zib.de/General/Organization/gesetz/index.de.html>

<sup>2</sup><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 – OneSpin Solutions GmbH, 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 Schöning – (ehem.) 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 07. und 08. Juni 2005 im ZIB.

### 9.4 Mitgliedschaften

Das ZIB ist Mitglied folgender Organisationen:

- DFN – Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes e. V.
- DMV – Deutsche Mathematiker-Vereinigung e. V.
- ECMI – European Consortium for Mathematics in Industry
- FAV – Forschungs- und Anwendungsverbund Verkehrssystemtechnik Berlin
- Forum für Zukunftsenergien e. V.
- IDW – Informationsdienst Wissenschaft e. V.
- IWI – Institut für wissenschaftliche Information e. V.
- Konrad-Zuse-Gesellschaft e. V.
- NAG Users Association
- OpTecBB – Optische Technologien aus Berlin und Brandenburg
- SIAM – Society for Industrial and Applied Mathematics
- UNICORE Forum e. V.
- ZKI – Zentren für Kommunikation und Informationsverarbeitung in Lehre und Forschung e. V.
- 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 2005 die folgenden Projekte bearbeitet wurden:

### Senior Fellowship:

- Prof. Dr. Dietrich Braess (Ruhr-Universität Bochum)  
*Nichtlineare Mechanik und Locking-Phänomene*

### Junior Fellowship:

- Prof. Dr. Reinhard Hochmuth (Universität Kassel)  
*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*
- Dr. Markus Wacker (Universität Tübingen)  
*Numerische Textilmodellierung*
- Prof. Dr. Thomas Wolf (Brock University, St. Catharines, 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)  
Marlies Engelke  
Bodo Erdmann  
Hans-Florian Geerdes  
Gabriele Kempf  
Thorsten Koch  
Dirk Krickel

## 9.7 Wirtschaftliche Situation

Die wirtschaftliche Situation des ZIB ist nach wie vor durch die finanziellen Schwierigkeiten des Landes Berlin geprägt – eine Situation, die immer wieder die Substanz des ZIB als einer in der Grundausrüstung 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 unverändert 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; hier sind Misserfolge zu verzeichnen, die unmittelbar mit den verschlechterten Einkommensbedingungen zusammenhängen. Da zudem die Drittmitteleinnahmen aus Industrie 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 Bundesländer-Finanzierung zu überführen. Dadurch wird vom Land Berlin eine Entlastung des Wissenschaftshaushaltes angestrebt. Die erforderliche Anmeldung zur „Blauen Liste“ ist erfolgt, gilt aber aufgrund des Umfangs der bereits bestehenden Warteliste als wenig aussichtsreich.

Der Zuschuss des Landes Berlin im *konsumtiven* Bereich ist für das Jahr 2005 „überrollt“ und in gleicher Höhe wie für 2004 eingestellt worden. Für die entscheidungsreifen *investiven* Vorhaben standen die erforderlichen Gelder weitgehend zur Verfügung. Erfreulicherweise konnten für die Beschaffung des HLRN-II-Rechners als verteiltes Gesamtsystem an den Standorten Berlin und Hannover mit einem geplanten Gesamtinvestitionsvolumen von ca. 30 Millionen Euro die Befürwortungen von Wissenschaftsrat und DFG erreicht werden. Da die finanziellen Mittel durch die haushaltsmäßige Veranschlagung in den einzelnen Ländern einschließlich der Bundesbeteiligung inzwischen gesichert sind, kann mit einer Inbetriebnahme des Rechnersystems im 1. Halbjahr 2007 gerechnet werden.

Die Wirtschaftsplanansätze im Jahre 2005 beliefen sich im Aufwand auf insgesamt 12.683 T €; davon entfallen auf den konsumtiven Bereich 10.181 T € und auf Investitionen 2.502 T €.

Das Land Berlin leistete einen ausgabewirksamen, konsumtiven Zuschuss von 6.881 T € (ohne BRAIN- und KOBV-Anteile). Die Höhe der Drittmitteleinnahmen ist – vor Aufstellung des Jahresabschlusses – mit 3.680 T € anzusetzen. Damit werden die Drittmitteleinnahmen zwar geringer sein als in der Ausnahmesituation der Jahre 2002/2003 (4.283 T € bzw. 4.181 T €), erneut aber einen sehr guten Wert erreichen. Bezogen auf den Wirtschaftsplan 2005 ist ein ausgeglichener Jahresabschluss 2005 zu erwarten.

Die in den letzten Jahren sehr positive Entwicklung der Einnahmen aus Drittmitteln, einem wesentlichen, wenn auch nicht dem einzigen Indikator für die Forschungseffizienz einer wissenschaftlichen Institution, lässt sich anhand der nachstehenden Tabelle (Jahresabschlussrelevante Angaben) ablesen.

	Drittmiteleinahmen			Zuwendungen des Landes Berlin		Zuwendungen Bund/Dritte T€	Sonstige Einnahmen T€	Einnahmen insgesamt T€
	Wirtschaft/ Industrie T€	öffentliche Mittel T€	insgesamt T€	konsumentiv T€	investiv T€			
1996	1.253	755	2.008	4.863	511	0	48	7.430
1997	1.295	1.330	2.625	7.330 <sup>1</sup>	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 <sup>2</sup>	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	777	2.968	3.745	6.932	441	1.227	245	12.590
2005 <sup>3</sup>	866	2.814	3.680	6.881	584	1.434	751	13.330

Tabelle 9.1: Einnahmen-Entwicklung  
– ohne BRAIN-Serviceanteil –

<sup>1</sup>Erhöhung der Zuwendung durch Übernahme der Personalkosten für die planmäßig Beschäftigten

<sup>2</sup>Erhöhung des Zuschusses durch bilanztechnische Auswirkungen

<sup>3</sup>voraussichtliches Ist 2005 – vor Prüfung des Jahresabschlusses

Die Entwicklung der Drittmittel-einnahmen – für 2005 voraussichtliche Ist-Zahlen – lässt sich anhand der nachstehenden Grafik darstellen.

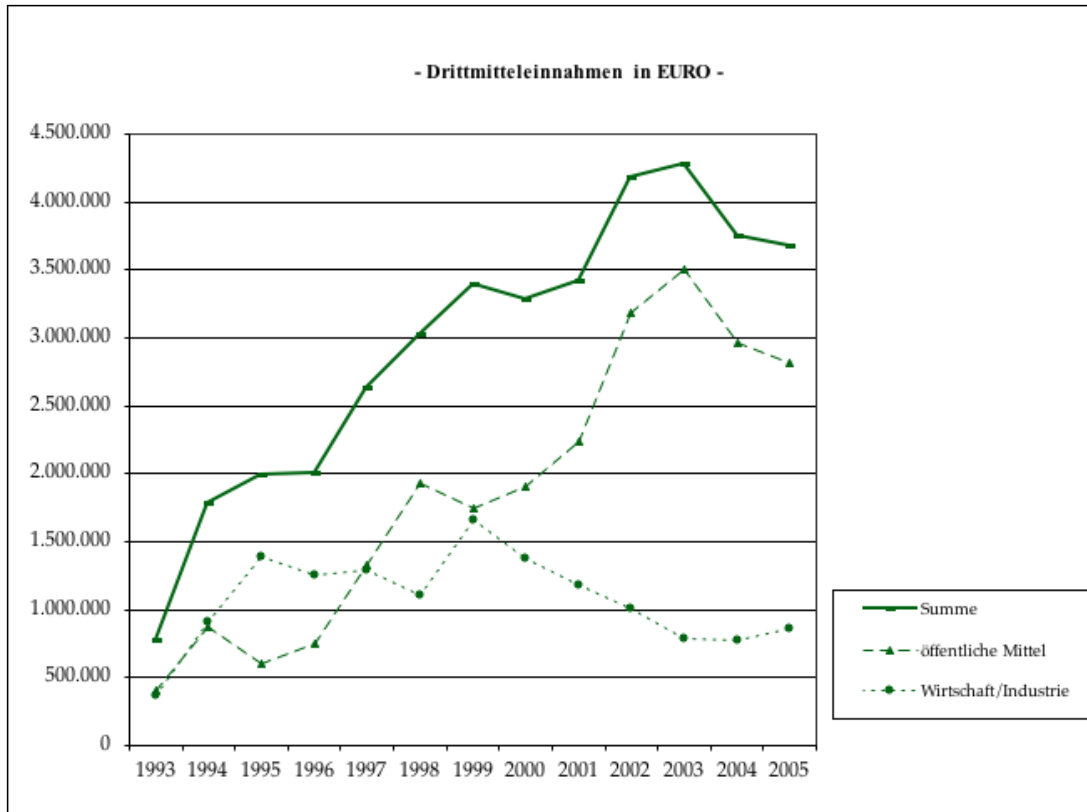


ABBILDUNG 9.1: Drittmittel-Entwicklung

## 9.8 Spin-off-Firmen

Mitarbeiter des ZIB haben in den letzten Jahren die folgenden Firmen gegründet:

- CiT Computing in Technology – 1992  
Modellierung und Entwicklung von numerischer Software für die technische Chemie  
<http://www.cit-wulkow.de>
- RISK-CONSULTING Prof. Dr. Weyer GmbH – 1994  
Database Marketing für Versicherungen  
<http://www.risk-consulting.de>
- Intranetz – 1996  
Softwareentwicklung für Logistik, DatabasePublishing, eGovernment  
<http://www.intranetz.de>
- AktuarData GmbH – 1998  
Entwicklung und Vertrieb von Risikobewertungssystemen zur Krankenversicherung  
<http://www.aktuardata.de>



- Indeed-Visual Concepts GmbH/Mercury Computer Systems GmbH – 1999  
Visualisierungslösungen (Amira etc.), Medical Workstations <http://www.amiravis.com>
- Atesio GmbH – 2000  
Entwicklung von Software und Dienstleistung für die Planung, Konfiguration und Optimierung von Telekommunikationsnetzen  
<http://www.atesio.de>
- Dr. Löbel, Dr. Borndörfer & Weider GbR – 2001  
Optimierung und Unternehmensberatung im ÖPNV
- JCMwave GmbH – 2002  
Simulationssoftware für optische Komponenten  
<http://www.jcmwave.com>
- Lenné3D GmbH – 2005  
3D-Landschaftsvisualisierung, Softwareentwicklung und Dienstleistungen  
<http://www.lenne3d.com>

## 9.9 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:

	01.01.2005	01.01.2006
Leitung	4	4
Wissenschaftliches Personal	88	84
Servicepersonal	50	47
KOBV-Zentrale	14	15
Studentische Hilfskräfte	63	59
<b>Insgesamt</b>	<b>219</b>	<b>209</b>

ABBILDUNG 9.2: Personal-Entwicklung

Aus Mitteln des Landes Berlin waren am 01.01.2006 insgesamt 135 Personen am ZIB beschäftigt. Aus Drittmittelprojekten wurden 74 Beschäftigte finanziert.



## KAPITEL 10

### ANSPRECHPARTNER

Präsident:	Prof. Dr. Dr. h.c. Peter Deuffhard Inhaber des Lehrstuhls <i>Scientific Computing</i> am Fachbereich Mathematik und Informatik der Freien Universität Berlin Tel. (030) 841 85-101
Vizepräsident:	Prof. Dr. Martin Grötschel Inhaber des Lehrstuhls <i>Diskrete Mathematik</i> am Institut für Mathematik der Technischen Universität Berlin Tel. (030) 841 85-210
Bereichsleiter Computer Science:	Prof. Dr. Alexander Reinefeld Inhaber des Lehrstuhls <i>Praktische Informatik</i> am Institut für 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/ Prof. 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

14195 Berlin-Dahlem

Telefon: (030) 841 85-0

Telefax: (030) 841 85-125

Internet: <http://www.zib.de>

E-Mail: [nachname@zib.de](mailto:nachname@zib.de)

## ANHANG: ÜBERSICHT PREPRINTS

**ZIB-Report 05-01.** Alexander Steidinger. *Data Management for Processing Molecules.*

**Abstract:** Molecular dynamics simulations of possible ligands for proteins yield large amounts of data in the form of trajectories which are further processed in order to find metastable conformations. These conformations can then be used for docking between ligand and protein.

Around this core computation procedure lots of other data have to be managed. It should also be possible for external users not involved in program development to perform computations.

As a paradigm for other fields where a similar constitution of program usage and data processing is found we present a software architecture for data generation, access and management.

Requirements for this system include: Ease of use, graphical user interface, persistent storage of data concerning molecules, users, programs, program parameters, metadata, and results. A mere storage in the file system would render a quick overview of data more or less impossible. On the other hand, storing large amounts of binary data in a database doesn't yield any advantage concerning speed of access. Therefore, a hybrid approach combining file system and database is appropriate.

The system should be easily extensible by inserting new applications which can be controlled and whose results can be collected and stored.

The software system described here consists of different components, the presentation layer (graphical user interface), the business logic, the persistence layer (relational database plus file system), and an interface to the compute cluster (batch system for parallel processing).

We will discuss the alternatives and take a closer look at the components.

**ZIB-Report 05-02.** Johannes Schmidt-Ehrenberg. *A density mixture model for molecular conformation distributions.*

Appeared as: Computational Life Sciences: First International Symposium, CompLife 2005", Lecture Notes on Computer Science, Vol. 3695, (2005) 229-240

**Abstract:** We propose an approach for transforming the sampling of a molecular conformation distribution into an analytical model based on Hidden Markov Models. The model describes the sampled shape density as a mixture of multivariate unimodal densities. Thus, it delivers an interpretation of the sampled density as a set of typical shapes that appear with different probabilities and are characterized by their geometry, their variability and transition probabilities between the shapes. The gained model is used to identify atom groups of constant shape that are connected by metastable torsion angles. Based on this description an alignment for the original sampling is computed. As it takes into account the different shapes contained in the sampled set, this alignment allows to compute reasonable average shapes and meaningful shape density plots. Furthermore, it enables us to visualize typical conformations.

**ZIB-Report 05-03.** Philipp Friese; Jörg Rambau. *Online-Optimization of Multi-Elevator Transport Systems with Reoptimization Algorithms based on Set-Partitioning Models.*

**Abstract:** We develop and experimentally compare policies for the control of a system of  $k$  elevators with capacity one in a transport environment with  $\ell$  floors, an idealized version of a pallet elevator system in a large distribution center of the Herlitz PBS AG in Falkensee. Each elevator in the idealized system has an individual waiting queue of infinite capacity. On each floor, requests arrive over time in global waiting queues of infinite capacity. The goal is to find a policy that, without any knowledge about future requests, assigns an elevator to each request and a schedule to each elevator so that certain expected cost functions (e.g., the average or the maximal flow times) are minimized. We show that a reoptimization policy for minimizing average squared waiting times can be implemented to run in real-time (1 s) using dynamic column generation. Moreover, in discrete event simulations with Poisson input it outperforms other commonly used policies like multi-server variants of greedy and nearest neighbor.

**ZIB-Report 05-04.** Andreas Bley. *Inapproximability Results for the Inverse Shortest Paths Lengths and Unique Shortest Paths.*

Appeared as : Finding Small Administrative Lengths for Shortest Path Routing in Proceedings of the Second International Network Optimization Conference vol(1) (INOC 2005) 121-128, Lisboa

**Abstract:** We study the complexity of two Inverse Shortest Paths (ISP) problems with integer arc

lengths and the requirement for uniquely determined shortest paths. Given a collection of paths in a directed graph, the task is to find positive integer arc lengths such that the given paths are uniquely determined shortest paths between their respective terminals. The first problem seeks for arc lengths that minimize the length of the longest of the prescribed paths. In the second problem, the length of the longest arc is to be minimized.

We show that it is  $np$ -hard to approximate the minimal longest path length within a factor less than  $8/7$  or the minimal longest arc length within a factor less than  $9/8$ . This answers the (previously) open question whether these problems are  $np$ -hard or not. We also present a simple algorithm that achieves an  $\mathcal{O}(|V|)$ -approximation guarantee for both variants.

Both ISP problems arise in the planning of telecommunication networks with shortest path routing protocols. Our results imply that it is  $\mathcal{NP}$ -hard to decide whether a given path set can be realized with a real shortest path routing protocol such as OSPF, IS-IS, or RIP.

**ZIB-Report 05-05.** Takayuki Tsuchida; Thomas Wolf. *Classification of polynomial integrable systems of mixed scalar and vector evolution equations. I.*

**Abstract:** We perform a classification of integrable systems of mixed scalar and vector evolution equations with respect to higher symmetries. We consider polynomial systems that are homogeneous under a suitable weighting of variables. This paper deals with the KdV weighting, the Burgers (or potential KdV or modified KdV) weighting, the Ibragimov–Shabat weighting and two unfamiliar weightings. The case of other weightings will be studied in a subsequent paper.

Making an ansatz for undetermined coefficients and using a computer package for solving bilinear algebraic systems, we give the complete lists of 2<sup>nd</sup> order systems with a 3<sup>rd</sup> order or a 4<sup>th</sup> order symmetry and 3<sup>rd</sup> order systems with a 5<sup>th</sup> order symmetry.

For all but a few systems in the lists, we show that the system (or, at least a subsystem of it) admits either a Lax representation or a linearizing transformation. A thorough comparison with recent work of Foursov and Olver is made.

**ZIB-Report 05-06.** Thomas Wolf. *Partial and complete linearization of PDEs based on conservation laws.*

**Abstract:** A method based on infinite parameter conservation laws is described to factor linear differential operators out of nonlinear partial differential equations (PDEs) or out of differential consequences of nonlinear PDEs. This includes a complete linearization to an equivalent linear PDE (-system) if that is possible. Infinite parameter conservation laws can be computed, for example, with the computer algebra package CONLAW.

**ZIB-Report 05-07.** Thomas Wolf. *Integrable quadratic Hamiltonians with a linear Lie-Poisson bracket.*

**Abstract:** Quadratic Hamiltonians with a linear Lie-Poisson bracket have a number of applications in mechanics. For example, the Lie-Poisson bracket  $e(3)$  includes the Euler-Poinsot model describing motion of a rigid body around a fixed point under gravity and the Kirchhoff model describes the motion of a rigid body in ideal fluid. Advances in computer algebra algorithms, in implementations and hardware, together allow the computation of Hamiltonians with higher degree first integrals providing new results in the search for integrable models. A computer algebra module enabling related computations in a 3-dimensional vector formalism is described.

**ZIB-Report 05-08.** Stephen C. Anco; Thomas Wolf. *Some classifications of hyperbolic vector evolution equations.*

**Abstract:** Motivated by recent work on integrable flows of curves and 1+1 dimensional sigma models, several  $\mathcal{O}(N)$ -invariant classes of hyperbolic equations  $U_t x = f(U, U_t, U_x)$  for an  $N$ -component vector  $U(t, x)$  are considered. In each class we find all scaling-homogeneous equations admitting a higher symmetry of least possible scaling weight. Sigma model interpretations of these equations are presented.

**ZIB-Report 05-09.** Mariía Lopez-Fernandez; Christian Lubich; Achim Schädle. *Fast and oblivious convolution quadrature.*

**Abstract:** We give an algorithm to compute  $N$  steps of a convolution quadrature approximation to a continuous temporal convolution using only  $\mathcal{O}(N \log N)$  multiplications and  $\mathcal{O}(\log N)$  active memory. The method does not require evaluations of the convolution kernel, but instead  $\mathcal{O}(\log N)$  evaluations of its Laplace transform, which is assumed sectorial.

The algorithm can be used for the stable numerical solution with quasi-optimal complexity of linear and nonlinear integral and integro-differential equations of convolution type. In a numerical example we apply it to solve a subdiffusion equation with transparent boundary conditions.

**ZIB-Report 05-10.** María López-Fernández; Christian Lubich; Cesar Palencia; Achim Schädle. *Fast Runge-Kutta approximation of inhomogeneous parabolic equations.*

Appeared in: Numer. Math. 102 (2005) 277-291

**Abstract:** The result after  $N$  steps of an implicit Runge-Kutta time discretization of an inhomogeneous linear parabolic differential equation is computed, up to accuracy  $\varepsilon$ , by solving only

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

linear systems of equations. We derive, analyse, and numerically illustrate this fast algorithm.

**ZIB-Report 05-11.** Christoph Helmberg; Stefan Röhl. *A Case Study of Joint Online Truck Scheduling and Inventory Management for Multiple Warehouses.*

**Abstract:** For a real world problem – transporting pallets between warehouses in order to guarantee sufficient supply for known and additional stochastic demand – we propose a solution approach via convex relaxation of an integer programming formulation, suitable for online optimization. The essential new element linking routing and inventory management is a convex piecewise linear cost function that is based on minimizing the expected number of pallets that still need transportation. For speed, the convex relaxation is solved approximately by a bundle approach yielding an online schedule in 5 to 12 minutes for up to 3 warehouses and 40000 articles; in contrast, computation times of state of the art LP-solvers are prohibitive for online application. In extensive numerical experiments on a real world data stream, the approximate solutions exhibit negligible loss in quality; in long term simulations the proposed method reduces the average number of pallets needing transportation due to short term demand to less than half the number observed in the data stream.

**ZIB-Report 05-12.** Artur Andrzejak; Ulf Hermann; Akhil Sahai. *FeedbackFlow – An Adaptive Workflow Generator for System Management.*

**Abstract:** We describe a prototypical framework that further automates system management by composing complex management tasks from elementary actions, and executing composite tasks with feedback-awareness. *FEEDBACKFLOW* implements a general closed control loop of *planning – execution – result validation – replanning*, and generates workflows of system management actions in an adaptive manner. System-dependent behaviour of the loop is specified by declarative description of the domain (essentially descriptions of available actions), and statement of the goal. We evaluate the design of this framework on examples taken from resource construction in Utility Computing environments, and discuss the challenges we have encountered. Our implementation utilizes external components such as *MBP*, a *PDDL*-conform planner, and *Triana*, a workflow specification and execution framework. An alternative approach involving *BPEL4WS* is discussed.

**ZIB-Report 05-13.** Arie Koster. *Wavelength Assignment in Multi-Fiber WDM Networks by Generalized Edge Coloring.*

**Abstract:** In this paper, we study wavelength assignment problems in multi-fiber WDM networks. We focus on the special case that all lightpaths have at most two links. This in particular holds in case the network topology is a star. As the links incident to a specific node in a meshed topology form a star subnetwork, results for stars are also of interest for general meshed topologies.

We show that wavelength assignment with at most two links per lightpath can be modeled as a generalized edge coloring problem. By this relation, we show that for a network with an even number of fibers at all links and at most two links per lightpath, all lightpaths can be assigned a wavelength without conversion. Moreover, we derive a lower bound on the number of lightpaths to be converted for networks with arbitrary numbers of fibers at the links.

A comparison with linear programming lower bounds reveals that the bounds coincide for problems with at most two links per lightpath. For meshed topologies, the cumulative lower bound over all star subnetworks equals the best known solution value for all realistic wavelength assignment instances available, by this proving optimality.

**ZIB-Report 05-14.** Bernd Gärtner; Volker Kaibel. *Two New Bounds for the Random-Edge Simplex Algorithm.*

**Abstract:** We prove that the Random-Edge simplex algorithm requires an expected number of at most  $13n/\sqrt{d}$  pivot steps on any simple  $d$ -polytope with  $n$  vertices. This is the first nontrivial upper bound for general polytopes. We also describe a refined analysis that potentially yields much better bounds for specific classes of polytopes. As one application, we show that for combinatorial  $d$ -cubes, the trivial upper bound of  $2^d$  on the performance of Random-Edge can asymptotically be improved by any desired polynomial factor in  $d$ .

**ZIB-Report 05-15.** Anton Schiela; Martin Weiser. *Superlinear Convergence of the Control Reduced Interior Point Method for PDE Constrained Optimization.*

**Abstract:** A thorough convergence analysis of the Control Reduced Interior Point Method in function

space is performed. This recently proposed method is a primal interior point pathfollowing scheme with the special feature, that the control variable is eliminated from the optimality system. Apart from global linear convergence we show, that this method converges locally almost quadratically, if the optimal solution satisfies a function space analogue to a non-degeneracy condition. In numerical experiments we observe, that a prototype implementation of our method behaves in compliance with our theoretical results.

**ZIB-Report 05-16.** Carsten Lange; Konrad Polthier. *Anisotropic Smoothing of Point Sets.*

**Abstract:** The use of point sets instead of meshes became more popular during the last years. We present a new method for anisotropic fairing of a point sampled surface using an anisotropic geometric mean curvature flow. The main advantage of our approach is that the evolution removes noise from a point set while it detects and enhances geometric features of the surface such as edges and corners. We derive a shape operator, principal curvature properties of a point set, and an anisotropic Laplacian of the surface. This anisotropic Laplacian reflects curvature properties which can be understood as the point set analogue of Taubin's curvature-tensor for polyhedral surfaces. We combine these discrete tools with techniques from geometric diffusion and image processing. Several applications demonstrate the efficiency and accuracy of our method.

**ZIB-Report 05-17.** Holger Meyer; Marcus Weber. ZIBgridfree – Adaptive Conformation Analysis with qualified Support of Transition States and Thermodynamic Weights.

**Abstract:** This paper introduces a new algorithm of conformational analysis based on mesh-free methods as described in [M. Weber. *Mehless Methods in Conformations Dynamics.*(2005)]. The adaptive decomposition of the conformational space by softly limiting functions avoids trapping effects and allows adaptive refinement strategies. These properties of the algorithm makes ZIBgridfree particularly suitable for the complete exploration of high-dimensional conformational space. The adaptive control of the algorithm benefits from the tight integration of molecular simulation and conformational analysis. An emphasized part of the analysis is the Robust Perron Cluster Analysis (PCCA+) based on the work of Peter Deuffhard and Marcus Weber. PCCA+ supports an almost-characteristic cluster definition with an outstanding mapping of transition states. The outcome is expressed by the metastable sets of conformations, their thermodynamic weights and flexibility.

**ZIB-Report 05-18.** Ralf Borndörfer; Martin Grötschel; Marc E. Pfetsch. *A Path-Based Model 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 in finding lines and corresponding frequencies in a transport network such that a given travel demand can be satisfied. There are (at least) two objectives. The transport company wishes to minimize operating costs, the passengers want to minimize travel times. We propose a new multi-commodity flow model for line planning. Its main features, in comparison to existing models, are that the passenger paths can be freely routed and that the lines are generated dynamically. We discuss properties of this model and investigate its complexity. Results with data for the city of Potsdam, Germany, are reported.

**ZIB-Report 05-19.** Tobias Achterberg. *Conflict Analysis in Mixed Integer Programming.*

**Abstract:** Conflict analysis for infeasible subproblems is one of the key ingredients in modern SAT solvers to cope with large real-world instances. In contrast, it is common practice for today's mixed integer programming solvers to just discard infeasible subproblems and the information they reveal. In this paper we try to remedy this situation by generalizing the SAT infeasibility analysis to mixed integer programming.

We present heuristics for branch-and-cut solvers to generate valid inequalities from the current infeasible subproblem and the associated branching information. SAT techniques can then be used to strengthen the resulting cuts. We performed computational experiments which show the potential of our method: On feasible MIP instances, the number of required branching nodes was reduced by 50% in the geometric mean. However, the total solving time increased by 15%. On infeasible MIPs arising in the context of chip verification, the number of nodes was reduced by 90%, thereby reducing the solving time by 60%.

**ZIB-Report 05-20.** Ralf Borndörfer; Marika Neumann; Marc E. Pfetsch. *Fare Planning for Public Transport.*

**Abstract:** In this paper we introduce the fare planning problem for public transport which consists in designing a system of fares maximizing revenue. We propose a new simple general model for this problem. It is based on a demand function and constraints for the different fares. The constraints define the structure of the fare system, e.g., distance dependent fares or zone fares. We discuss a simple example with a quadratic demand function and distance dependent fares. Then we introduce a more



realistic discrete choice model in which passengers choose between different alternatives depending on the number of trips per month. We demonstrate the examples by computational experiments.

**ZIB-Report 05-21.** Andreas Bley; Marcus Pattloch. *Modellierung und Optimierung der X-WiN Plattform*. Erschienen in: DFN-Mitteilungen 67 (2005) 4–7

**Abstract:** In diesem Artikel werden die Optimierungsmodelle und -verfahren beschrieben, die bei der Planung des Kernnetzes und der Zugangsinfrastruktur des X-WiN verwendet wurden.

**ZIB-Report 05-22.** Ralf Borndörfer; Martin Grötschel; Marc E. Pfetsch. *Public Transport to the fORe!* Appeared in: OR/MS Today, Apr 2006, Vol 33(2) 30–40

**Abstract:** Can OR methods help the public transport industry to break even? The article gives evidence that there exist significant potentials in this direction, which can be harnessed by a combination of modern mathematical methods and local planning knowledge. Many of the planning steps in public transport are classical combinatorial problems, which can be solved in unprecedented size and quality due the rapid progress in large-scale optimization. Three examples on vehicle scheduling, duty scheduling, and integrated vehicle and duty scheduling illustrate the level that has been reached and the improvements that can be achieved today. Extensions of such methods to further questions of strategic, online, and market-oriented planning are currently investigated. In this way, OR can make a significant contribution to answer the basic but extremely difficult question “What is a good public transport network?” ««.

**ZIB-Report 05-23.** Martin Grötschel; Robert Roggenbuck; Wolfram Sperber. *Entwicklung und Aufbau des Internet-Dienstes „Math&Industry“*.

**Abstract:** Die Anwendung mathematischer Methoden und Verfahren wird immer mehr zur Voraussetzung innovativer Produkte und Dienstleistungen. Um neue Produkte und Dienstleistungen zu entwickeln, müssen die Produktions- und technologischen Prozesse mathematisch modelliert, beschrieben und optimiert werden. Diesem Umstand Rechnung tragend, hat das Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) 1993 begonnen, den Einsatz mathematischer Verfahren und Methoden in der Mathematik über ein spezielles Mathematikprogramm zu fördern. Inzwischen hat die vierte Förderperiode des Mathematikprogramms begonnen.

Das Medium Internet, insbesondere das WWW, ist für die Sichtbarkeit und Transparenz wissenschaftlicher Resultate in den letzten zehn Jahren immer wichtiger geworden. Wer nicht im Web „sichtbar“ ist, läuft Gefahr, nicht wahrgenommen zu werden. Intention und Ziel des durchgeführten Projekts war es, ein Konzept für eine qualitativ hochwertige und umfassende Darstellung des BMBF-Mathematikprogramms, insbesondere der in den Projekten erzielten Ergebnisse, zu entwickeln und zu realisieren und damit den Stellenwert und die Akzeptanz mathematischer Forschung in der Gesellschaft zu festigen und den Wissenstransfer zwischen mathematischer Forschung sowie Forschung und Entwicklung in der Wirtschaft und dem Dienstleistungsbereich zu fördern.

**ZIB-Report 05-24.** Klaus Hildebrandt; Konrad Polthier; Max Wardetzky. *On the Convergence of Metric and Geometric Properties of Polyhedral Surfaces*.

**Abstract:** We provide conditions for convergence of polyhedral surfaces and their discrete geometric properties to smooth surfaces embedded in Euclidian 3-space. The notion of *totally normal convergence* is shown to be equivalent to the convergence of either one of the following: surface area, intrinsic metric, and Laplace-Beltrami operators. We further show that totally normal convergence implies convergence results for shortest geodesics, mean curvature, and solutions to the Dirichlet problem. This work provides the justification for a discrete theory of differential geometric operators defined on polyhedral surfaces based on a variational formulation.

**ZIB-Report 05-25.** Andres Imhof; Markus Malo. *Aufbau einer verteilten Fachredaktion für freie Internet-Ressourcen im KOBV-Portal*.

Ersch. in: Bibliotheksdienst 39 (2005) H. 5, S. 615-625

**Zusammenfassung:** Die KOBV-Zentrale betreibt mit dem KOBV-Portal neben der Metasuche in freien Online-Katalogen und Datenbanken ein Nachweisinstrument für elektronische Ressourcen, die von den Bibliotheken Berlin-Brandenburgs lizenziert sind und darüber hinaus diejenigen, die frei zugänglich sowie wissenschaftlich relevant sind. Die Erschließung der freien Ressourcen übernimmt eine kooperative Fachredaktion, die sich aus FachreferentInnen und -lektorInnen aus der Region rekrutiert. Dabei übernimmt jede beteiligte Person die Betreuung einer oder mehrerer Fachgruppen der Dewey Decimal-Classification (DDC) eigenverantwortlich. Die Aufgabe aller FachredakteurInnen besteht in der inhaltlichen Beschreibung, der Klassifizierung, der Vergabe von Schlagworten und der regelmäßigen Reevaluation der einzelnen Ressourcen. Die KOBV-Zentrale hat hierfür einen Kriterienkatalog entwickelt, der als Grundlage für die Beurteilung von elektronischen Ressourcen dient. Erschlossen werden

die Ressourcen schließlich über ein webbasierte Eingabe-Tool, dem Metadata-Tool der KOBV-Zentrale. Über eine Mailingliste wird der Abstimmungsbedarf untereinander gedeckt und es werden Diskussionen geführt, die das Projekt weiterführen sollen. Der Artikel beschreibt das Konzept der kooperativen Fachredaktion für freie Ressourcen, die Vorgänge und die Arbeiten, die für die Initiierung notwendig waren.

**ZIB-Report 05-26.** María López-Fernández; Cesar Palencia; Achim Schädle. *A spectral order method for inverting sectorial Laplace transforms.*

**Abstract:** Laplace transforms which admit a holomorphic extension to some sector strictly containing the right half plane and exhibiting a potential behavior are considered. A spectral order, parallelizable method for their numerical inversion is proposed. The method takes into account the available information about the errors arising in the evaluations. Several numerical illustrations are provided.

**ZIB-Report 05-27.** Achim Schädle; Lin Zschiedrich. *Additive Schwarz method for scattering problems using the PML method at interfaces.*

**Abstract:** Scattering problems in integrated optics can be modeled in simple cases by the Helmholtz equation. The computational domain is truncated by a non-reflecting boundary condition. We investigate Schwarz algorithms with a sort of DtN operator, realized by the PML-method, at the interfaces of the sub-domains as an iterative solver.

**ZIB-Report 05-28.** Tobias Achterberg; Thorsten Koch; Alexander Martin. *MIPLIB 2003.*

**Abstract:** This paper reports on the fourth version of the Mixed Integer Programming Library. Since (MIPLIB) is to provide a concise set of challenging problems, it became necessary to purge instances that became too easy. We present an overview of the 27 new problems and statistical data for all 60 instances.

**ZIB-Report 05-29.** Ivan Boev; Lavinia Hodoroaba; Andres Imhof. *Der KOBV-Metadaten-Austausch-Parser (KMA-Parser): Ein Werkzeug für Metadata-Sharing.*

Erschienen in: B.I.T.online 8 (2005) 1, S. 29-36

**Zusammenfassung:** Der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV) betreibt für das KOBV-Portal einen Austausch von Beschreibungen zu elektronischen Ressourcen (Metadaten), der zwischen verschiedenen Informationsportalen in der Region durchgeführt wird. Die unterschiedlichen Informationsportale verwenden verschiedene Metadaten-Schemata und Austausch-Formate für ihre Ressourcebeschreibungen. Um die Heterogenität der Metadaten zu überwinden, wurde der KOBV-Metadaten-Austausch-Parser (KMA-Parser) entwickelt. Andere Metadaten-Schemata werden auf das KOBV-Metadaten-Schema abgebildet. Der KMA-Parser führt gegebenenfalls eine Format-Transformation durch, konvertiert die Inhalte einzelner Elemente über Konkordanzen und erzeugt neue Metadaten-Elemente aus vorhandenen Feldern. Er validiert den Inhalt auf Vollständigkeit und steuert den Austausch der Metadaten zwischen den Portalen. Der Umwandlungsprozess funktioniert jedoch nicht nur in die Richtung des KOBV-Portals, sondern auch in die entgegengesetzte Richtung. Der Artikel beschreibt die einzelnen Vorgänge im KMA-Parser und schildert die Erfahrungen im Umgang mit der Heterogenität von Metadaten. Die gewonnenen Erfahrungen verweisen auf grundlegende Perspektiven in der universellen Zusammenarbeit von Informationsanbietern und - Providern.

**ZIB-Report 05-30.** Piero Colli Franzone; Peter Deuffhard; Bodo Erdmann; Jens Lang; Luca Franco Pavarino. *Adaptivity in Space and Time for Reaction-Diffusion Systems in Electrocardiology.*

**Abstract:** Adaptive numerical methods in space and time are introduced and studied for multiscale cardiac reaction-diffusion models in three dimensions. The evolution of a complete heartbeat, from the excitation to the recovery phase, is simulated with both the anisotropic Bidomain and Monodomain models, coupled with either a variant of the simple FitzHugh-Nagumo model or the more complex phase-I Luo-Rudy ionic model. The simulations are performed with the KARDOS library, that employs adaptive finite elements in space and adaptive linearly implicit methods in time. The numerical results show that this adaptive method successfully solves these complex cardiac reaction-diffusion models on three-dimensional domains of moderate sizes. By automatically adapting the spatial meshes and time steps to the proper scales in each phase of the heartbeat, the method accurately resolves the evolution of the intra- and extra-cellular potentials, gating variables and ion concentrations during the excitation, plateau and recovery phases.

**ZIB-Report 05-31.** Jens Burgschweiger; Bernd Gnädig; Marc C. Steinbach. *Nonlinear Programming Techniques for Operative Planning in Large Drinking Water Networks.*

**Abstract:** Mathematical decision support for operative planning in water supply systems is highly desirable but leads to very difficult optimization problems. We propose a nonlinear programming approach that yields practically satisfactory operating schedules in acceptable computing time even for

large networks.

Based on a carefully designed model supporting gradient-based optimization algorithms, this approach employs a special initialization strategy for convergence acceleration, special minimum up and down time constraints together with pump aggregation to handle switching decisions, and several network reduction techniques for further speed-up.

Results for selected application scenarios at Berliner Wasserbetriebe demonstrate the success of the approach.

**ZIB-Report 05-32.** Jens Burgschweiger; Bernd Gnädig; Marc C. Steinbach. *Optimierte Tagesplanung im Berliner Trinkwassernetz.*

Erschienen in: OR News Nr. 26, März 2006, S. 6–9, ISSN 1437-2045

**Zusammenfassung:** Der Artikel beschreibt ein mathematisches Optimierungssystem zur Betriebsplanung in großen Wassernetzen, das bei den Berliner Wasserbetrieben eingesetzt wird. Für das Berliner Versorgungsnetz werden Optimierungsergebnisse vorgestellt.

**ZIB-Report 05-33.** Klaus Hildebrandt; Konrad Polthier; Eike Preuß. *Evolution of 3D Curves under Strict Spatial Constraints.*

Appeared in: Proceedings on Ninth International Conference on Computer Aided Design and Computer Graphics (CAD/CG 2005), pp. 40–45

**Abstract:** We present a new algorithm for fairing of space curves with respect spatial constraints based on a vector valued curvature function. Smoothing with the vector valued curvature function is superior to standard Frenet techniques since the individual scalar components can be modeled similar to curvature-based curve smoothing techniques in 2d. This paper describes a curve smoothing flow that satisfies strict spatial constraints and allows simultaneous control of both curvature functions.

**ZIB-Report ZR-05-34.** Monika Kuberek; Raluca Radu. *Online-Fernleihe im KOBV – Handbuch für Bibliotheken.*

**Zusammenfassung:** Im KOBV wird für die Online-Fernleihe der Zentrale-Fernleihserver (ZFL-Server) der Firma Sisis eingesetzt. Die Software ist in der KOBV-Zentrale installiert. Der ZFL-Server dient im KOBV sowohl für die Bestellung von Monographien als auch für die Bestellung von Aufsatzkopien aus Zeitschriften. Prinzipiell gibt es zwei Verfahren, mit denen sich Bibliotheken an der Online-Fernleihe beteiligen können: das E-Mail-Verfahren und das SLNP-Verfahren. Auf beide wird im Handbuch eingegangen. Die Online-Fernleihe wurde im KOBV eingeführt, um die Fernleihe für die Benutzer zu beschleunigen, das Verfahren für die Bibliotheksmitarbeiter zu vereinfachen und den Arbeitsaufwand zu reduzieren. Sie basiert darauf, dass eine Bestellung anhand eines gefundenen Treffers ausgelöst wird – das heißt, die bibliographischen Daten sind bereits verifiziert und in einem Katalog nachgewiesen. Anschließend werden die Fernleihbestellungen über den ZFL-Server automatisch ausgeführt und verwaltet – sowohl in der regionalen KOBV-Fernleihe als auch in der verbundübergreifenden Fernleihe mit den deutschen Bibliotheksverbänden. Der ZFL-Server besteht aus verschiedenen technischen Komponenten. Eine dieser Komponenten ist das Bibliothekskonto, eine Internetanwendung, in der die Bestellverwaltung des ZFL-Servers im Internet für die Bibliotheksbedienteten transparent gemacht wird. Sowohl für die aktive als auch für die passive Fernleihe ist im Bibliothekskonto der Status der Bearbeitung zu jedem Zeitpunkt ersichtlich, z. B. in welcher Bibliothek sich die Bestellung gerade befindet, wann sie dort eingegangen ist und wann sie weggeschickt wurde, ob mit positivem oder negativem Ergebnis. Das Bibliothekskonto ist damit für die Bibliothek ein komfortables Instrument zum Überwachen der Fernleihbestellungen, indem sie zudem – falls notwendig – in den Bestellvorgang eingreifen kann. Dazu hat jede Bibliothek im Bibliothekskonto eine eigene, passwort-geschützte Dienstoberfläche. Das vorliegende Handbuch beschreibt die Vorgänge der Bestellverwaltung im Bibliothekskonto. Es richtet sich an Bibliotheksmitarbeiter, die sich mit den einzelnen Arbeitsschritten der Online-Fernleihe vertraut machen wollen. Darüber hinaus ist es zum Nachschlagen gedacht, wenn sich in der täglichen Arbeit Unklarheiten ergeben.

**ZIB-Report 05-35.** Ralf Borndörfer; Marika Neumann; Marc E. Pfetsch. *Optimal Fares for Public Transport.*

**Abstract:** The fare planning problem for public transport is to design a system of fares that maximize the revenue. We introduce a nonlinear optimization model to approach this problem. It is based on a discrete choice logit model that expresses demand as a function of the fares. We illustrate our approach by computing and comparing two different fare systems for the intercity network of the Netherlands.

**ZIB-Report 05-36.** Marc E. Pfetsch; Ralf Borndörfer. *Routing in Line Planning for Public Transport.*

**Abstract:** The line planning problem is one of the fundamental problems in strategic planning of

public and rail transport. It consists in finding lines and corresponding frequencies in a network such that a given demand can be satisfied. There are two objectives. Passengers want to minimize travel times, the transport company wishes to minimize operating costs. We investigate three variants of a multi-commodity flow model for line planning that differ with respect to passenger routings. The first model allows arbitrary routings, the second only unsplittable routings, and the third only shortest path routings with respect to the network. We compare these models theoretically and computationally on data for the city of Potsdam.

**ZIB-Report 05-37.** Ralf Borndörfer; Uwe Schelten; Thomas Schlechte; Steffen Weider. *A Column Generation Approach to Airline Crew Scheduling.*

**Abstract:** The airline crew scheduling problem deals with the construction of crew rotations in order to cover the flights of a given schedule at minimum cost. The problem involves complex rules for the legality and costs of individual pairings and base constraints for the availability of crews at home bases. A typical instance considers a planning horizon of one month and several thousand flights. We propose a column generation approach for solving airline crew scheduling problems that is based on a set partitioning model. We discuss algorithmic aspects such as the use of bundle techniques for the fast, approximate solution of linear programs, a pairing generator that combines Lagrangean shortest path and callback techniques, and a novel “rapid branching” IP heuristic. Computational results for a number of industrial instances are reported. Our approach has been implemented within the commercial crew scheduling system NetLine/Crew of Lufthansa Systems Berlin GmbH.

**ZIB-Report 05-38.** Yakov Novikov; Raik Brinkmann. *Foundations of Hierarchical SAT-Solving.*

**Abstract:** The theory of hierarchical Boolean satisfiability (SAT) solving proposed in this paper is based on a strict axiomatic system and introduces a new important notion of implicativity. The theory makes evident that increasing implicativity is the core of SAT-solving. We provide a theoretical basis for increasing the implicativity of a given SAT instance and for organizing SAT-solving in a hierarchical way. The theory opens a new domain of research: SAT-model construction. Now quite different mathematical models can be used within practical SAT-solvers. The theory covers many advanced techniques such as circuit-oriented SAT-solving, mixed BDD/CNF SAT-solving, merging gates, using pseudo-Boolean constraints, using state machines for representation of Boolean functions, arithmetic reasoning, and managing Don't Cares. We believe that hierarchical SAT-solving is a cardinal direction of research in practical SAT-solving.

**ZIB-Report 05-39.** Nicht erschienen.

**ZIB-Report 05-40.** Thorsten Schütt; Florian Schintke; Alexander Reinefeld. *Chord#: Structured Overlay Network for Non-Uniform Load-Distribution.*

**Abstract:** Data lookup is a fundamental problem in peer-to-peer systems: Given a key, find the node that stores the associated object. Chord and other P2P algorithms use distributed hash tables (DHTs) to distribute the keys and nodes evenly across a logical ring. Using an efficient routing strategy, DHTs provide a routing performance of  $O(\log N)$  in networks of  $N$  nodes.

While the routing performance has been shown to be optimal, the uniform key distribution makes it impossible for DHTs to support range queries. For range queries, consecutive keys must be stored on logically neighboring nodes.

In this paper, we present an enhancement of Chord that eliminates the hash function while keeping the same routing performance. The resulting algorithm, named Chord<sup>#</sup>, provides a richer functionality while maintaining the same complexity. In addition to Chord, Chord<sup>#</sup> adapts to load imbalance.

**ZIB-Report 05-41.** The Anh Pham. *Einbettung neuer Verwaltungsmethoden in die hierarchische Dateisystemsicht.*

**Zusammenfassung:** Die hierarchische Organisation von Dateien beherrscht Computersysteme seit vielen Jahren und wird sich vermutlich auch in Zukunft weiterhin durchsetzen. Dennoch stößt diese Verwaltungsmethode in einem klassischen hierarchischen Dateisystem bei dem jährlichen rasanten Zuwachs an neuen Daten an ihre Grenzen, auch wenn Nutzer eine ausgefeilte Verzeichnisstruktur mit einer disziplinierten Namensgebung konsequent auf- und ausbauen. Um den Überblick über die Dateien zu behalten, werden in dieser Arbeit neue Verwaltungsmethoden vorgestellt und in die hierarchische Dateisystemsicht eingebettet.

Auf der Basis des hierarchischen Dateisystems bietet ein metadatenbasiertes Dateisystem neben dem hierarchischen Zugriff noch einen flexiblen, assoziativen Zugriff auf Dateien über virtuelle Objekte, indem Suchmethoden in Form einer Anfrage auf in einer Datenbank gespeicherte Index- und Metadaten angewendet werden. Das Ergebnis dieser Abfrage wird mit Hilfe von virtuellen Verzeichnissen und virtuellen Dateien in einer übersichtlichen Form dargestellt, so dass eine Nutzung der hierarchischen Sicht

weiterhin intuitiv fortgesetzt wird. Das Datenmanagementsystem ZIBDMS, welches einen verteilten Metadatenkatalog und einen Dateireplikationskatalog beinhaltet, ermöglicht es, die oben genannten Verwaltungsmethoden für die NFS-Schnittstelle, CORBA-Middleware und Web Services transparent zu implementieren. Zudem stellt ZIBDMS weitere neue Dateiverwaltungsmethoden zur Verfügung, die sich in die hierarchische Dateisystemsicht integrieren lassen. Metadaten in Form von Attribut-Wert-Paaren lassen sich als virtuelle Datei darstellen und editieren. Eine Collection bietet die Möglichkeit, Dateien in einem logischen virtuellen Ordner zu organisieren. Mit einem Dependency-Graph lassen sich Dateien zueinander in Relation stellen, so dass eine Linkstruktur zwischen Dateien ausgedrückt werden kann. Das Verweiskonzept eines klassischen hierarchischen Dateisystems wird im ZIBDMS um eine neue Verweisart Weak-Link erweitert, um einen aktualisierbaren, konsistenten und zyklensymbolischen Link anzubieten. In einer hierarchischen Sicht lässt sich durch Verweise ein Baum bilden, in dem eine Navigation und Verweisauflistung möglich sind, was außer ZIBDMS noch kein anderes System bietet.

**ZIB-Report 05-42.** Tobias Achterberg; Timo Berthold. *Improving the Feasibility Pump.*

**Abstract:** The Feasibility Pump of Fischetti, Glover, Lodi, and Bertacco has proved to be a very successful heuristic for finding feasible solutions of mixed integer programs. The quality of the solutions in terms of the objective value, however, tends to be poor. This paper proposes a slight modification of the algorithm in order to find better solutions.

Extensive computational results show the success of this variant: in 89 out of 121 MIP instances the modified version produces improved solutions in comparison to the original Feasibility Pump.

**ZIB-Report 05-43.** Susanna Kube; Marcus Weber. *Conformation Kinetics as a Reduced Model for Transition Pathways.*

**Abstract:** The complexity of molecular kinetics can be reduced significantly by a restriction to metastable conformations which are almost invariant sets of molecular dynamical systems. With the Robust Perron Cluster Analysis PCCA+, developed by Weber and Deuffhard, we have a tool available which can be used to identify these conformations from a transition probability matrix. This method can also be applied to the corresponding transition rate matrix which provides important information concerning transition pathways of single molecules. In the present paper, we explain the relationship between these two concepts and the extraction of conformation kinetics from transition rates. Moreover, we show how transition rates can be approximated and conclude with numerical examples.

**ZIB-Report 05-44.** Roland Griesse; Martin Weiser. *On the Interplay Between Interior Point Approximation and Parametric Sensitivities in Optimal Control.*

**Abstract:** This paper is concerned with the sensitivities of function space oriented interior point approximations in parameter dependent problems. For an abstract setting that covers control constrained optimal control problems, the convergence of interior point sensitivities to the sensitivities of the optimal solution is shown. Error bounds for  $L_q$  norms are derived and illustrated with numerical examples.

**ZIB-Report 05-45.** Ralf Borndörfer; Martin Grötschel; Sascha Lukac; Kay Mitusch; Thomas Schlechte; Sören Schultz; Andreas Tanner. *An Auctioning Approach to Railway Slot Allocation.*

**Abstract:** We present an approach to implement an auction of railway slots. Railway network, train driving characteristics, and safety requirements are described by a simplified, but still complex macroscopic model. In this environment, slots are modelled as combinations of scheduled track segments. The auction design builds on the iterative combinatorial auction. However, combinatorial bids are restricted to some types of slot bundles that realize positive synergies between slots. We present a bidding language that allows bidding for these slot bundles. An integer programming approach is proposed to solve the winner determination problem of our auction. Computational results for auction simulations in the Hannover-Fulda-Kassel area of the German railway network give evidence that auction approaches can induce a more efficient use of railway capacity.

**ZIB-Report 05-46.** Marc E. Pfetsch. *A Branch-And-Cut for the Maximum Feasible Subsystem Problem.*

**Abstract:** We present a branch-and-cut algorithm for the NP-hard maximum feasible subsystem problem: For a given infeasible linear inequality system, determine a feasible subsystem containing as many inequalities as possible. The complementary problem, where one has to remove as few inequalities as possible in order to render the system feasible, can be formulated as a set covering problem. The rows of this formulation correspond to irreducible infeasible subsystems, which can be exponentially many. The main issue of a branch-and-cut algorithm for MaxFS is to efficiently find such infeasible subsystems. We present three heuristics for the corresponding NP-hard separation problem and discuss further cutting planes. This paper contains an extensive computational study of our implementation on a variety of instances arising in a number of applications.

**ZIB-Report 05-47.** Peter Deuffhard; Hans-Christian Hege. *Die Vision einer individuellen quantitativen*

*Medizin.*

**Zusammenfassung:** Die Autoren schreiben dieses Papier aus der eingeschränkten Sicht der Mathematik und der Informationstechnik. Um den speziellen Beitrag dieser Disziplinen überhaupt diskutieren zu können, sehen wir uns jedoch gezwungen, einen Rahmen abzustecken, den wir für das Jahr 2020 vorhersehen – nach Wahrscheinlichkeit und aus unserem engeren fachlichen Blickwinkel. Vorab bitten wir schon einmal bei den medizinischen Fachleuten um Nachsicht, wenn wir uns in ihrem Revier allzu dilettantisch bewegen. Vielleicht fördert aber auch unser eingeschränkter Blickwinkel ansonsten unbedachte Aspekte zutage – das hoffen wir zumindest.

**ZIB-Report 05-48.** Ernst-Michael Ilgenfritz; Werner Kerler; Michael Müller-Preussker; Andre Sternbeck; Hinnerk Stübén. *Probing the Aoki phase with  $N_f = 2$  Wilson fermions at finite temperature.*

**Abstract:** In this letter we report on a numerical investigation of the Aoki phase in the case of finite temperature which continues our former study at zero temperature. We have performed simulations with Wilson fermions at  $\beta = 4.6$  using lattices with temporal extension  $N_\tau = 4$ . In contrast to the zero temperature case, the existence of an Aoki phase can be confirmed for a small range in  $\kappa$  at  $\beta = 4.6$ , however, shifted slightly to lower  $\kappa$ . Despite fine-tuning  $\kappa$  we could not separate the thermal transition line from the Aoki phase.

**ZIB-Report 05-49.** Marc C. Steinbach. *Topological Index Criteria in DAE for Water Networks.*

**Abstract:** The dynamics of pressurized water distribution networks are naturally modeled by differential algebraic equations (DAE). This paper investigates fundamental structural properties of such a DAE model under weak regularity assumptions. The usual partial derivative-based index-1 condition is shown to be necessary and sufficient for several index concepts, as well as sufficient for solvability in a strong sense. Using the physical properties of nonlinear network elements and the inherent saddle point structure of network hydraulics, we then derive purely topological index criteria based on the network graph and the choice of control variables. Several examples illustrate the theoretical results and explore different non-index-1 situations. A brief discussion of the implications for operative planning by discrete time DAE boundary value problems concludes the paper.

**ZIB-Report 05-50.** Arie M. C. A. Koster; Annegret K. Wagler. *Comparing Imperfection Ratio and Imperfection Index for Graph Classes.*

**Abstract:** Perfect graphs constitute a well-studied graph class with a rich structure, reflected by many characterizations with respect to different concepts. Perfect graphs are, for instance, precisely those graphs  $G$  where the stable set polytope  $STAB(G)$  coincides with the fractional stable set polytope  $QSTAB(G)$ . For all imperfect graphs  $G$  it holds that  $STAB(G) \subset QSTAB(G)$ . It is, therefore, natural to use the difference between the two polytopes in order to decide how far an imperfect graph is away from being perfect; we discuss three different concepts, involving the facet set of  $STAB(G)$ , the disjunctive index of  $QSTAB(G)$ , and the dilation ratio of the two polytopes.

Including only certain types of facets for  $STAB(G)$ , we obtain graphs that are in some sense close to perfect graphs, for example minimally imperfect graphs, and certain other classes of so-called rank-perfect graphs. The imperfection ratio has been introduced by (Gerke and McDiarmid, 2001) as the dilation ratio of  $STAB(G)$  and  $QSTAB(G)$ , whereas (Aguilera et al., 2003) suggest to take the disjunctive index of  $QSTAB(G)$  as the imperfection index of  $G$ . For both invariants there exist no general upper bounds, but there are bounds known for the imperfection ratio of several graph classes (Coulonges et al. 2005, Gerke and McDiarmid, 2001).

Outgoing from a graph-theoretical interpretation of the imperfection index, we conclude that the imperfection index is NP-hard to compute and we prove that there exists no upper bound on the imperfection index for those graph classes with a known bounded imperfection ratio.

Comparing the two invariants on those classes, it seems that the imperfection index measures imperfection much more roughly than the imperfection ratio; therefore, discuss possible directions for refinements.

**ZIB-Report 05-51.** Thorsten Koch. *Rapid Mathematical Programming or How to Solve Sudoku Puzzles in a few Seconds.*

**Abstract:** Using the popular puzzle game of Sudoku, this article highlights some of the ideas and topics covered in ZR-04-58.

**ZIB-Report 05-52.** Alexander V. Kiselev; Thomas Wolf. *On weakly non-local, nilpotent, and super-recursion operators for  $N = 1$  super-equations.*

**Abstract:** We consider nonlinear, scaling-invariant  $N = 1$  boson+fermion supersymmetric systems whose right-hand sides are homogeneous differential polynomials and satisfy some natural assumptions. We select the super-systems that admit infinitely many higher symmetries generated by recursion

operators; we further restrict ourselves to the case when the dilaton dimensions of the bosonic and fermionic super-fields coincide and the weight of the time is half the weight of the spatial variable.

We discover five systems that satisfy these assumptions; one system is transformed to the purely bosonic Burgers equation. We construct local, nilpotent, triangular, weakly non-local, and super-recursion operators for their symmetry algebras.

**ZIB-Report 05-53.** Alexander V. Kiselev; Thomas Wolf. *Supersymmetric representations and integrable super-extensions of the Burgers and Boussinesq equations.*

**Abstract:** New evolutionary supersymmetric systems whose right-hand sides are homogeneous differential polynomials and which possess infinitely many higher symmetries are constructed. Their intrinsic geometry (symmetries, conservation laws, recursion operators, Hamiltonian structures, and exact solutions) is analyzed by using algebraic methods.

A supersymmetric  $N = 1$  representation of the Burgers equation is obtained. An  $N = 2$  KdV-component system that reduces to the Burgers equation in the diagonal  $N = 1$  case  $\theta^1 = \theta^2$  is found; the  $N = 2$  Burgers equation admits and  $N = 2$  modified KdV symmetry. A one-parametric family of  $N = 0$  super-systems that extend the Burgers equation is described; we relate the systems within this family with the Burgers equation on associative algebras.

A supersymmetric boson+fermion representation of the dispersionless Boussinesq equation is investigated. We solve this equation explicitly and construct its integrable deformation that generates two infinite sequences of the Hamiltonians.

The Boussinesq equation with dispersion is embedded in a one-parametric family of two-component systems with dissipation. We finally construct a three-parametric supersymmetric system that incorporates the Boussinesq equation with dispersion and dissipation but never retracts to it for any values of the parameters.

**ZIB-Report 05-54.** Hans L. Bodlaender; Alexander Grigoriev; Arie M.C.A. Koster. *Treewidth Lower Bounds with Brambles.*

**Abstract:** In this paper we present a new technique for computing lower bounds for graph treewidth. Our technique is based on the fact that the treewidth of a graph  $G$  is the maximum order of a bramble of  $G$  minus one. We give two algorithms: one for general graphs, and one for planar graphs. The algorithm for planar graphs is shown to give a lower bound for both the treewidth and branchwidth that is at most a constant factor away from the optimum. For both algorithms, we report on extensive computational experiments that show that the algorithms give often excellent lower bounds, in particular when applied to (close to) planar graphs.

**ZIB-Report 05-55.** Claus G. Gruber; Arie M.C.A. Koster; Sebastian Orłowski; Roland Wessälly; Adrian Zymolka. *A new model and a computational study for Demand-wise Shared Protection.*

**Abstract:** This report combines the contributions to INOC 2005 (Wessälly et al., 2005) and DRCN 2005 (Gruber et al., 2005). A new integer linear programming model for the end-to-end survivability concept demand-wise shared protection (DSP) is presented. DSP is based on the idea that backup capacity is dedicated to a particular demand, but shared within a demand. It combines advantages of dedicated and shared protection: It is more cost-efficient than dedicated protection and operationally easier than shared protection. In a previous model for DSP, the number of working and backup paths to be configured for a particular demand has been an input parameter; in the more general model for DSP investigated in this paper, this value is part of the decisions to take.

To use the new DSP model algorithmically, we suggest a branch-and-cut approach which employs a column generation procedure to deal with the exponential number of routing variables.

A computational study to compare the new resilience mechanism DSP with dedicated and shared path protection is performed. The results for five realistic network planning scenarios reveal that the best solutions for DSP are on average 15% percent better than the corresponding 1+1 dedicated path protection solutions, and only 15% percent worse than shared path protection.

**ZIB-Report 05-56.** Benjamin Hiller. *Probabilistic Competitive Analysis of a Dial-a-Ride Problem on Trees Under High Load.*

**Abstract:** In this paper we consider a simple variant of the Online Dial-a-Ride Problem from a probabilistic point of view. To this end, we look at a probabilistic version of this online Dial-a-Ride problem and introduce a probabilistic notion of the competitive ratio which states that an algorithm performs well on the vast majority of the instances.

Our main result is that under the assumption of high load a certain online algorithm is probabilistically  $(1 + o(1))$ -competitive if the underlying graph is a tree. This result can be extended to general graphs by using well-known approximation techniques at the expense of a distortion factor  $O(\log \|V\|)$ .

**ZIB-Report 05-57.** Martin Grötschel. *Schnelle Rundreisen: Das Travelling Salesman-Problem.*

**Zusammenfassung:** Das Travelling-Salesman-Problem (TSP) ist das am intensivsten untersuchte kombinatorische Optimierungsproblem. In diesem Abschnitt wird eine Einführung in das TSP gegeben. Es werden Problemstellungen erläutert, Anwendungen skizziert und einige Schwierigkeiten bei der korrekten Modellierung der Zielfunktion dargelegt. Es ist gar nicht so klar, was in einem konkreten Problem die wirkliche Entfernung ist. Exakte und approximative Lösungsverfahren werden an Beispielen skizziert, und es wird angedeutet, dass man, obwohl TSPs zu den theoretisch schweren Problemen zählen, in der Praxis TSPs von atemberaubender Größe lösen kann.

**ZIB-Report 05-58.** Martin Grötschel. *Das Problem mit der Komplexität:  $P = NP$ ?*

**Zusammenfassung:** Was Komplexität ist, weiß niemand so richtig. In vielen Wissenschaftsgebieten wird der Begriff Komplexität verwendet, überall mit etwas anderer Bedeutung. Mathematik und Informatik haben eine eigene Theorie hierzu entwickelt: die Komplexitätstheorie. Sie stellt zwar grundlegende Begriffe bereit, aber leider sind die meisten wichtigen Fragestellungen noch ungelöst. Diese kurze Einführung konzentriert sich auf einen speziellen, aber bedeutenden Aspekt der Theorie: Lösbarkeit von Problemen in deterministischer und nichtdeterministischer polynomialer Zeit.

Hinter der für Uneingeweihte etwas kryptischen Frage „ $P = NP$ ?“ verbirgt sich das derzeit wichtigste Problem der Komplexitätstheorie. Anhand dieser Fragestellung werden einige Aspekte der Theorie erläutert und formell erklärt, was „ $P = NP$ ?“ bedeutet. Es geht nicht nur um komplizierte algorithmische Mathematik und Informatik, sondern um grundsätzliche Fragen unserer Lebensumwelt. Kann man vielleicht beweisen, dass es für viele Probleme unseres Alltags keine effizienten Lösungsmethoden gibt?

**ZIB-Report 05-59.** Kuberek; Monika. *KOBV-Volltextserver – Langfristiger Zugriff auf Kluwer-, Springer- und Elsevier-Zeitschriften.*

**Zusammenfassung:** Seit einigen Jahren lizenzieren Bibliotheken mit erheblichem finanziellen Aufwand elektronische Zeitschriften. Anders als bei einer Papierausgabe ist der dauerhafte Zugriff auf die bezahlten Dokumente allerdings nicht garantiert: Die e-Zeitschriften liegen auf dem Verlagsserver, und der Verlag schaltet den Zugriff (meist IP-Range des Campus) auf seinem Server frei. Wird der Zugriff von Verlagsseite abgeschaltet, erlöschen sämtliche Zugriffsrechte, auch auf die in der Vergangenheit lizenzierten und bezahlten Zeitschriften. Auf die neuen Abonnementbedingungen hat das Friedrich-Althoff-Konsortium (FAK) reagiert und in seinen Verträgen den Erwerb der Archivdaten beim Auslaufen eines Vertrages festgeschrieben.

Im Rahmen eines Projektes baut die KOBV-Zentrale einen Zeitschriftenserver auf, um den Zugriff auf die lizenzierten elektronischen Zeitschriften auch nach Ablauf der Lizenzverträge zu gewährleisten. Den Grundstock bilden die vom FAK in den Jahren 1997-2003 lizenzierten elektronischen Zeitschriften der Verlage Kluwer Academic Press, Springer und Elsevier – ein Volumen von rund 1.600 Zeitschriftentiteln mit knapp 1.400.000 Artikeln.

Beim Aufbau des Zeitschriftenservers kommt der vertraglich-organisatorischen Komponente eine ebenso wichtige Rolle zu wie der technischen Realisierung. Hier hat die KOBV-Zentrale ein transparentes Verfahren konzipiert und umgesetzt, um für die Verlage die notwendige Vertrauensbasis zu schaffen und gleichzeitig den Einrichtungen ihren berechtigten Zugriff auf die Zeitschriften-Volltexte zu sichern.

Die Zeitschriftenartikel werden sowohl im Rahmen des KOBV-Volltextservers, einem neuen Internet-Dienst der KOBV-Zentrale, zugänglich gemacht – volltext-indiziert mit der Suchmaschine Swish-e – als auch integriert in die Metadatenrecherche und den Open-Linking-Dienst des KOBV-Portals. Während die Metadatenrecherche und die Sicht auf die Abstracts für alle offen sind, ist der Zugriff auf die Artikel-Volltexte auf die an den Verträgen beteiligten Einrichtungen beschränkt. Dazu wurde ein Authentifizierungsverfahren auf der Basis von IP-Ranges eingerichtet.

Der vorliegende Text ist die schriftliche Fassung eines gleichnamigen Vortrages auf der ASpB-Tagung 2005 „Spezialbibliotheken zwischen Auftrag und Ressourcen“ der Arbeitsgemeinschaft der Spezialbibliotheken, die vom 06.–09. September 2005 in der Technischen Universität München stattfand.

**ZIB-Report 05-60.** Barbara Block; Christel Hengel; Reinhold Heuvelmann; Cornelia Katz; Beate Rusch; Karin Schmidgall; Barbara Sigrist. *Maschinelles Austauschformat für Bibliotheken und die Functional Requirements for Bibliographic Records. Oder: Wieviel FRBR verträgt MAB?*

**Zusammenfassung:** Die Functional Requirements for Bibliographic Records, kurz FRBR, sind eine Empfehlung der International Federation of Library Associations and Institutions (IFLA) von 1998 zur Neustrukturierung von Bibliothekskatalogen. Mit den FRBR wird ein logisches Denkmodell für bibliographische Beschreibungen vorgelegt.



Die Diskussion über dieses Modell befindet sich im deutschsprachigen Raum – anders als im anglo-amerikanischen – noch in den Anfängen. Dem möchte dieser Aufsatz entgegen wirken, indem die Frage gestellt wird, inwieweit sich die logisch gedachten FRBR-Einheiten in den existierenden Daten wieder finden lassen. Dazu werden die Entitäten mit den dazugehörigen Attributen dem in der Bibliothekswelt Deutschlands und Österreichs üblichen MAB-Format (Maschinelles Austauschformat für Bibliotheken) gegenübergestellt und auf ihre Kompatibilität hin untersucht.

Die Autoren sind Mitglieder der überregionalen „Expertengruppe Datenformate“, in der Formatfragen, die das Bibliothekswesen betreffen, diskutiert werden, insbesondere aber das MAB-Format gepflegt wird.

**ZIB-Report 05-61.** Stefan Heinz; Sven O. Krumke; Nicole Megow; Jörg Rambau; Andreas Tuchscherer; Tjark Vredeveld. *The Online Target Date Assignment Problem*.

Appeared in: T. Erlebach; G. Persiano (eds.), *Approximation and Online Algorithms (WAOA 2005)*, LNCS 3879 (2006) 230-243

**Abstract:** Many online problems encountered in real-life involve a two-stage decision process: upon arrival of a new request, an irrevocable first-stage decision (the assignment of a specific resource to the request) must be made immediately, while in a second stage process, certain “subinstances” (that is, the instances of all requests assigned to a particular resource) can be solved to optimality (offline) later.

We introduce the novel concept of an *Online Target Date Assignment Problem* (ONLINETDAP) as a general framework for online problems with this nature. Requests for the ONLINETDAP become known at certain dates. An online algorithm has to assign a target date to each request, specifying on which date the request should be processed (e. g., an appointment with a customer for a washing machine repair). The cost at a target date is given by the *downstream cost*, the optimal cost of processing all requests at that date w. r. t. some fixed downstream offline optimization problem (e. g., the cost of an optimal dispatch for service technicians). We provide general competitive algorithms for the ONLINETDAP independently of the particular downstream problem, when the overall objective is to minimize either the sum or the maximum of all downstream costs. As the first basic examples, we analyze the competitive ratios of our algorithms for the particular academic downstream problems of bin-packing, nonpreemptive scheduling on identical parallel machines, and routing a traveling salesman.

