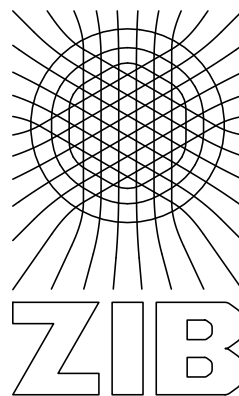


---

Konrad-Zuse-Zentrum  
für Informationstechnik Berlin



Takustraße 7  
D-14195 Berlin-Dahlem  
Germany

# Jahresbericht 2006



## Vorwort

Wie in den Vorjahren legt das Zuse-Institut Berlin (ZIB) auch nach Ablauf des Jahres 2006 all seinen Freunden und interessierten Beobachtern aus Wissenschaft, Politik und Wirtschaft seinen Bericht vor.

Auch 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. *Methodische Schwerpunkte* waren, in der Mathematik, u. a. funktionenraumbasierte optimale Steuerung bei partiellen Differentialgleichungen, Laplace-Domain-Methoden, inverse Probleme, virtuelle Labore, diskrete Strukturen, ganzzahlige Optimierung, Online-Optimierung und nichtlineare Optimierung sowie, in der Informatik, Konzepte autonomer Systeme, verteiltes Datenmanagement, Peer-to-Peer-Protokolle und hochperformante Algorithmen für Hardware-Beschleuniger.

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

Unsere *Drittmittelleinnahmen* sind gegenüber 2005 mit nunmehr 4,6 Mio. EUR auf den höchsten Wert angestiegen, den wir in der über 20-jährigen Geschichte des ZIB je erreicht haben. Traditionell waren wir wieder mit den großen Berliner Universitäten FU, HU, TU und der Charité sowie mit einer Reihe außeruniversitärer Forschungseinrichtungen in Verbundprojekten aktiv: herausragende Beispiele sind das DFG-Forschungszentrum MATHEON (im Vorjahr weiter bewilligt bis 2010), der Kooperative Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (*KOBV*, bewilligt bis 2010), der Verbund zum Aufbau einer Grid-Infrastruktur (*D-Grid*, bis 2008) sowie das landesweite Wissenschaftsnetz *BRAIN*. Wir sind Mitglied in zwei Sonderforschungsbereichen, drei Graduiertenkollegs, einer DFG-Forschergruppe, zwei DFG-Schwerpunktprogrammen sowie einer Reihe von BMBF- und EU-Projekten. Darüber hinaus haben ZIB-Mitarbeiter im Berichtszeitraum unsere *zehnte* Spin-off-Firma ausgegründet. Besonders freut uns auch, dass die Informatiker des ZIB zwei Patente, über effiziente Datenhaltung im Internet, platzieren konnten – unsere ersten beiden Patente!

Für unsere HPC-Superuser konnte die Finanzierung des HLRN-Nachfolgerechners nunmehr endgültig gesichert werden – über sechs Bundesländer hinweg! Die europaweite Ausschreibung erfolgte Anfang 2007, so dass mit einer Erstinstallation um die Jahreswende 2007/08 gerechnet werden kann. Unsere Superuser dürfen sich schon jetzt auf eine zehn- bis zwanzigfache Rechen- und Speicherleistung freuen. Für den geringeren Rechenzeithunger bietet sich schon jetzt der im Berichtszeitraum installierte D-Grid-Cluster mit 160 Prozessorkernen an, der primär der deutschen Grid-Community zur Verfügung steht.

Natürlich sind Mitglieder des ZIB auch eingebunden in die deutschlandweite Exzellenzinitiative, die jedoch in Berlin bisher in unseren Nachbardisziplinen noch nicht gegriffen hat. Umso erfreulicher ist, dass in der ersten Runde im Herbst 2006 die Berliner Mathematik mit einer internationalen Graduiertenschule, der *Berlin Mathematical School (BMS)*, anerkannt worden ist.

Der *Wissenschaftliche Beirat* tagte am 26./27. Juni 2006. In seinem durchweg positiven Bericht heißt es wörtlich: „Das ZIB ist ein Pfund, mit dem Berlin wuchern kann im Wettbewerb der Länder, nicht nur der Bundesländer. Die Qualität des ZIB ist offensichtlich, es kann als 'most visible institution' eingestuft werden.,, Über dieses Urteil freuen wir uns natürlich und werden uns anstrengen, dem hohen Anspruch auch in der Zukunft gerecht zu werden.

Berlin, im Mai 2006

A handwritten signature in black ink, reading "P. Deuffhard". The signature is written in a cursive, slightly slanted style.

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 . . . . .	25
2.2.1	Nano-Optik . . . . .	25
2.2.2	Moleküldesign . . . . .	34
2.2.3	Medizinische Therapie- und Operationsplanung . . . . .	43
2.2.4	Bild- und Signalanalyse . . . . .	59
2.2.5	Visuelle Strömungsanalyse . . . . .	69
2.2.6	Virtuelle Labore . . . . .	74
2.2.7	Ganzzahlige Optimierung . . . . .	82
2.2.8	Diskrete Strukturen . . . . .	87
2.2.9	Nichtlineare Optimierung und optimale Steuerung . . . . .	93
2.2.10	Logistik . . . . .	97
2.2.11	Telekommunikation . . . . .	107
2.2.12	Verifikation . . . . .	120
2.2.13	Verkehr . . . . .	123
2.2.14	Verteilte Systeme und Anwendungen . . . . .	129
2.3	Auszeichnungen und Rufe . . . . .	146
<b>3</b>	<b>Wissenschaftliche Dienstleistungen</b>	<b>149</b>
3.1	Überblick . . . . .	149
3.2	Schwerpunkte . . . . .	152
3.2.1	Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV) . . . . .	152
3.2.2	Math-Net und Math&Industry . . . . .	155
3.2.3	Computeralgebra (REDUCE) . . . . .	157
3.2.4	Informationstechnische Werkzeuge für Museen . . . . .	159
<b>4</b>	<b>Supercomputing und Netze</b>	<b>161</b>
4.1	Supercomputing am ZIB . . . . .	161
4.1.1	Der Hochleistungsrechner HLRN-I . . . . .	161

4.1.2	Nachfolgebeschaffung HLRN-II . . . . .	164
4.1.3	Der Wissenschaftliche Ausschuss – Ausgewählte Großprojekte . . . . .	165
4.2	Fachberatung . . . . .	176
4.2.1	Chemie und Bioinformatik . . . . .	178
4.2.2	Geowissenschaften . . . . .	178
4.2.3	Ingenieurwissenschaften . . . . .	179
4.2.4	Physik . . . . .	179
4.3	Das Berliner Wissenschaftsnetzwerk BRAIN . . . . .	180
<b>5</b>	<b>Publikationen</b>	<b>185</b>
5.1	Preprints . . . . .	185
5.2	Mitherausgabe von Publikationen . . . . .	185
5.3	Beiträge in Zeitschriften und Tagungsbänden . . . . .	186
5.4	Monographien . . . . .	195
5.5	Habilitationen . . . . .	195
5.6	Dissertationen . . . . .	195
5.7	Examensarbeiten . . . . .	196
<b>6</b>	<b>Software</b>	<b>199</b>
6.1	Numerische Algorithmen . . . . .	199
6.2	Visualisierung . . . . .	200
6.3	Optimierung . . . . .	202
6.4	Computeralgebra . . . . .	208
6.5	Computer Science . . . . .	209
6.6	Informationsdienste . . . . .	211
6.7	KOBV-Dienste . . . . .	213
<b>7</b>	<b>Organisatorisches</b>	<b>215</b>
7.1	Organe . . . . .	215
7.2	Satzung . . . . .	216
7.3	Wissenschaftlicher Beirat . . . . .	216
7.4	Mitgliedschaften . . . . .	216
7.5	ZIB-Fellows . . . . .	217
7.6	Selbstverwaltung . . . . .	218
7.7	Wirtschaftliche Situation . . . . .	218
7.8	Spin-off-Firmen . . . . .	220
7.9	Personelle Entwicklung . . . . .	221



---

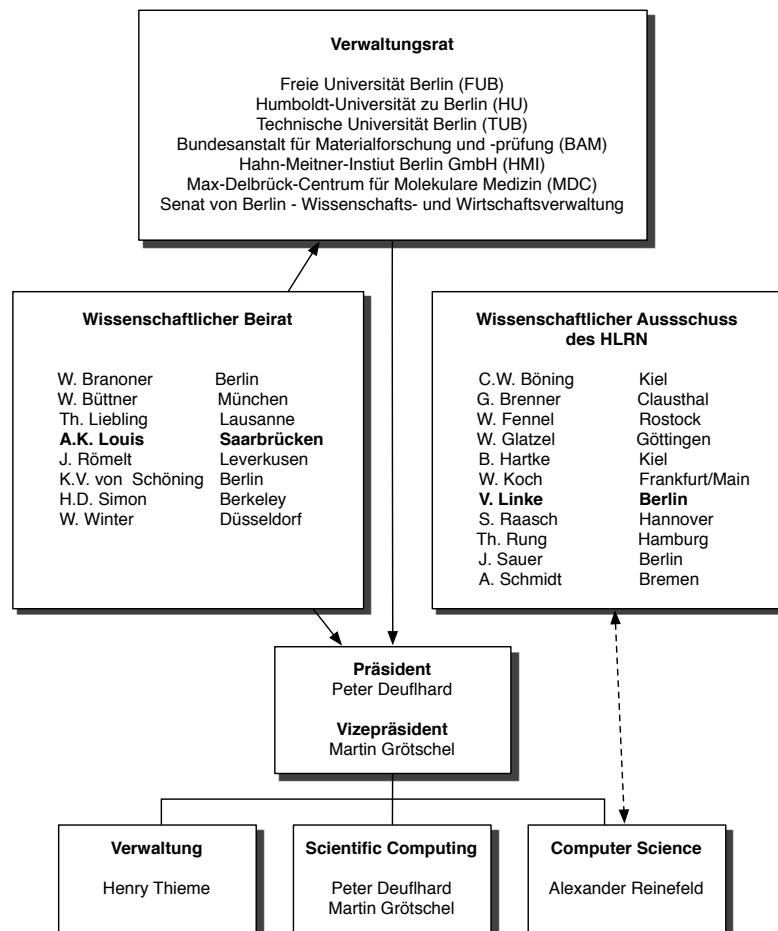
<b>8 Ansprechpartner</b>	<b>223</b>
<b>Anhang A: Übersicht Preprints</b>	<b>225</b>
<b>Anhang B: Vorträge und Lehrveranstaltungen von ZIB-Mitarbeitern</b>	<b>235</b>
B1: Vorträge und Gastaufenthalte . . . . .	235
B2: Vorlesungen und Seminare . . . . .	252
B3: Mitveranstalter auswärtiger Tagungen . . . . .	255
<b>Anhang C: Tagungen und Gäste am ZIB</b>	<b>257</b>
C1: Tagungen und Gäste am ZIB . . . . .	257
C2: Gastaufenthalte . . . . .	258
C3: Tagungen und Veranstaltungen . . . . .	261
C4: Ausstellungen und Softwaredemonstrationen . . . . .	261
C5: Mathematik und Informatik für die Öffentlichkeit . . . . .	262



## 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.

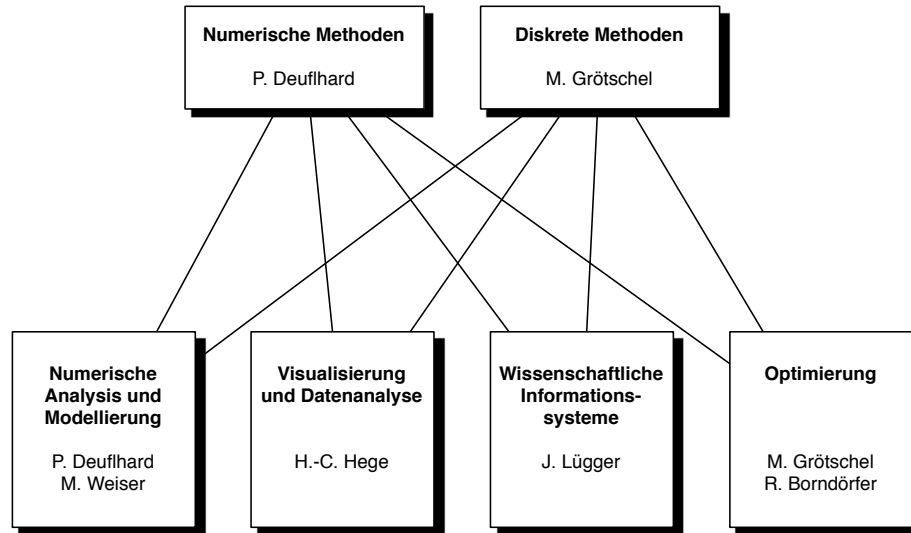
## Anwendungsbezogene Forschung, Kooperationen

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. Die Finanzierung der Forschungsver erfolgt im Rahmen der Grundfinanzierung des Landes Berlin und durch die Einwerbung von Drittmitteln. 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 – neben den drei Berliner Universitäten FU, HU und dem WIAS – eine der fünf Institutionen, die das von der DFG geförderte Forschungszentrum MATHEON „Mathematik für Schlüsseltechnologien: Modellierung, Simulation und Optimierung realer Prozesse“ tragen.

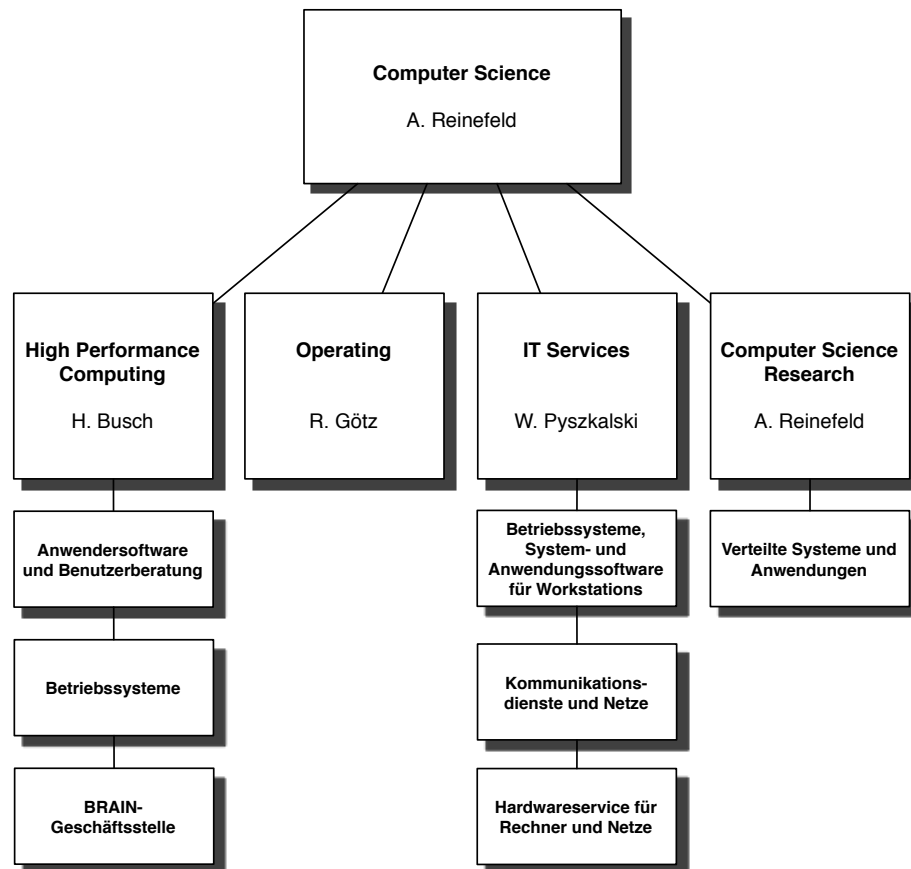
## Supercomputing als Dienstleistung

Das ZIB betreibt in Berlin im Rahmen des Norddeutschen Verbundes für Hoch- und Höchstleistungsrechnen – HLRN – als Dienstleistung für Hochschulen und wissenschaftliche Einrichtungen in Norddeutschland ein Hochleistungsrechnersystem der Firma IBM (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 vier 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.* Ziel der Forschungsarbeit ist die Entwicklung neuer, effektiver Verfahren zur visuellen Datenanalyse. Hierfür werden Algorithmen aus den Bereichen Bild- und Datenanalyse, Geometrieverarbeitung, Computergrafik und Visualisierung entwickelt. Die Abteilung gliedert sich in die vier Arbeitsgruppen „Visualization Algorithms“, „Visualization Systems“, „Comparative Visualization“ und „Medical Planning“. Die entwickelten Verfahren finden Anwendung in der Molekülphysik, Neuro- und Pflanzenbiologie, der medizinischen Therapieplanung, der computergestützten Chirurgie, Geo- und Astrophysik sowie der Strömungsanalyse. 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- 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 Logistik, Versorgung, Telekommunikation, Chipverifikation und Verkehr.

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

## Gliederung des Bereiches Computer Science

*Abteilung Computer Science Research.* 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 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)
<i>Computational Drug Design</i>	(Leitung Marcus Weber)
- *Visualization and Data Analysis*, untergliedert in die Arbeitsgruppen
 

<i>Visualization Algorithms</i>	(Leitung Hans-Christian Hege),
<i>Visualization Systems</i>	(Leitung Steffen Prohaska)
<i>Medical Planning</i>	(Leitung Stefan Zachow)
<i>Comparative Visualization</i>	(Leitung Ingrid Hotz).

Die Arbeitsgruppen *Visualization Systems* und *Comparative Visualization* wurden erst 2006 neu eingerichtet, letztere auf Basis einer von der DFG geförderten Emmy-Noether-Gruppe. Die Arbeitsgruppe *Computational Drug Design* wird unter neuer Leitung weitergeführt.

Im Berichtszeitraum wurden die *methodischen* Schwerpunkte

- Konformationsanalyse
- Laplace-Domain-Methode
- Funktionenraumbasierte Optimierungsmethoden
- adaptive Multilevel-Finite-Elemente-Methoden
- inverse Probleme und Sparseness

- Merkmalsextraktion aus skalaren, vektoriellen und tensoriellen Feldern
- Virtuelle Labore

bearbeitet.

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

- Biotechnologie: Entwurf von hochspezifischen Medikamenten
- Biologie: Erstellung von anatomischen und funktionellen Atlanten
- Medizin: Therapie- und Operationsplanung
- Meteorologie: Mikrostrukturanalyse von Wolkenschichten
- Nanotechnologie: Nano-Optik
- Physik: Gravitationsphysik und Kosmologie
- Fluidmechanik: Merkmalsanalyse und Visualisierung von Strömungen

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

**Nano-Optik.** In diesem Schwerpunkt wurden im Berichtszeitraum Fortschritte sowohl im Bereich der Kooperation mit Anwendern aus Industrie und Forschung als auch im Bereich der Grundlagenforschung zur Lösung spezieller Problemklassen gemacht, die von den Maxwell'schen Gleichungen abgeleitet sind.

Neue theoretische und algorithmische Ergebnisse betrafen insbesondere Arbeiten zu analytischen Lösungen in inhomogenen Außenräumen und transparente Randbedingungen für zeitabhängige Problemklassen. Methodisch konnten wir hierbei auf der in den letzten Jahren am ZIB entwickelten Polbedingungs-Methode aufbauen. In den MATHEON-Projekten D9 und D15 wurden algorithmische Fragestellungen mit direktem Bezug zu Anwendungen in der Nanotechnologie/-optik bearbeitet. In enger Kooperation mit der Spin-off-Firma JCMwave wurden Industrieprojekte im nationalen und internationalen Wettbewerb errungen. Die erfolgreiche Kooperation mit Infineon Technologies und Qimonda zu Fragestellungen der optischen Lithographie wurde weitergeführt. Von der Industrie finanziert wurden hochgenaue Streurechnungen auf großen dreidimensionalen Geometrien. Der Erfolg beruhte auf dem kombinierten Einsatz finiter Elemente hoher Ordnung, adaptiver Gitterverfeinerung und optimaler transparenter Randbedingungen. Gemeinsam mit der Physikalisch-Technischen Bundesanstalt in Braunschweig und dem Advanced Mask Technology Center in Dresden wurde mit der Scatterometrie ein neues Anwendungsfeld für das ZIB erschlossen. Im DFG-Schwerpunktprogramm *Photonische Kristalle* wurden Untersuchungen zu Strahlungsverlusten in photonischen Kristallfasern in Zusammenarbeit mit der Europäischen Südsternwarte und der Technischen Universität von Dänemark durchgeführt. Die bereits im Vorjahr etablierte enge Kooperation mit dem DFG-Forschungszentrum Karlsruhe (Center for Functional Nanostructures) wurde erfolgreich fortgesetzt durch Untersuchungen zu Spinwellen in photonischen Metamaterialien.

**Moleküldesign.** Bei der Simulation von neuen Wirkstoffmolekülen liegt der Schwerpunkt nach wie vor bei der Konformationsdynamik; diese Thematik wird schon seit einigen Jahren am ZIB verfolgt und auch im Rahmen von MATHEON gefördert (Projekt A4 in Zusammenarbeit mit der AG Biocomputing, Ch. Schütte, FU Mathematik). Im Berichtszeitraum stand besonders die Entwicklung adaptiver *gitterfreier* Methoden im Fokus, die nun das Tor öffnen zur Behandlung größerer Moleküle. Erste Früchte dieser Bemühungen sind neue Kooperationsprojekte, die in neue SFB-Initiativen in Chemie (des. Sprecher R. Haag) und Pharmazie (des. Sprecherin M. Schäfer-Korting) einfließen. Als ein wichtiger Meilenstein gelang uns die Herleitung eines Algorithmus zur stabilen Berechnung stationärer Dichten, der auch weit über den engeren Anwendungsbezug hinaus von Nutzen sein sollte. Mit Hilfe der neu entwickelten Algorithmen haben wir in Kooperation mit der AG Fan (Charité, Campus Benjamin Franklin) das erste Mal einen Wirkstoff zur Therapie des Diabetes mellitus Typ II vorgeschlagen, der nun auch synthetisiert werden soll. Wichtiges Instrument dabei waren insbesondere auch die Point-Matching- und Visualisierungsmethoden, die in der Arbeitsgruppe *Visualization Algorithms* in enger Kooperation mit dem *Computational Drug Design* entwickelt wurden. Neben dem Design auf molekularer Ebene wurden weitere Anstrengungen auf einer größeren Ebene in Richtung auf Systembiologie unternommen, hier insbesondere im Bereich Modellierung des gynäkologisch-endokrinologischen Kreislaufs.

**Medizinische Therapie- und Operationsplanung.** Diese Thematik wird in den beiden Arbeitsgruppen *Medical Planning* sowie *Computational Medicine* bearbeitet.

In der erstgenannten Arbeitsgruppe lag der Schwerpunkt im Berichtszeitraum auf der *Kopfchirurgie* – das heißt, Mund-, Kiefer- und Gesichts-Chirurgie sowie Hals-, Nasen- und Ohrenchirurgie. Neu hinzugekommen sind Probleme der Orbitachirurgie (der chirurgischen Rekonstruktion der knöchernen Augenhöhle) und der dentalen Implantologie unter Berücksichtigung des Mandibulärnervs. Zur Erfassung normal ausgeprägter Formen und Verläufe von anatomischen Strukturen wurden statistische Formmodelle der knöchernen Augenhöhle und des Unterkiefers erstellt, die als Grundlage für die chirurgische Rekonstruktion bzw. die Therapieplanung dienen sollen. Die bereits in den Vorjahren am ZIB entwickelte Erzeugung *statistischer Formmodelle* anatomischer Strukturen gewann im Berichtszeitraum auch für die orthopädische Chirurgie an Bedeutung. Im Rahmen des EU Projektes (DeSSOS – *Decision Support System for Orthopedic Surgery*) wurde ein anatomisches Referenzmodell des menschlichen Kniegelenkes einschließlich aller Muskeln, Sehnen, Bänder und Knorpel erstellt. Methoden dieser Art finden zudem Anwendung im neu bewilligten Sonderforschungsbereich 760 (*Biomechanics and Biology of Musculoskeletal Regeneration*); Ziel dort ist die schnelle und verlässliche Rekonstruktion der gesamten unteren Extremitäten zur biomechanische Bewegungssimulation. In Kooperation mit der CFX Berlin Software GmbH wurden Simulationen der Luftströmung bei der Nasenatmung durchgeführt. Ziel der Untersuchung ist, Strömungsphänomene in der Nase zu verstehen und diese Erkenntnisse sowohl für Therapiekonzepte in der Nasenchirurgie als auch für die Medikamentenverabreichung durch die Nase zu nutzen.

In der zweitgenannten Arbeitsgruppe wurden im Rahmen des MATHEON-Projekts A1 und eines DFG-Einzelprojekts mit der Arbeitsgruppe Wust (Charité Campus Virchow) verschiedene Aspekte der Hyperthermie-Therapieplanung bearbeitet. Mehrere Diplom- und Masterarbeiten befassten sich mit einer genaueren Mehrskalen-Modellierung der Perfusion. Die Therapieplanung mit funktionenraumorientierten Innere-Punkte-Methoden, die die Verwendung

auch komplexer nichtlineare Temperaturmodelle gestattet, profitierte strukturell von neuen Erkenntnissen zur Behandlung von Zustandsbeschränkungen. In Richtung auf eine Online-Nachoptimierung der Therapie konnten unter Verwendung eines Gauß-Newton-Verfahrens Antennenprofile aus wenigen MR-Thermometriedaten adaptiert werden. Im Rahmen des MATHEON-Projektes A2 wurde eine kontaktstabilisierte Variante des Newmark-Algorithmus für dynamische Kontaktprobleme hergeleitet, die als Basis für weitere theoretische Untersuchungen und algorithmische Entwicklungen in enger Kooperation mit der Arbeitsgruppe Kornhuber (FU Mathematik) durchgeführt werden. Dieses mathematische Projekt ist dual konstruiert zu medizinisch orientierten Arbeiten, die bisher im Rahmen einer DFG-geförderten Klinischen Forschergruppe (KFO 102) durchgeführt wurden und ab 2007 auf der erweiterten Förderbasis eines frisch genehmigten Sonderforschungsbereichs fortgesetzt werden (SFB 760: *Biomechanics and Biology of Musculoskeletal Regeneration*). Die bereits im Vorjahr begonnenen Arbeiten zur Simulation der elektrischen Anregung von Herzmuskelgewebe wurden um reale Herzgeometrien ausgeweitet — insbesondere im Hinblick auf Fibrillation. Aufgrund der lokalen Lösungsstruktur der wandernden Depolarisationsfront sind adaptive Algorithmen, wie sie im Programmpaket KARDOS implementiert sind, unabdingbar. Allerdings ist die quantitativ korrekte und effiziente Simulation, insbesondere für die genaue Bestimmung der Frontgeschwindigkeit, noch immer eine Herausforderung.

**Bild- und Signalanalyse.** Die Aktivitäten der AG „Inverse Problems in Science and Technology“ zu diesem Thema wurden durch drei DFG-geförderte Projekte und DWD-Mittel unterstützt. Es wurden adaptive Methoden für die Frame-basierte Lösung von schlecht gestellten inversen Problemen entwickelt. Im Bereich nichtlinearer inverser Probleme mit Sparsity-Randbedingungen wurden Verfahren im Bereich Farbbild-Inpainting entwickelt und in Zusammenarbeit mit dem PACM (Princeton University) erfolgreich auf die Restauration alter italienischer Fresken angewandt. Ähnliche iterative Verfahren wurden in Zusammenarbeit mit dem RICAM (Linz) und dem MEG-Zentrum Tübingen für die Rekonstruktion fötaler Gehirnaktivitäten entwickelt. In einer ebenfalls sehr fruchtbaren Kooperation mit der Universität Basel ist es uns im letzten Jahr gelungen, mittels Methoden aus dem Bereich „Sparse Approximation“ beschleunigte Support-Vektormaschinen (SVM) zu konstruieren (bis zu 540 mal schneller als herkömmliche SVM), die erfolgreich im Bereich Gesichtserkennung und Modellierung eingesetzt werden.

Im Bereich der meteorologischen Signalanalyse lag der Schwerpunkt im Bereich der Strukturanalyse von Wolkenschichten. Dazu wurde ein AIF-Projekt bewilligt, das es uns gestattet, in einer zweijährigen Förderperiode in Zusammenarbeit mit der Firma Metek (Elmshorn), eine Signalauswertung für das Wolkenradargerät MIRA36 nach neuesten mathematischen Erkenntnissen zu entwickeln.

Im Rahmen des MATHEON-Projektes F2 wurde das Korrespondenzproblem bei Oberflächen, das zur Erstellung von statistischen Formmodellen gelöst werden muss, als variationelles Problem formuliert. Im Berichtszeitraum wurden einerseits die Struktur des Funktionals, als auch erste numerische Lösungsansätze untersucht. Die atlas-basierte Segmentierung konnte auf neue medizinische und biologische Daten angewendet werden. Die methodischen Entwicklungen bilden die Grundlage für ein Teilprojekt im neubewilligten SFB 760, in dem Verfahren zur geometrischen Rekonstruktion aller für die biomechanische Modellierung und Simulation relevanten anatomischen Strukturen der unteren Extremitäten entwickelt werden sollen.

**Visuelle Strömungsanalyse.** Beim Bau von Flugzeugen, Schiffen und Fahrzeugen sind vielfältige strömungsmechanische Optimierungsprobleme zu lösen. Typischerweise sind jedoch die Parameterräume zu hochdimensional und die Rechnungen pro Parameterpunkt zu aufwendig, um eine rein rechnerische Optimierung durchzuführen. Es muss daher eine Vorauswahl der interessanten Parameterbereiche getroffen werden – auf Basis eines physikalischen Verständnisses der Strömungsphänomene und deren Parameterabhängigkeit.

In einem Teilprojekt des SFB 557 „Beeinflussung komplexer turbulenter Scherströmungen“ und im EU-Projekt „Virtual Tank Utility in Europe“ wurden eine Reihe von Verfahren entwickelt, mit denen die strukturellen Merkmale von berechneten oder gemessenen Strömungen ermittelt und grafisch dargestellt werden können. Während in den Vorjahren der Schwerpunkt auf topologischen Strömungsmerkmalen lag, standen nun Verfahren zur Identifikation von Wirbelsystemen im Vordergrund. Dabei wurde die Tatsache genutzt, dass sich die Kerne von Wirbeln als Extremalstrukturen gewisser Strömungsgrößen beschreiben lassen. Ein weiteres Ziel war die Verfolgung von Merkmalen bei Variation von Parametern. Die Anwendbarkeit und Nützlichkeit unserer Verfahren führte zu einer Aufwertung des Projektes im SFB 557: In der nächsten Förderphase soll die visuelle Merkmalsanalyse als eigenständiges Teilprojekt weitergeführt werden.

**Virtuelle Labore.** Das Aufgabenspektrum blieb gegenüber den Vorjahren unverändert: Astrophysik, Landschaftsplanung, Neurobiologie und Pflanzenbiologie. In der Astrophysik lag der Schwerpunkt auf verbesserten Verfahren zur Darstellung von numerischen Lösungen auf strukturierten, adaptiv verfeinerten Gittern. Die Verfahren wurden insbesondere für die Darstellung von Multiskalen-Simulationen zur Entstehung der ersten Sterne und Galaxien im Universum verwendet. Darüberhinaus wurde ein physikalisches Beleuchtungsmodell entwickelt, das zu realistischen Darstellungen führt.

In der Landschaftsvisualisierung wurde im Rahmen des BMBF-Förderschwerpunktes „Nachhaltige Waldwirtschaft - die Bedeutung des Waldes und seiner Leistungen für die Gesellschaft“ mit der Entwicklung eines neuen Systems zur interaktiven Landschaftsvisualisierung begonnen, das durchgängig Multiskalen-Eigenschaften bieten soll: vom Terrain ganzer Planeten bis hin zur Einzelpflanze.

Der frühere Schwerpunkt Neurobiologie gewann wieder an Bedeutung: einerseits wurde ein DFG-Einzelprojekt begonnen, mit dem Ziel, die Methoden zur Erstellung anatomischer und funktioneller Atlanten weiter zu verbessern, und andererseits wurden – in Kooperation mit der AG Sakmann (MPI für medizinische Forschung, Heidelberg) und der AG Borst (MPI für Neurobiologie, Martinsried) – umfangreiche Vorarbeiten für ein ambitioniertes Projekt zur Erstellung eines 3D-populationsbasierten Atlanten des somatosensorischen Kortexes in zellulärer Auflösung durchgeführt. Dies führte Anfang 2007 zur Bewilligung eines MPG-geförderten Projektes.

In der Pflanzenbiologie konnte ein lange angepeiltes Ziel erreicht werden: die Integration von Genexpressionsmustern in ein 3D-Modell eines sich entwickelnden Gerstenkorns. Mit der Ausweitung auf ein zeitabhängiges Modell (4D) wurde begonnen. Die Integration von Daten aus unterschiedlichen Experimenten in ein Referenzsystem bietet Biologen die Möglichkeit, bisher nicht zugängliche räumliche und raumzeitliche Korrelationen zwischen beliebigen experimentell zugänglichen Größen aufzuspüren.

**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* werden im Rahmen des DFG-Forschungszentrums MATHEON (Projekt A1) funktionenraumbasierte Innere-Punkte-Methoden für Optimalsteuerungsprobleme mit elliptischen partiellen Differentialgleichungen untersucht. Insbesondere zur Behandlung von Zustandsbeschränkungen konnten neue analytische Einsichten erzielt werden: Konvergenzresultate für Probleme mit verteilter Steuerung sowie lokale Selbstkonkordanz in der Nähe generischer Lösungen semi-infiniten Probleme. Diese strukturellen Erkenntnisse wirken sich durch die Konstruktion geeigneter Barrierefunktionen direkt auf die Algorithmen und Anwendungen aus, etwa in der Hyperthermie-Therapieplanung.

Der Bereich **Diskrete Methoden** besteht aus den Abteilungen *Optimierung* (die im folgenden beschrieben wird) und *Wissenschaftliche Informationssysteme* (die in Kapitel 3 beschrieben wird), mit den Schwerpunkten:

#### *Optimierung*

- Ganzzahlige Optimierung
- Diskrete Strukturen
- Nichtlineare Optimierung und optimale Steuerung
- Logistik
- Telekommunikation
- Verifikation
- Verkehr

#### *Wissenschaftliche Informationssysteme*

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

Im Folgenden werden Struktur und Entwicklung der Abteilung *Optimierung* im Berichtszeitraum 2006 dargestellt; die Abteilung *Wissenschaftliche Informationssysteme* wird in Kapitel 3 vorgestellt.

Das fruchtbare Zusammenspiel zwischen mathematischer Grundlagenforschung und der Lösung konkreter Anwendungsprobleme spiegelt sich in der Abteilung *Optimierung* in der Strukturierung in die drei methodischen Schwerpunkte *Ganzzahlige Optimierung*, *Diskrete Strukturen* und *Nichtlineare Optimierung und optimale Steuerung* und die vier Anwendungsschwerpunkte *Logistik*, *Telekommunikation*, *Verifikation* und *Verkehr* wider. In den methodischen Schwerpunkten greifen wir aus den Anwendungen kommende Fragestellungen von

allgemeinem Interesse (z. B. die Behandlung von Symmetrien oder Nichtlinearitäten) auf, behandeln diese mathematisch und wenden die Ergebnisse in enger Kooperation mit Partnern aus der Industrie auf die ursprüngliche Fragestellung an.

Ein Indikator für die erfolgreiche Umsetzung dieses Konzeptes ist die Einbindung der Abteilung in verschiedene nationale und internationale Netzwerke und Forschungsprogramme, darunter die DFG-Forschergruppe *Algorithmen, Struktur, Zufall*, das Graduiertenkolleg *Stochastische Modellierung und quantitative Analyse großer Systeme in den Ingenieurwissenschaften* (MAGSI, Ende September 2006 ausgelaufen), mehrere BMBF- und EU-Programme, das DFG-Forschungszentrum MATHEON sowie Kooperationen mit dem *Centre of Excellence for Mathematics and Statistics of Complex Systems (MASCOS, Australien)*. Eine Zusammenarbeit mit dem *Centro de Modelamiento Matemático (CMM, Universidad de Chile)* in den Bereichen Verkehr, Telekommunikation und Bergbau bahnt sich an.

In der Abteilung haben im Berichtszeitraum zwei ausländische Doktoranden aus Vietnam und Ecuador gearbeitet, für zwei weitere Doktoranden aus Brasilien und China wurden Stipendien bewilligt. Diese Kooperationen sind eine direkte Folge von Auslandsaufenthalten und Fortbildungsveranstaltungen wie den zweiwöchigen Kursen *Combinatorial Optimization at Work*, die 2006 auf der Sommerakademie Görlitz und am Morningside Center of Mathematics der Chinesischen Akademie der Wissenschaften in Peking durchgeführt wurden. Mit über 50 Teilnehmern aus ganz China war dieser Kurs ein großer Erfolg.

Umgekehrt erhielten mehrere unserer Mitarbeiter im Berichtszeitraum Rufe auf Lehrstühle an verschiedene Universitäten. So hat Marc Steinbach im August 2006 eine Professur an der Universität Hannover angetreten. Brigitte Lutz-Westphal vertritt seit dem Beginn des WS 2006 eine Juniorprofessur für Didaktik der Mathematik an der TU Berlin. Volker Kaibel hat Ende 2006 einen Ruf an die Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg angenommen.

Um solchen personellen Veränderungen und neuen thematischen Entwicklungen Rechnung zu tragen, haben wir die Struktur der Abteilung angepasst. Der neue Schwerpunkt *Verifikation* ist ein Resultat der erfolgreichen Zusammenarbeit mit den Firmen OneSpin Solutions und Infineon in Verbindung mit den Fortschritten bei der Lösung von CIPs („Constraint Integer Programs“). Die Probleme in der Chip-Verifikation führen auf sehr interessante mathematische Fragestellungen im Bereich unzulässiger ganzzahliger Programme, der exakten Lösung von linearen und ganzzahligen Programmen und dem Zählen der Anzahl von Lösungen. Der Bereich *Nichtlineare Optimierung* gewinnt durch Anforderungen aus der Praxis auch in unseren Anwendungsgebieten zunehmend an Bedeutung. Wir wollen diese beiden Bereiche in der Zukunft gezielt weiter verstärken. Der Schwerpunkt *Logistik* ist durch eine Zusammenlegung der früheren Schwerpunkte *Online-Optimierung* und *Produktion und Logistik* entstanden. Wir tragen damit mehreren Berufungen in der Vorperiode Rechnung und rücken die gemeinsamen Anwendungen mehr in den Vordergrund.

Im Folgenden soll ein kurzer Überblick über die Arbeit in den Schwerpunkten der Abteilung *Optimierung* gegeben werden; eine ausführlichere Darstellung findet sich in Abschnitt 2.2.

**Ganzzahlige Optimierung** ist die wichtigste Modellierungs- und Lösungstechnik in unserem Arbeitsgebiet. Das Feld hat in den letzten Jahren durch große Fortschritte bei der Lösung allgemeiner gemischt-ganzzahliger Programme auf sich aufmerksam gemacht. Unsere Forschungen konzentrieren sich auf Themen, mit denen wir in konkreten Anwendungen konfrontiert sind, die aber über das einzelne Projekt hinaus von grundsätzlichem Interesse sind.

Beispiele hierfür sind die bessere Behandlung von Symmetrien in ganzzahligen Programmen in dem neuen MATHEON-Projekt *Symmetrien in der ganzzahligen linearen Optimierung*, die wir zur Berechnung von Linienplänen in Nahverkehrsnetzen benötigen, das Studium von unzulässigen linearen und ganzzahligen Programmen, die in der Chip-Verifikation auftreten, in einem weiteren neuen MATHEON-Projekt *Unzulässige lineare Ungleichungssysteme* und die Integration von Techniken der Constraint-Programmierung (in der Software SCIP) zur Lösung von Scheduling-Problemen in der Logistik.

Als greifbares Ergebnis dieser Arbeiten sind in den letzten Jahren eine Reihe von Optimierungswerkzeugen entstanden, die wir im Download-Bereich des ZIB zur unentgeltlichen Nutzung für akademische Zwecke zur Verfügung stellen. Die Modellierungssprache Zimpl, der LP-Löser SoPlex, das Tool perPlex zur Verifikation bei Optimalität einer LP-Basis in exakter Arithmetik, das Framework SCIP zur Lösung von ganzzahligen und Constraint-Programmen und die Problembibliothek MIPLIB bilden zusammen eine umfassende Familie von leistungsfähigen Tools mit bemerkenswertem Einfluss auf das Gebiet. So hat die Firma ILOG, die den derzeit wichtigsten kommerziellen IP-Löser vermarktet, neben Roland Wunderling, dem Entwickler von SoPlex, seit September 2006 auch Tobias Achterberg, den Schöpfer von SCIP, eingestellt; im siebenköpfigen Entwicklerteam für den CPLEX-Kern sind nun zwei ehemalige ZIB-Mitarbeiter vertreten. T. Achterberg arbeitet im Rahmen einer Kooperation mit ILOG weiterhin am ZIB, so dass beste Voraussetzungen für zukünftige Kooperationen bestehen. Einen anderen erwähnenswerten Erfolg gab es 2006 bei der Zusammenarbeit mit der *Standard Performance Evaluation Corporation (SPEC)*, einer von allen namhaften Hardware-Herstellern getragenen Organisation zur Entwicklung von Standardtests für Mikroprozessoren. Die SPEC hat 2006 ihre Integer- und Floating-Point-Benchmarks erneuert. In den aktuellen Versionen CINT2006 und CFP2006 ist jetzt neben dem Min-Cost-Flow-Löser mcf, der bereits in der Vorgängerversion CINT2000 enthalten war, auch der Löser SoPlex vertreten. Das bedeutet etwas vereinfacht gesagt, dass die nächste Generation von CPUs von den Herstellern für die Lösung von Netzwerkflussproblemen und Linearen Programmen optimiert wird.

**Diskrete Strukturen** Dieser Bereich bildet den Schwerpunkt unserer theoretischen Arbeit. Allgemeine 0/1-Polytope, Baumzerlegungen, stabile Mengen oder längenbeschränkte Kreise und Wege sind Basisstrukturen, deren besseres Verständnis von fundamentaler Bedeutung für den gesamten Bereich der Optimierung ist. Kreise und Wege mit Längenbeschränkungen treten z. B. gleichermaßen in Netzwerken in der Logistik, in der Telekommunikation und im Verkehr auf, so dass es sich langfristig lohnt, diese Objekte grundsätzlich zu untersuchen. Wir haben diese Forschungslinie im Jahr 2006 in den beiden zur der DFG-Forschergruppe *Algorithmen, Struktur, Zufall* gehörenden Projekten *Stabile Mengen und Perfekte Graphen* und *Geometrie und Kombinatorik von 0/1-Polytopen*, dem Projekt *Kreis- und Wegopolytope mit und ohne Kardinalitätsbeschränkungen* und dem Projekt *Baumweite und Kombinatorische Strukturen* verfolgt. In allen diesen Projekten konnten sehr gute theoretische Ergebnisse erzielt werden. Das zugehörige Didaktik-Projekt *Diskrete Mathematik in der Schule*, das zur Popularisierung dieser Fachrichtung beitragen soll, wurde 2006 erfolgreich abgeschlossen; ein Lehrbuch ist Anfang 2007 erschienen. An dem Thema wird im Rahmen der Vertretung einer Juniorprofessur an der TU Berlin weitergearbeitet.



**Nichtlineare Optimierung und optimale Steuerung** Auf Probleme, bei denen nicht-lineare und diskrete Komponenten auf komplexe Weise zusammenwirken, stoßen wir zunehmend in Anwendungsbereichen wie der Optimierung von Einnahmen (= Preis  $\times$  Menge) bei der Angebotsplanung im Verkehr, der Planung und Steuerung von Gas-, Wasser- und Abwassernetzen, bei denen neben der Flussmenge Größen wie der Druck wichtig sind, der Behandlung von Vermischungen bei der Materialflussoptimierung im Bergbau usw. All diese Probleme sind generell sehr schwierig. Wir arbeiten deshalb in einer Kooperation der Abteilungen *Numerische Analysis und Modellierung* und *Optimierung* sowohl an einer Verbesserung grundlegender Lösungsverfahren in den Projekten *Funktionenraumbasierte Innere-Punkte-Methoden* und *Lösung spezieller nicht-linearer gemischt ganzzahliger Programme* als auch an Referenzlösungen für erste, konkrete Fragestellungen wie im Projekt *Optimalsteuerung von Abwassernetzen*. Wir werden diesen Bereich 2007 durch eine Kooperation mit einem Gast aus China weiter ausbauen.

**Logistik** Der neue Bereich Logistik wurde 2006 durch eine Zusammenlegung der beiden Vorgänger-Bereiche *Online-Optimierung* und *Produktion und Logistik* gebildet. Wir tragen damit einer zunehmenden Verschiebung des Fokus von der Online-Optimierung hin zu angewandten Fragestellungen Rechnung. Im Einzelnen wurde das Projekt *Online-Disposition von Fahrzeugen* erfolgreich abgeschlossen, während ein neues angewandtes Projekt *Zeitoptimierung von Aufzug-Gruppensteuerungen* begann. Die Projekte *Kombinatorische Aspekte in der Logistik* und *Kombinatorische Online-Planung* untersuchen spezielle methodische Probleme logistischer Systeme, die in den angewandten Projekten *Auslastung von Laserquellen an Robotschweißstationen*, *Online-Steuerung von Multi-Server-Transportsystemen* und *Zeitoptimierung für Aufzug-Gruppensteuerungen* eingesetzt werden, um vollautomatische Transport- und Produktionssysteme in Versandlagern und Automobilfabriken zu optimieren.

**Telekommunikation** Das Leitthema der Arbeit im Bereich Telekommunikation ist die Dimensionierung und Steuerung von Telekommunikationsnetzwerken – zwei Probleme, an denen wir seit vielen Jahren sehr erfolgreich mit namhaften Partnern aus der Industrie zusammenarbeiten. Die rasante technische Entwicklung der Branche und die erfolgreiche Arbeit der Vergangenheit, durch die Ansprüche (z. B. an die Ausfallsicherheit von Netzen) gestiegen sind, führt uns zu immer neuen, noch komplexeren Fragestellungen, bei denen die Behandlung stochastischer Komponenten und die Planung mehrerer logischer oder physikalischer Schichten eine immer wichtigere Rolle spielen. Neben verschiedenen MATHEON-, DFG-, BMBF- und EU-Projekten konnten wir nach einigen schwierigen Jahren auch wieder ein neues Industrieprojekt zur integrierten Planung von Multi-Layer-Netzen mit Siemens und T-Systems gewinnen. Hervorzuheben ist auch die umfangreiche Zusammenarbeit mit verschiedenen anderen Gruppen in ganz Europa in der COST-Kooperation „GRAAL“.

**Verifikation** Bei der Mikrochip-Herstellung wird der Aufwand zur Überprüfung der korrekten Funktion komplexer integrierter Schaltkreise ein immer bedeutenderes Problem, das spätestens mit dem Auftreten der berühmten Pentium-Fehler auch das Bewusstsein breiter Bevölkerungsschichten erreicht hat. Als Alternative zu extrem aufwendigen Simulationen bietet sich ein formaler Beweis der Korrektheit an, wie er in ganz ähnlicher Form auch bei der Softwareentwicklung sehr nützlich wäre. Mathematisch führen Verifikationsprobleme auf den Beweis der Unzulässigkeit oder, etwas allgemeiner, auf das Zählen der Anzahl von Lösungen eines ganzzahligen Programms. Diese Zielrichtung unterscheidet sich von der in der klassi-

schen ganzzahligen Optimierung, die sich auf die Lösung von zulässigen IPs konzentriert. Aufgrund der guten Zusammenarbeit mit der Industrie, die im Berichtsjahr zu einem neuen Projekt mit OneSpin Solutions geführt hat, haben wir die Aktivitäten im Bereich Verifikation in einem eigenen Schwerpunkt zusammengefasst, den wir in der Zukunft ausbauen werden. Die Zusammenarbeit mit dem methodischen Bereich *Ganzzahlige Optimierung* ist sehr eng, insbesondere mit dem Projekt *Unzulässige lineare Ungleichungssysteme* und auf der Softwareseite bei der Weiterentwicklung des CP/IP-Frameworks SCIP, das wir als Codebasis nutzen.

**Verkehr** Der Bereich Verkehr hat eine lange Tradition bei der erfolgreichen Lösung von Problemen der sogenannten operativen Planung, das heißt, des optimalen Einsatzes von Betriebsmitteln zur Durchführung eines gegebenen Angebotes. Wir haben unter anderem eine Reihe von Optimierungssystemen für den Fahrzeug- und Personaleinsatz im Öffentlichen Personennahverkehr und im Luftverkehr entwickelt und zusammen mit Industriepartnern in der Praxis etabliert. Nun wollen wir eine ähnliche Methodik auch in der Angebotsplanung entwickeln. Wir betreten dabei vielfach Neuland, in dem wir Problemen mit hohem Integrationsgrad und einer vielschichtigen Mathematik begegnen. So führt die Betrachtung von Angebot und Nachfrage auf spiel- oder auktionstheoretische Zusammenhänge, die Modellierung von Nachfrage auf stochastische Modelle und die Betrachtung von Größen wie dem Erlös auf Nichtlinearitäten. In Kooperation mit den entsprechenden methodischen Schwerpunkten arbeiten wir an verschiedenen zukunftsweisenden, teilweise aber auch durchaus kontroversen Anwendungsprojekten wie einem BMBF-Projekt zur Auktionierung von Eisenbahnfahrtrassen, einem neuen Projekt zur fairen Verteilung der Kosten in einer gemeinsam genutzten Infrastruktur und einem MATHEON-Projekt zur Angebotsplanung im öffentlichen Verkehr. Im letztgenannten Projekt ist eine Diplomarbeit zur Preisplanung im öffentlichen Personennahverkehr entstanden, die 2006 mit einem Preis der Gesellschaft für Operations Research ausgezeichnet wurde.

Der Bereich **Computer Science** umfasst die vier Abteilungen *High Performance Computing*, *IT Services*, *Operating* und *Computer Science Research*. Die ersten drei bieten Dienstleistungen im Umfeld des wissenschaftlichen Hochleistungsrechnens an. Dazu gehören die fachliche Beratung unserer Supercomputer-Nutzer, der Betrieb komplexer Rechnersysteme, Datenhaltungskomponenten und Kommunikationsnetzwerke sowie das Management des Berliner Weitverkehrsnetzwerks BRAIN. Die vierte Abteilung, Computer Science Research, bearbeitet Forschungsthemen aus dem Bereich des verteilten und parallelen Hochleistungsrechnens. Das Spektrum reicht von der Entwicklung systemnaher Software für innovative Rechnersysteme bis zum Entwurf neuer Algorithmen für den kooperativen Einsatz geographisch verteilter Ressourcen. Auf den untersten Softwareschichten aufbauend, werden höherwertige Systemdienste bereitgestellt, die den effizienten, benutzerfreundlichen und vor allem zuverlässigen Einsatz paralleler und verteilter Systeme ermöglichen. 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 vorhandenen Grid-

Systemen, die zumeist auf der mittlerweile gut verstandenen, traditionellen Client/Server-Architekturen basieren, setzen wir neuartige Peer-to-Peer-Techniken ein, um die Grid-Systeme zuverlässiger und skalierbar zu machen. In Peer-to-Peer-Systemen sind alle Knoten eines verteilten Systems gleichartig. Da jeder neu hinzukommende Knoten in der Regel auch als Dienstleister fungiert, besitzen Peer-to-Peer-Systeme einen hohen Grad an Ausfallsicherheit – sofern die verteilte Systemsoftware entsprechend konzipiert wurde. Auch die selbständige Re-Konfiguration beim Ausfall von Komponenten 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, wiederum basierend auf Peer-to-Peer-Ansätzen, skalierbare Software zur sicheren und effizienten Speicherung attributierter Dateien in verteilten Systemen. Im *ZIB-DMS*-Datenmanagementsystem spezifiziert der Nutzer eine Datei nicht wie in herkömmlichen Systemen über ihren Namen und Speicherort, sondern über Attribut-/Wertpaare, die frei gewählt werden können. Mehrere Doktoranden, Diplomanden und Studenten arbeiten an diesem Forschungsthema mit dem Ziel, eine Software zur Verwaltung von Millionen Dateien im Grid zu entwickeln. Da die Speicher-knoten in sehr großen verteilten Systemen jederzeit transient oder permanent ausfallen können, ist eine Replikation der Dateien unabdingbare Voraussetzung. Zur Unterstützung einer möglichst effektiven Replikation entwickeln wir neue Methoden für die Datenplatzierung, das Caching, Staging, Routing, Scheduling und die 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 drei neuen EU-Projekte SELFMAN, XtreamOS und GridChem begonnen sowie die Arbeit an unseren fünf D-Grid-Projekten fortgeführt. Die inhaltlichen Schwerpunkte dieser Projekte, die im weiteren detailliert beschrieben sind, umfassen verschiedene Aspekte des Speicherns sehr großer Datenmengen in global verteilten Systemen.

## 2.2 Schwerpunkte

### 2.2.1 Nano-Optik

Im Schwerpunkt *Nano-Optik* wurden die in den Vorjahren entwickelten Ansätze zur Lösung industrierelevanter Probleme weiterverfolgt. Zu Beginn des Jahres wurde das DFG-Forschungszentrums MATHEON „Mathematik für Schlüsseltechnologien“ verlängert. Zu dem bereits etablierten Projekt zur Simulation von nano-optischen Bauteilen gibt es nun ein neues Projekt, das die Kooperation mit dem DFG-Forschungszentrum CFN „Center for Functional Nanostructures“ in Karlsruhe bündelt. Durch die Beteiligung im Anwendungsbereich „Elektronische Schaltkreise und optische Technologien“ im MATHEON 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 kommerzielle, auf die jeweiligen Anforderungen zugeschnittene Softwarelösungen an.

### 3D-Simulationen für die optische Mikrolithographie

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

**Kooperationspartner:** Reinhard März, Infineon Technologies AG und JCMwave GmbH; Roderick Köhle, Qimonda AG, Christoph Nölscher, Qimonda Dresden GmbH & Co. OHG

**Förderung:** JCMwave GmbH

In der Halbleitertechnologie werden mittels der optischen Mikrolithographie Strukturinformationen von einer so genannten Photomaske in einen Photolack übertragen, der zuvor auf einem sehr planen Silizium-Substrat aufgebracht wurde. Nach der Entwicklung des latenten Bildes wird die Strukturinformation in eine darunterliegende Schicht übertragen. Die Mikrolithographie und die damit verbundenen Prozessabfolgen sind eine Schlüsseltechnologie bei der Herstellung von integrierten Schaltkreisen und Speicherbausteinen. Die Weiterentwicklung der optischen Mikrolithographie ist zur Zeit entscheidend dafür, dass die *Roadmap* der Halbleiterindustrie weiterverfolgt werden kann. Auf Seite der Mikrolithographie geht es im Wesentlichen darum, Muster mit immer kleineren Strukturen zu reproduzieren.

Die Auflösung der optischen Mikrolithographie wird im Wesentlichen durch die verwendete Lichtwellenlänge bestimmt (Erzeugung mit ArF-Excimerlaser, Wellenlänge 193 nm). Mit entsprechenden Projektionsoptiken und speziell entworfene Photomasken lassen sich hiermit Linienbreiten von etwa 65 nm herstellen. Dies sind die besten aktuell im Industriebetrieb erreichten Werte; in der nächsten Generation von optischen Mikrolithographiesystemen sollten mit Hilfe von Immersionsoptiken Linienbreiten von 45 nm erreicht werden.

Zum Verständnis der Prozesse beim Lichtdurchgang durch die Photomaske und für das Design der Photomaske sind genaue und zuverlässige numerische Simulationen von entscheidender Bedeutung. Forschungsabteilungen großer Unternehmen der Halbleiterindustrie beschäftigen sich daher mit der Entwicklung und/oder Anwendung von Simulationsverfahren zur Lösung der Maxwellschen Gleichungen.

Im Projektzeitraum wurde ein von der Qimonda AG und der JCMwave GmbH finanziertes Projekt in diesem Kontext fortgeführt. Hierbei geht es um den Einsatz und die Weiterentwicklung von am ZIB entwickelten Finite-Elemente-Methoden (FEM) zur Simulation stationärer Lösungen der Maxwellschen Gleichungen.

Im aktuellen Projektzeitraum wurden die Verfahren so weiterentwickelt, dass auch Simulationen auf 3D-Gebieten effizient durchgeführt werden können. Ein Meilenstein im aktuellen Berichtszeitraum war die Anwendung des Löser auf ein beim Projektpartner Qimonda aktuell relevantes Problem mit einem großen 3D-Rechengebiet [5]. Hierbei wurde die Lichtstreuung an einer etwa 1000 Kubikwellenlängen großen 3D-Teststruktur untersucht. Im Vergleich des mit FEM berechneten Luftbildes mit experimentellen Messungen ergibt sich eine sehr gute Übereinstimmung, siehe Abbildung 2.1. In der Veröffentlichung [5] wird von den Projektpartnern insbesondere hervorgehoben, dass mehrere weitere eingesetzte rigorose Maxwell-Löser

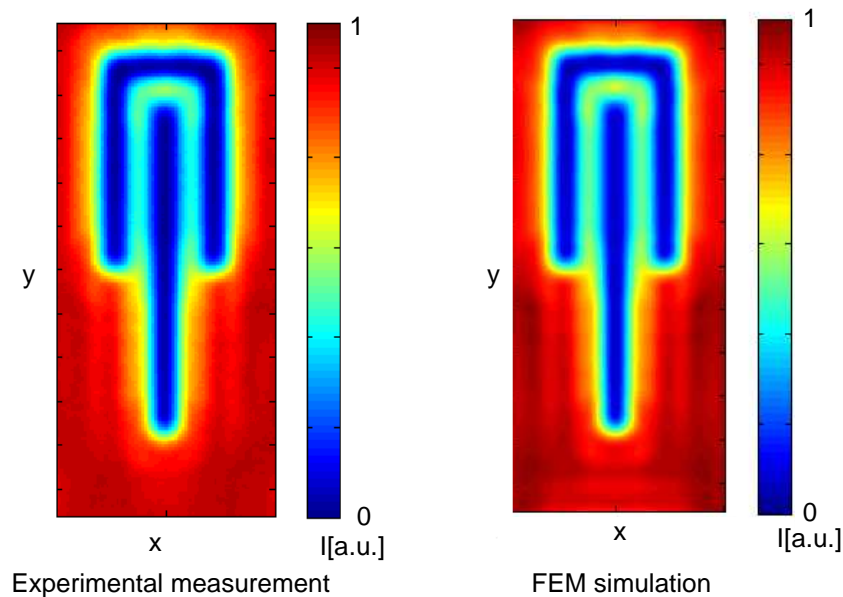


ABBILDUNG 2.1: Experiment: Gemessenes Luftbild (Intensitätsverteilung  $I(x, y)$ ) einer Halbleiter-Teststruktur (links). Simulation: Aus der rigorosen FEM Streurechnung bestimmtes Luftbild (rechts).

(*SOLID-E*, *PROLITH*) an der Lösung dieses Problems scheiterten. Die Gründe für den Vorteil des am ZIB entwickelten FEM-Lösers sind hierbei im Wesentlichen die verwendeten Kanten-elemente hoher Ordnung (typischerweise wird ein polynomieller Grad der Ansatzfunktionen von  $p = 3$  bis 5 gewählt, eine adaptive Steuerung für  $p$  ist in Planung), die perfekte Adaption des Finite-Elemente-Gitters an die Geometrie und die effektive Kopplung des Innenraumes an den Außenraum mit einem neu entwickelten adaptiven Verfahren [18].

### Bestimmung von Resonanzen isolierter Nano-Strukturen

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

**Kooperationspartner:** Wolfgang Löffler, Matthias Karl, CFN Karlsruhe

**Förderung:** DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekte D9, D15

Resonatoren sind wichtige Bauteile zur Erzeugung von maßgeschneiderten Lichterfeldern in der Nanooptik. Aktuell beschränkt sich die Simulation dieser Bauteile meist auf vereinfachte Modelle der hergestellten Resonatoren, da die Simulation der Bauteile aufgrund ihrer Größe, sowie der komplizierten Geometrie eine große Herausforderung ist. In diesem Projekt versuchen wir die Maxwellgleichungen möglichst näherungsfrei zu lösen.

Das elektronenmikroskopische Bild eines vom CFN in Karlsruhe hergestellten Säulenresonators ist rechts in Abbildung 2.2 zu sehen. Um in den isolierten Säulenstrukturen Moden anzuregen, wird in die GaAs-Schicht (der breite hellgraue Streifen auf halber Höhe rechts in Abbildung 2.2 in der Säule), die den Resonator darstellt, eine Schicht mit Quantenpunkten

eingebettet. Diese Quantenpunkte können zum Emittieren von Licht mit einer Vakuumwellenlänge  $\lambda$  zwischen 930 und 990 nm angeregt werden. Das von den Quantenpunkten emittierte Licht wird dann durch Braggspiegel (regelmäßige Streifenmuster in Abbildung 2.2) auf beiden Seiten des Resonators in diesem gehalten.

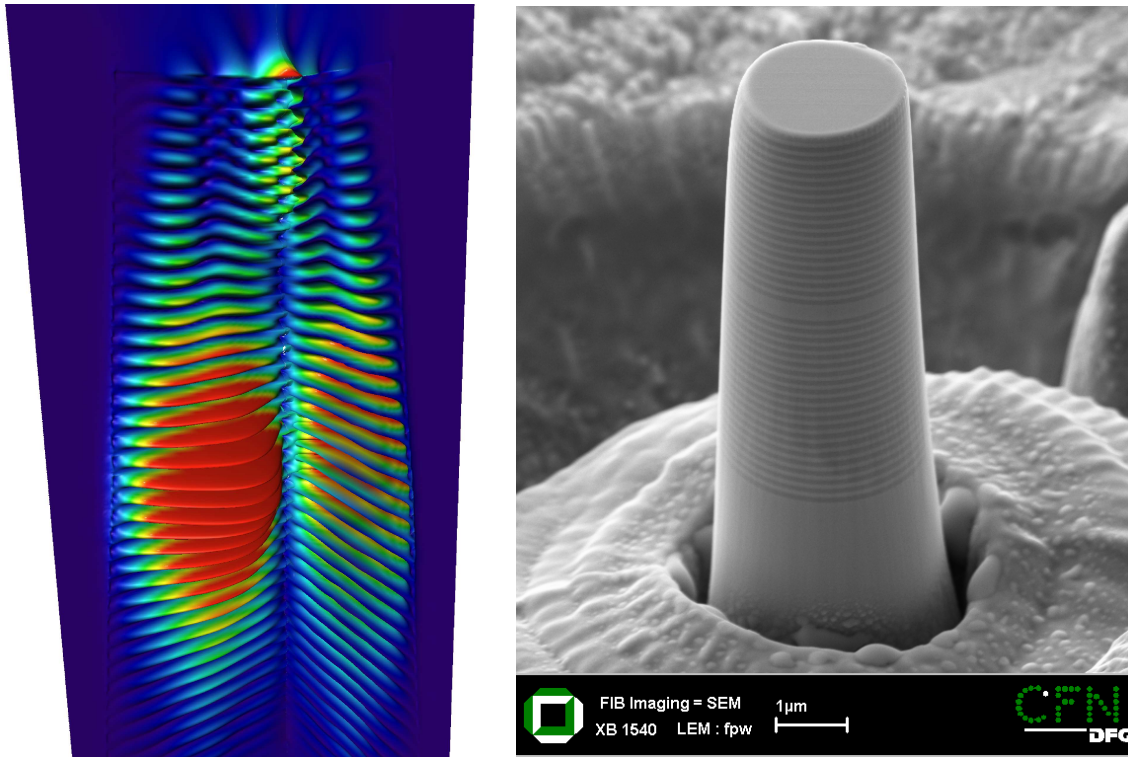


ABBILDUNG 2.2: Links: Rotations-symmetrisch gerechnete Resonanz in einem Säulenresonator der Breite  $2.7 \mu\text{m}$ . Rechts: Mikroskopische Aufnahme des Resonators (hergestellt am CFN Karlsruhe).

Säulen werden in unterschiedlichen Größen hergestellt. Selbst kleine Säulenresonatoren haben einen Durchmesser von  $2,5 \mu\text{m}$ . Zusammen mit den Braggspiegeln – bestehend aus  $\lambda$ -halbe dicken Schichten – auf beiden Seiten des Resonators erhält man damit ein so großes Rechengebiet, dass genaue Simulationen nur mit effizienten Algorithmen möglich sind. Mit Hilfe der am ZIB entwickelten Finite-Elemente-Methoden ist es möglich, die isolierten Säulenstrukturen als rotations-symmetrische Eigenwertprobleme zu simulieren [18].

Um die Modellierung zu verifizieren, wurde als vereinfachtes System ein zweidimensionales Modell mit einer Punktquelle in der Mitte des Resonators simuliert. Zur Begrenzung des Rechengebiets wird die PML-Methode [19] verwendet. Bereits dieses stark vereinfachte Modell zeigte das erwartete Resonanzverhalten.

Qualitativ stimmt das simulierte Resonanzverhalten mit den am CFN durchgeführten Messungen überein. Um das Modell dem Versuch weiter anzugleichen, wurde ein rotations-symmetrisches Resonanzproblem gelöst. Eine Eigenmode, die beim Lösen des rotations-symmetrischen  $\omega$ -Eigenwertproblems gefunden wurde, ist in Abbildung 2.2 links zu sehen. Auch hier zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung mit dem vereinfachten Modell sowie mit den Messungen der Kooperationspartner am CFN Karlsruhe. In weiteren Schritten werden nun

Punktquellen in das rotationssymmetrische Streuproblem eingeführt, um den Messvorgang möglichst exakt zu simulieren und die verschiedenen Resonanzen identifizieren und gezielt anregen zu können.

### **Zusammenfassung weiterer Aktivitäten**

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

Das Gebietszerlegungsverfahren mit transparenten Randbedingungen an den Teilgebietsträndern hat sich für die Simulation von EUV-Linienmasken bewährt. Hierbei werden die Maxwellgleichungen innerhalb des Braggspiegels für einzelne Fouriermoden mit Hilfe des Transfer-Matrix-Algorithmus analytisch gelöst, und an die Finite-Elemente-Diskretisierung der komplizierter strukturierten Maske angekoppelt [17]. Die Konvergenzeigenschaften dieses Verfahrens sind in der Praxis gut, da die Materialien verlustbehaftet sind, das heißt, daß ihre Permittivität einen Imaginärteil hat. Vor allem läßt sich jedoch durch das Gebietszerlegungsverfahren der Speicheraufwand stark reduzieren. Wir verfolgen diesen Ansatz weiter und planen, ihn zur Lösung der Maxwellgleichungen in dreidimensionalen strukturierten und aus Schichten aufgebauten Bauteilen einzusetzen. Da fast alle Bauteile, die wir simulieren, aus strukturierten Schichten aufgebaut werden, ist dieser Ansatz erfolgversprechend.

**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 im Jahr 2004 begonnene Projekt wurde im Projektzeitraum fortgeführt. Resonanzen spielen in verschiedenen Gebieten der Technik eine wichtige Rolle. Zum Beispiel ist bei der Konstruktion von mechanischen Bauteilen wie Flugzeugtragflügeln die genaue Kenntnis von Resonanzen wichtig, um Störgeräusche zu unterdrücken. Resonanzen können als Eigenschwingungen aufgefasst werden. Im Unterschied zu Eigenschwingungen geschlossener Systeme sind Resonanzen jedoch nicht normierbar.

Im Projektzeitraum wurde die Polbedingungsmethode sowohl algorithmisch als auch theoretisch weiterentwickelt. Es wurde eine Variationsmethode eingeführt, die nicht nur eine effiziente numerische Berechnung von Resonanzen erlaubt, sondern auch einen wichtigen Beitrag zum theoretischen Verständnis von Resonanzen liefert. Hierbei entstammen die Ansatzfunktionen im Innenraum dem üblichen Sobolevraum. Im Außenraum wird der Hardyraum verwendet. Bei dieser neuartigen Methode sind am Kopplungsrand des Innen- zum Außenraum keine zusätzlichen Terme mehr notwendig, was die numerische Umsetzung im Rahmen eines Finite-Elemente-Programms deutlich vereinfacht.

**Simulation von photonischen Kristallfasern** (Jan Pomplun, Sven Burger, Roland Klose, Lin Zschiedrich, Frank Schmidt; Kooperation: Ronald Holzlöhner, European Southern Observatory, München und Chile; Peter J. Roberts, Technical University of Denmark, Lyngby; Förderung: JCMwave GmbH, DFG-Schwerpunktprogramm 1113)

Die Eigenschaften photonischer Kristallfasern bieten große Vorteile in einer Vielzahl von Anwendungsgebieten, wie z. B. Transmission von intensivem Licht oder hoch sensiblen Gassensoren. Aufgrund ihrer Mikrostrukturierung besitzen sie die Fähigkeit, Licht in mit Luft gefüllten Hohlkernen anstatt in Glas zu führen, siehe Abbildung 2.3. Die Berechnung der

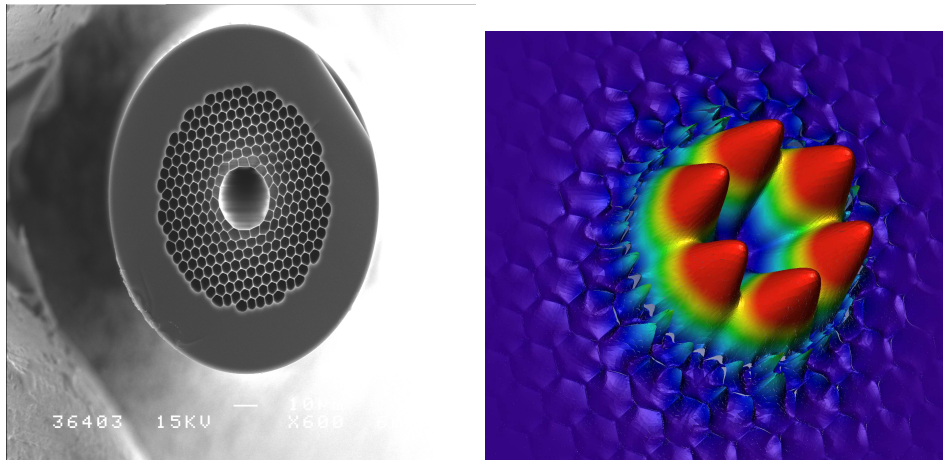


ABBILDUNG 2.3: Querschnitt einer Photonischen Kristallfaser und der vierten Kernmode

Transmissionscharakteristika und Strahlungsverluste von photonischen Kristallfasern ist aufgrund ihrer komplexen Strukturierung auf der Nanometer-Skala eine große numerische Herausforderung. Die Finite-Elemente-Methode ist hierfür der ideale Kandidat. Im Vergleich zu Standardmethoden wie der Expansion der Lösung in ebene Wellen, benötigt die FE-Methode nur einen Bruchteil der Zeit für Simulationen mit extremer Genauigkeit. Dies ermöglicht es, das Design der Fasern entsprechend dem Anwendungsgebiet zu optimieren.

Unser Simulationstool findet z. B. in der Europäischen Südsternwarte (ESO) Anwendung [7]. Dort wird eine photonische Kristallfaser für den Einsatz in einem adaptiven Optiksistem im Very Large Telescope in Chile optimiert. Mit Hilfe hochgenauer Simulationen soll für die Leitung von extrem intensivem Laserlicht die diffuse Streuung von Licht an den Wänden des Hohlkerns minimiert werden.

**Schnelle Faltung** (Achim Schädle; Kooperation: María López-Fernández und Cesar Palencia, Universidad de Valladolid, Valladolid, Spanien; Christian Lubich, Universität Tübingen; Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt D9)

Zur Auswertung von Faltungsintegralen, wie sie in Evolutionsgleichungen mit Gedächtnis vorkommen, wurde der schnelle, vergessliche Faltungsalgorithmus [16] für variable Schrittweiten weiterentwickelt und implementiert [10]. Dadurch ist jetzt eine adaptive Schrittweitensteuerung möglich.

Zur Berechnung von  $N$  Schritten einer Faltungsquadratur mit variabler Schrittweite werden nur  $O(N \log N)$  Operationen und ein Speicheraufwand von  $O(\log N)$  benötigt. Die Grundlage des Algorithmus ist die Reduktion auf gewöhnliche Differentialgleichungen mit Hilfe einer Pfadintegraldarstellung entlang von Hyperbeln. Die Wahl dieser Hyperbeln wurde in [11] theoretisch untersucht. Aufgrund dieser theoretischen Untersuchung können optimale Parameter für die Hyperbeln berechnet werden.

Das Verfahren wurde an drei Beispielen getestet: An einer Schrödingergleichung mit konzentrierter Nichtlinearität, einer chemischen Reaktionsgleichung mit eingeschränkter Diffusion und einem Beispiel aus der Viskoelastizität mit fraktionellen Materialgesetzen.



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

Die für die Lösung partieller Differentialgleichungen auf unbeschränkten Gebieten notwendige Diskretisierung des unbeschränkten Außenraumes um ein beschränktes Rechengebiet stellt eine besondere Herausforderung an die Gittererzeugung dar. Ein Anwendungsgebiet findet sich bei der Lösung der Maxwellgleichungen für Fragestellungen in der integrierten Optik. Dabei kann im inhomogenen Fall eine Diskretisierung unter Nebenbedingungen notwendig sein.

Die beispielsweise für die Perfectly-Matched-Layer-Methode (PML) in inhomogenen Außenräumen nach [19] und für die Polbedingung nötige prismatoidale Zerlegung des Außenraumes unter Nebenbedingungen wurde bereits in [8] hergeleitet. Der dort im Rahmen des DFG-Forschungszentrums MATHEON in Kooperation mit dem Projekt F1 entwickelte Algorithmus, liefert in seiner in [8] vorgestellten Form Diskretisierungsstrahlen für die Eckpunkte des Rechengebietes. Um die nach [19] abgewandelte PML-Methode aber auf den Außenraum anwenden zu können, müssen solche Strahlen jedoch auch für die übrigen Punkte der Diskretisierung auf dem Rand des Rechengebietes konstruiert werden. Um diese Strahlen zu konstruieren, muss das Gitter auf dem Rand des Rechengebietes zusammen mit dem Rechengebiet „aufgeblasen“ werden, wobei die Topologie des Gitters auf dem Rand gleich bleiben muss. Das bedeutet eine Verzerrung des Gitters auf dem Rand unter Beibehaltung der Gittertopologie. Um diese Verzerrung zu realisieren, wird derzeit versucht, geeignete elastomechanische Probleme zu formulieren.

**Polbedingung: Außenraumauswertung** (Frank Schmidt, Roland Klose, Achim Schädle, Lin Zschiedrich; Kooperation: Thorsten Hohage, Universität Göttingen; Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt D9)

Im Teilprojekt „Polbedingung: Außenraumauswertung“ wurde eine neue numerische Methode zur Lösung von Streuproblemen des Helmholtztyps entwickelt, die es erstmals möglich macht, eine große Klasse von inhomogenen Außenräumen zu behandeln. Die Methode basiert auf der Polbedingung von F. Schmidt, die eine allgemeine Ausstrahlungsbedingung ist und die Lösung von Helmholtz-Außenraumproblemen ohne Kenntnis einer Greenschen Funktion oder einer Reihendarstellung erlaubt. In der Elektrodynamik spielt die Helmholtzgleichung auf unbeschränkten Gebieten eine wichtige Rolle, wobei eine Reihe von Anwendungen die Berücksichtigung eines inhomogenen Außenraums erfordern. In der integrierten Optik etwa verbinden typischerweise Wellenleiterstrukturen zahlreiche Komponenten über eine Distanz einer großen Anzahl von Wellenlängen. Die numerische Simulation solcher Probleme ist das Ziel dieses Projektes. In ersten Ergebnissen konnten die analytischen Resultate aus einer Diplomarbeit [13] numerisch verifiziert werden. Die Helmholtzgleichung kann mit dem entwickelten Verfahren sowohl bei bestimmten winkelabhängigen Brechzahlen als auch bei in radialer Richtung abfallender Brechzahl numerisch gelöst werden.

**Rekonstruktion von EUV-Maskenparametern** (JanPomplun, Frank Schmidt, Sven Burger; Kooperation: Frank Scholze, Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Berlin; Uwe Dersch, Advanced Mask Technology Center, Dresden; Förderung: JCMwave GmbH)

Extrem ultraviolette (EUV) Lithographie gilt als der Top-Kandidat für die zukünftigen Ziele auf der *Roadmap* der Halbleiterindustrie. Um immer kleinere Strukturen auf den Siliziumwafern herzustellen, muss Licht mit immer kürzerer Wellenlänge verwendet werden. Für EUV-Licht im Bereich von 13.5 nm sind dafür völlig neuartige Produktionsverfahren notwendig. Dabei kommen reflektierende EUV-Masken zum Einsatz, die die Strukturen für die produzierten Chips als Schablone tragen. Die Genauigkeitsanforderungen für die nanostrukturierten EUV-Masken sind aufgrund der kurzen Wellenlänge extrem. In Zusammenarbeit mit dem Advanced Mask Technology Center in Dresden (AMTC) und dem EUV-Radiometrie-Labor der Physikalisch Technischen Bundesanstalt (PTB) am Berliner Elektronensynchrotron (BESSY) soll ein Verfahren zur zerstörungsfreien Vermessung der Strukturen auf EUV-Masken entwickelt werden. Ziel ist es, aus experimentellen Streumessungen durch Simulation die Geometrie von Absorberprofilen zu rekonstruieren [14, 15]. Die Anwendbarkeit dieses indirekten Messverfahrens hängt wesentlich von einer genauen und schnellen Berechnung des Vorwärtsproblems, also der Simulation des Streuexperiments, ab. Mit unseren Finite-Elemente-Simulationen konnten wir Messergebnisse quantitativ sehr genau reproduzieren und erste Profile von EUV-Masken rekonstruieren [14, 15].

**Analytische Lösungen der Helmholtz- und Maxwellgleichung** (Therese Pollok, Frank Schmidt)

Im Rahmen einer Diplomarbeit wurde die Separabilität der Helmholtz- und Maxwellgleichung mit dem Ziel untersucht, inhomogene separable Probleme und damit nichttriviale analytische Modelllösungen für numerische Verfahren zu konstruieren.

Bestehende Untersuchungen, welche sich im Wesentlichen auf homogene Probleme konzentrieren, wurden entsprechend verallgemeinert und um allgemeine Separationsbedingungen für den inhomogenen Fall erweitert. Diese liefern zu jedem gegebenen Koordinatensystem sämtliche Potentiale, für die die Gleichungen separabel sind. In der Anwendung noch interessanter ist andersherum die Konstruktion separabler Koordinatensysteme zu gegebenen Inhomogenitäten. In 2D sind wir nun für eine gewisse Klasse solcher Inhomogenitäten in der Lage, die Gesamtheit derartiger Koordinatensysteme mittels Lösung gewöhnlicher Differentialgleichungen zu bestimmen. Eine weitere Verallgemeinerung gegenüber bisherigen Untersuchungen besteht in der Betrachtung der Separation nur einzelner Variablen in 3D.

**Transparente Randbedingungen für Evolutionsgleichungen** (Achim Schädle, Frank Schmidt; Kooperation: Daniel Ruprecht, Rupert Klein, PIK Potsdam)

Für die Schrödingergleichung, die gedämpfte Wellengleichung und die Drift-Diffusionsgleichung in einer Raumdimension wurden auf der Polbedingung basierende transparente Randbedingungen entwickelt und implementiert. Durch eine neuartige Herleitung, die auf einer globalen variationellen Formulierung beruht, steht ein Rahmen zur Verfügung, in den auch finite Elemente höherer Ordnung passen und der die Erweiterung auf zwei- und dreidimensionale Gebiete ermöglicht. Die Randbedingung führte hierbei in den numerischen Experimenten nicht zu einer Ordnungsreduktion.

**Simulation von Metamaterialien** (Sven Burger, Benjamin Kettner, Achim Schädle, Frank Schmidt; Kooperation: Martin Wegner, Stefan Linden, Christian Enkrich, Gunnar Dolling, DFG-Forschungszentrum für funktionelle Nanostrukturen, Karlsruhe; Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekte D15, D9)

Metamaterialien sind nanostrukturierte Materialien, deren Strukturgröße kleiner als die Wellenlänge ist. Diese Materialien können für bestimmte Wellenlängen einen negativen Brechungsindex besitzen – eine Eigenschaft, die in der Natur nicht auftritt. In Zusammenarbeit mit unseren experimentellen Kooperationspartnern wurden verschiedene Designs für Metamaterialien für den optischen Spektralbereich mit Hilfe von Simulationen untersucht. Im direkten Vergleich mit experimentellen Ergebnissen ergab sich jeweils eine sehr gute Übereinstimmung [6, 9]. Die Resultate wurden genutzt, um die experimentellen Ergebnisse zu interpretieren und das Design der Metamaterialien zu optimieren. Insbesondere wurden Lösungen zum Streuproblem der Maxwell'schen Gleichungen für komplexe 3D-Geometrien berechnet. Abgesehen von Transmissions- und Reflexionskoeffizienten sind hierbei auch Phaseninformationen der gestreuten ebenen Welle von Interesse. Durch die Überlagerung von mehreren ebenen Wellen um einen zentralen Einfallswinkel kann hiermit die Verschiebung eines lokalisierten Wellenpaketes berechnet werden.

### Publikationen

- [1] S. Burger, R. Klose, A. Schädle, F. Schmidt, and L. Zschiedrich, *Adaptive FEM solver for the computation of electromagnetic eigenmodes in 3D photonic crystal structures*, Scientific Computing in Electrical Engineering (A. M. Anile, G. Ali, and G. Mascali, eds.), Springer Verlag, 2006, pp. 169–175.
- [2] S. Burger, A. Schädle, L. Zschiedrich, and F. Schmidt, *Advanced FEM analysis of nano-optical devices*, Nanophotonics (D. L. Andrews, J.-M. Nunzi, and A. Ostendorf, eds.), vol. 6195, Proc. SPIE, 2006, pp. 72–82.
- [3] S. Burger, L. Zschiedrich, A. Schädle, R. Klose, B. Kettner, J. Pomplun, T. Pollok, and F. Schmidt, *Advanced FEM analysis of nano-optical devices*, Proc. Symposium on Photonics Technologies for the 7<sup>th</sup> Framework Programme, 2006.
- [4] 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.
- [5] S. Burger, R. Köhle, L. Zschiedrich, H. Nguyen, F. Schmidt, R. März, and C. Nölscher, *Rigorous simulation of 3D masks*, Photomask Technology (P. M. Martin and R. J. Naber, eds.), vol. 6349, Proc. SPIE, 2006, p. 63494Z.
- [6] G. Dolling, M. Wegener, A. Schädle, S. Burger, and S. Linden, *Observation of magnetization waves in negative-index photonic metamaterials*, Appl. Phys. Lett. (2006), 231118.
- [7] R. Holzlöhner, S. Burger, P. J. Roberts, and J. Pomplun, *Efficient optimization of hollow-core photonic crystal fiber design using the finite-element method*, J. Europ. Opt. Soc: Rap. Comm. **1** (2006), 06011.

- [8] B. Kettner, *Ein Algorithmus zur prismatoidalen Diskretisierung von unbeschränkten Außenräumen in 2D und 3D unter Einhaltung von Nebenbedingungen*, Diploma thesis, Freie Universität Berlin, 2006.
- [9] S. Linden, C. Enkrich, G. Dolling, M. W. Klein, J. Zhou, T. Koschny, C. M. Soukoulis, S. Burger, F. Schmidt, and M. Wegener, *Photonic metamaterials: Magnetism at optical frequencies*, IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics **12** (2006), 1097–1105.
- [10] M. López-Fernández, Ch. Lubich, and A. Schädle, *Adaptive, fast and oblivious convolution in evolution equations with memory*, Report 06-45, ZIB, 2006.
- [11] M. López-Fernández, C. Palencia, and A. Schädle, *A spectral order method for inverting sectorial laplace transforms*, SIAM J. Numer. Anal. **44** (2006), no. 3, 1332–1350.
- [12] D. Michaelis, C. Wächter, S. Burger, L. Zschiedrich, and A. Bräuer, *Micro-optically assisted high index waveguide coupling*, Appl. Opt. **45** (2006), 1831–1838.
- [13] T. Pollok, *Separabilität von Helmholtz- und Maxwellgleichungen über unbeschränkten Außenräumen*, Diplomarbeit, Freie Universität Berlin, 2007
- [14] J. Pomplun, *Rigorous FEM Simulation of Maxwell's Equations for EUV-Lithography*, Diploma thesis, Technische Universität Berlin, 2006.
- [15] J. Pomplun, S. Burger, F. Schmidt, L. Zschiedrich, and F. Scholze, *Rigorous FEM-simulation of EUV-masks: Influence of shape and material parameters*, Photomask Technology (P. M. Martin and R. J. Naber, eds.), vol. 6349, Proc. SPIE, 2006, p. 63493D.
- [16] A. Schädle, M. López-Fernández, and Ch. Lubich, *Fast and oblivious convolution quadrature*, SIAM J. Sci. Comput. **28** (2006), no. 2, 421–438.
- [17] A. Schädle, L. Zschiedrich, S. Burger, R. Klose, and F. Schmidt, *Domain decomposition method for Maxwells equations: Scattering off periodic structures*, Report 06-04, ZIB, 2006.
- [18] L. Zschiedrich, S. Burger, B. Kettner, and F. Schmidt, *Advanced finite element method for nano-resonators*, Physics and Simulation of Optoelectronic Devices XIV (M. Osinski, F. Henneberger, and Y. Arakawa, eds.), vol. 6115, Proc. SPIE, 2006, pp. 164–174.
- [19] L. Zschiedrich, R. Klose, A. Schädle, and F. Schmidt, *A new finite element realization of the Perfectly Matched Layer Method for Helmholtz scattering problems on polygonal domains in 2D*, J. Comput. Appl. Math. **188** (2006), 12–32.

### 2.2.2 Moleküldesign

In diesem Schwerpunkt wurde zunächst im Rahmen einer Masterarbeit ein Vergleich der intern entwickelten Samplingalgorithmen mit einem Standardverfahren abgeschlossen. Aufgrund der Ergebnisse wurde nach Ablauf der BMBF-Förderung für das „Berliner Centrum für Genombasierte Bioinformatik“ im Juni 2006 verstärkt an einer Weiterentwicklung des mathematischen Unterbaus der Konformationsdynamik gearbeitet. Zum einen wurde die Stabilität

der Samplingalgorithmen auf Basis der im Vorjahr entwickelten ConfJump-Methode verbessert. Zum anderen wurde die Modellreduktion der simulierten Markov-Operatoren mit Hilfe der bereits ausgereiften Robusten Perron Cluster Analyse in ein geschlossenes mathematisches Konzept gebracht. Im Bereich des virtuellen Moleküllabors wurde mit zwei Dissertationsvorhaben begonnen, die einen erfolgreichen Abschluss der Visualisierung von biomolekularen Konformationen und des Vergleichs von molekularen Oberflächen darstellen. Unter den weiteren Aktivitäten ist besonders eine Weiterführung der Modellbildung im Bereich der Endokrinologie und der erste vollständig computer-basierte Entwurf eines Wirkstoffs für Diabetes-II-Patienten zu erwähnen.

### Stabile Berechnung stationärer Dichte

**Bearbeitet von:** Peter Deuffhard, Marcus Weber, Susanna Kube, Lionel Walter (bis 30.06.2006)

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

**Förderung:** DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt A4

Falls die invariante stationäre Dichte eines metastabilen dynamischen Systems in fast-invariante Teildichten zerfällt, ist ihre Berechnung als Eigenvektor einer stochastischen Übergangsmatrix schlecht konditioniert. Um diese Schwierigkeit bei der Berechnung zu umgehen, haben wir eine Aggregations/Disaggregations-Methode entwickelt, in der nur gut-konditionierte Teilprobleme behandelt werden und die somit zu einem stabilen Algorithmus führt, siehe Abb. 2.4.

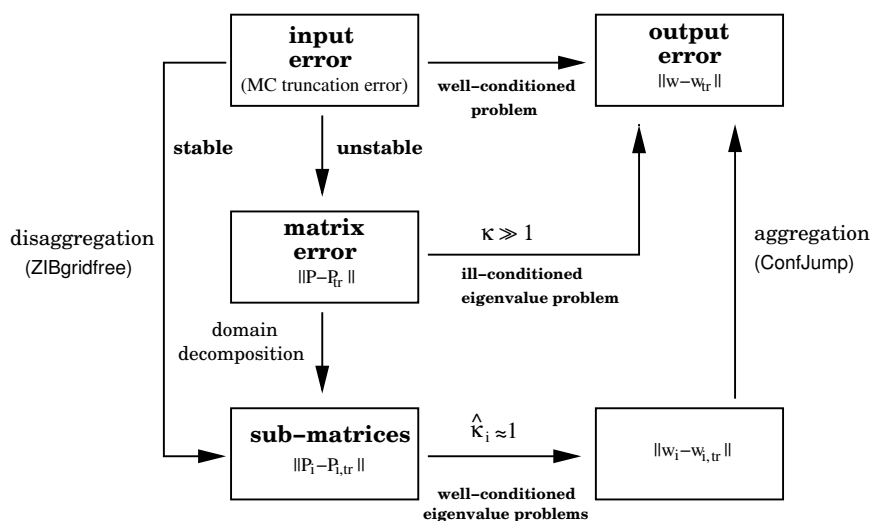


ABBILDUNG 2.4: Stabilitäts-Diagramm entsprechend dem Aggregations-Disaggregations-Algorithmus zur Berechnung stationärer Dichten.

Der Disaggregations-Schritt beinhaltet die Diskretisierung des Abtast-Raumes durch Basis-Funktionen  $\{\Phi_i\}$  sowie die Berechnung der auf die einzelnen Konformationen restringierten stationären Teildichten. Da Übergänge zwischen verschiedenen Konformationen beim Abtasten selten vorkommen und die daraus ermittelten Übergangswahrscheinlichkeiten stark fehlerbehaftet sind, können die statistischen Gewichte der Konformationen nicht korrekt

bestimmt werden. In unserer Arbeit [10] haben wir explizit auf den Zusammenhang zwischen den Eigenschaften des Markov-Prozesses und der resultierenden Übergangsmatrix hingewiesen. Daraus entwickelte sich die Notwendigkeit eines alternativen Aggregations-Schrittes. Im Gegensatz zu existierenden Methoden basiert der Aggregations-Schritt auf einem Abtast-Algorithmus, der nur kleine Ausschnitte des gesamten Abtast-Raumes umfasst, siehe Abb. 2.5. Bei diesem Abtast-Algorithmus handelt es sich um eine Spezialisierung des im Vorjahr entwickelten Algorithmus ConfJump [8]. Die Anwendung von ConfJump auf einzelne repräsentative Basisfunktionen je Konformation gestattet es, die statistischen Gewichte durch ein nachgeschaltetes Abtasten zu korrigieren.

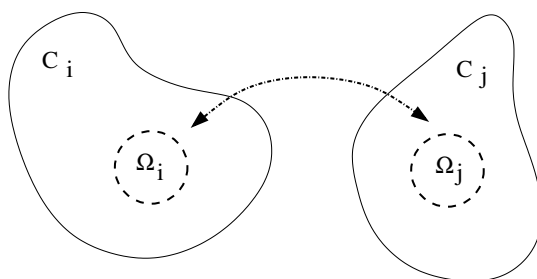


ABBILDUNG 2.5: Anwendung von Confjump auf ausgewählte „Teilgebiete“  $\Omega_i, \Omega_j$  von Konformationen  $C_i, C_j$ .

### Modellreduktion für metastabile Markov-Ketten

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

**Förderung:** DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt A4

Die im Vorjahr begonnene Arbeit zur Modellreduktion metastabiler Markov-Ketten wurde weitergeführt. Während es in früheren Arbeiten darum ging, eine niedrig-dimensionale Markov-Kette im Raum der Konformationen zu finden, die die Dynamik eines Moleküles qualitativ richtig widerspiegelt, lag der Schwerpunkt nun auf einer korrekten quantitativen Beschreibung. Da das Langzeitverhalten des Systems im Wesentlichen von den dominanten Eigenvektoren der Übergangsmatrix abhängt, wurde eine Dimensionsreduzierung des Modells auf Basis der Robusten-Perron-Cluster-Analyse hergeleitet [4, 3, 5]. Die daraus resultierende niedrig-dimensionale Matrix ist zwar kein Markov-Operator, beschreibt aber die Propagation von Wahrscheinlichkeitsdichten im Konformationsraum quantitativ richtig, siehe Abb. 2.6. Bei ausreichender Metastabilität ist der reduzierte Prozess jedoch fast markovsch, so dass man dynamische Eigenschaften der Konformationen, wie z. B. Verweilzeiten, ableiten kann. Genauere Untersuchungen dazu dauern noch an.

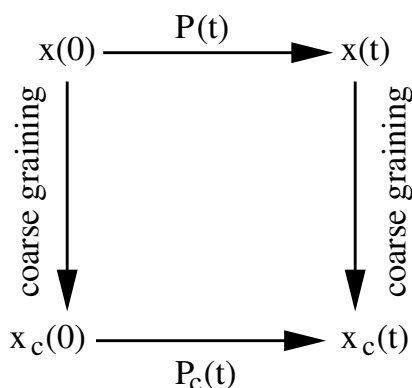


ABBILDUNG 2.6: Reduktions-Schema für Übergangswahrscheinlichkeiten. Anstatt eine Anfangsdichte  $x(0)$  in einem hoch-dimensionalen Raum mittels eines Operators  $P(t)$  zu propagieren und das Ergebnis  $x(t)$  auf die groben Variablen zu reduzieren, wird ein Operator  $P_c(t)$  konstruiert, der direkt in dem groben Raum auf eine reduzierte Anfangs-Dichte  $x_c(0)$  angewendet wird.

### Virtuelles Moleküllabor

**Bearbeitet von:** Hans-Christian Hege, Daniel Baum, Johannes Schmidt-Ehrenberg, Timm Baumeister, Peter Deuffhard

**Kooperationspartner:** AG Christof Schütte, FU Berlin, (Fachbereich Mathematik und Informatik), AG Sandor Vajda, Boston University (Department of Biomedical Engineering), Mercury Computer Systems, Berlin

**Förderung:** Nachwuchsgruppe im BMBF-Verbundvorhaben Berliner Centrum für Genom-basierte Bioinformatik (BCB) „Konformationsdatenbanken für das Virtuelle Screening“ bis Juni 2006; Microsoft Research, Cambridge, Vereinigtes Königreich

**Überlagerung molekularer Oberflächen.** Im Vorjahreszeitraum wurde eine Methode zur Überlagerung molekularer Oberflächen entwickelt, die auf der Approximation der Oberfläche durch Punkte beruht. Dazu wurden auf der *Solvent excluded surface* (SES) eines jeden Moleküls zunächst Punkte in regelmäßigen Abständen verteilt, die dann zur Oberflächenüberlagerung unter Anwendung eines Point-Matching Algorithmus genutzt wurden.

Dieser Ansatz zur Überlagerung molekularer Oberflächen unterlag zwei Beschränkungen. Zum einen war die initiale Punkteverteilung nur für die SES möglich, was die Verwendung des Algorithmus unnötigerweise auf diese Art von Oberfläche begrenzte. Zum anderen konnten nur homogene Punkteverteilungen erzeugt werden, wobei die Repräsentation beliebiger molekularer Eigenschaften auf der Oberfläche, z. B. des elektrostatischen Potentials, auch nicht-homogene Punkteverteilungen erfordert. Beide Beschränkungen konnten im Berichtszeitraum aufgehoben werden [1], so dass nun beliebige skalare Eigenschaften auf beliebigen glatten Oberflächen, wie z. B. Isoflächen von Konfigurationsdichten, durch Punkte approximiert werden können (vgl. Abbildung 2.7). Insbesondere erlaubt die verbesserte Punkteverteilung, molekulare Eigenschaften besser zu repräsentieren und damit Überlagerungen zu berechnen, die eine Identifizierung der wirkungsrelevanten strukturellen und physiko-chemischen Eigenschaften von Wirkstoffen ermöglichen.

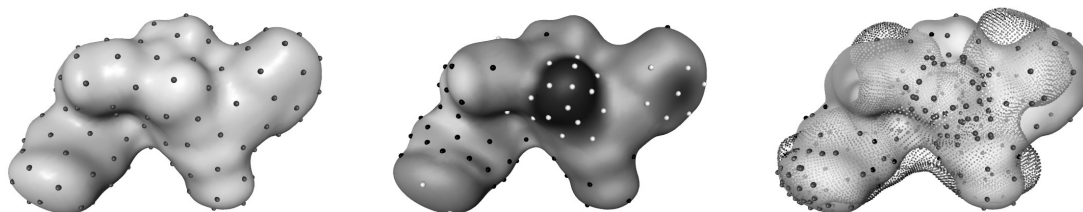


ABBILDUNG 2.7: Links: Repräsentation der Isofläche einer Konfigurationsdichte des HIV-1-Protease-Inhibitors Tipranavir durch homogen verteilte Punkte. Mitte: Nicht-homogene Punkteverteilung zur Repräsentation des elektrostatischen Potentials (helle Kugeln – elektronegativ, dunkle Kugeln – elektropositiv). Rechts: Überlagerung der Isoflächen zweier Konfigurationsdichten von Tipranavir und Amprenavir. Die Isofläche von Tipranavir ist transparent dargestellt, die von Amprenavir durch kleine Punkte. Die Kugeln repräsentieren die zugeordneten Oberflächenpunkte, wobei neben Form und Elektrostatik auch Wasserstoffbrückenbindungsstellen berücksichtigt wurden.

**Hierarchische Alignierung molekularer Zustandsdichten** Existierende Verfahren zur Alignierung molekularer Zustandsdichten setzen implizit voraus, dass alle Geometrien näherungsweise dieselbe Form haben. Für Dichten, die mehrere metastabile Konformationen enthalten, gilt dies aber nur für Geometrien, die zu derselben Konformation gehören. Im Vorjahr wurde daher ein neues Konzept zur Alignierung von flexiblen Molekülstrukturen entwickelt. Dabei wird weiterhin die Varianz der Atompositionen minimiert, aber gleichzeitig werden geometrische Übereinstimmungen und Unterschiede der metastabilen Konformationen eines Moleküls berücksichtigt.

Die Optimierung der diesem Konzept zugrundeliegenden Zielfunktion wurde im Berichtszeitraum auf die Alignierung von Punktmengen mit fehlenden Daten zurückgeführt. Auf diesem Wege ergab sich ein iterativer Algorithmus, der formal analog zur Alignierung von Zustandsdichten mit nur einer metastabilen Konformation ist. Insbesondere müssen nur die Rotationen der einzelnen Zeitschritte in einem iterativen Verfahren optimiert werden. Die Translationen werden danach direkt berechnet.

**Visualisierung dominanter Freiheitsgrade metastabiler Konformationen** In Zusammenarbeit mit der AG Schütte wurde ein Verfahren zur mengenorientierten Dimensionsreduktion entwickelt [2]. Es verbindet die Anpassung eines metastabilen Hidden-Markov-Modells an eine molekulardynamische Zeitreihe mit einer gleichzeitigen Hauptmodenanalyse der einzelnen Markovzustände. Das Ergebnis beschreibt die metastabilen Konformationen des untersuchten Moleküls durch Normalverteilungen auf niedrigdimensionalen Unterräumen des originalen Datenraumes.

Die Hauptmoden der Normalverteilungen geben im ursprünglichen Datenraum die Richtungen an, in denen die jeweilige Konformation die höchste Varianz aufweist. Die Unterräume werden also von essentiellen Freiheitsgraden der jeweiligen Konformation aufgespannt, die den Großteil der konformationsinternen Dynamik beschreiben. Zur Visualisierung dieser Moden wurde eine Darstellung der mittleren Molekülform einer Konformation mit Pfeilen kombiniert, die die Bewegung einzelner Atome bei Variation der dargestellten Mode nachzeichnen (vgl. Abbildung 2.8).



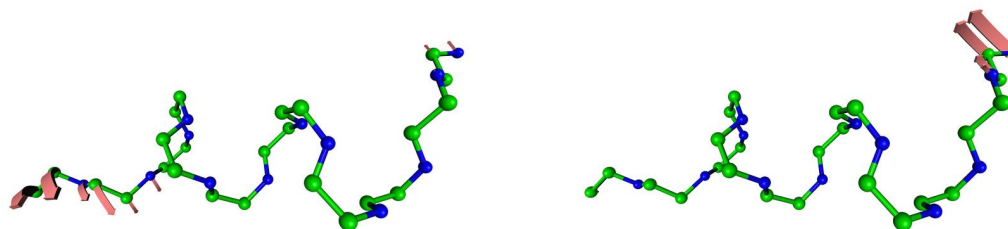


ABBILDUNG 2.8: Die zwei varianzstärksten Moden einer metastabilen Konformation von 12-Alanin. Dargestellt sind jeweils das Protein-Rückgrat als Balls-and-Sticks-Modell und die Bewegung der einzelnen Atome bei Variation der Mode durch Pfeile.

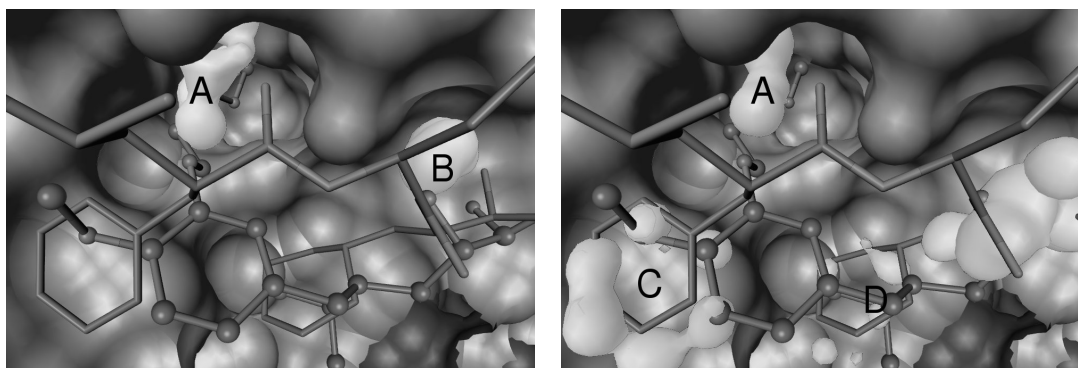


ABBILDUNG 2.9: Isoflächen von Fragmentdichten für die Bindungstasche von Renin mit den Inhibitoren Aliskerin (Atome und Bindungen) und Peptiomimetik (nur Bindungen). Die Dichten sind aufgeschlüsselt nach polaren (links) und apolaren Gruppen (rechts). Die für alle Peptidomimetik-Inhibitoren typische polare Wasserstoffsbindungsstelle (B) und die apolaren Bindungsstellen (C und D) werden bestätigt. Die Dichten in der Aliskerin-spezifischen Bindungstasche (A) legen eine Addition von polaren Gruppen nahe.

**Fragment Mapping** In Kooperation mit der Boston University wurden Methoden zur Auswertung von Fragment-Mapping-Daten entwickelt. Fragment Mapping ist das Docking einer Datenbank von kleinen Molekülen mit nur wenigen funktionellen Gruppen zur Identifikation wichtiger Interaktionspunkte eines Proteins. Zur Darstellung der Daten werden Zustandsdichten verwendet [7] (siehe Abbildung 2.9). Die stabile Berechnung solcher Dichten war Teil der Forschungsarbeit im Berichtszeitraum [10]. Das Ziel der visuellen Auswertung von Fragment-Mapping-Daten ist die Konstruktion und Verfeinerung von Wirkstoffmolekülen aus den Dichten mittels einer durch den Benutzer geleiteten Automatisierung. Hierzu wurde eine Basis von Bioinformatik-Algorithmen implementiert, die die Konkatenierung von Fragmenten ermöglichen.

## Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

**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)

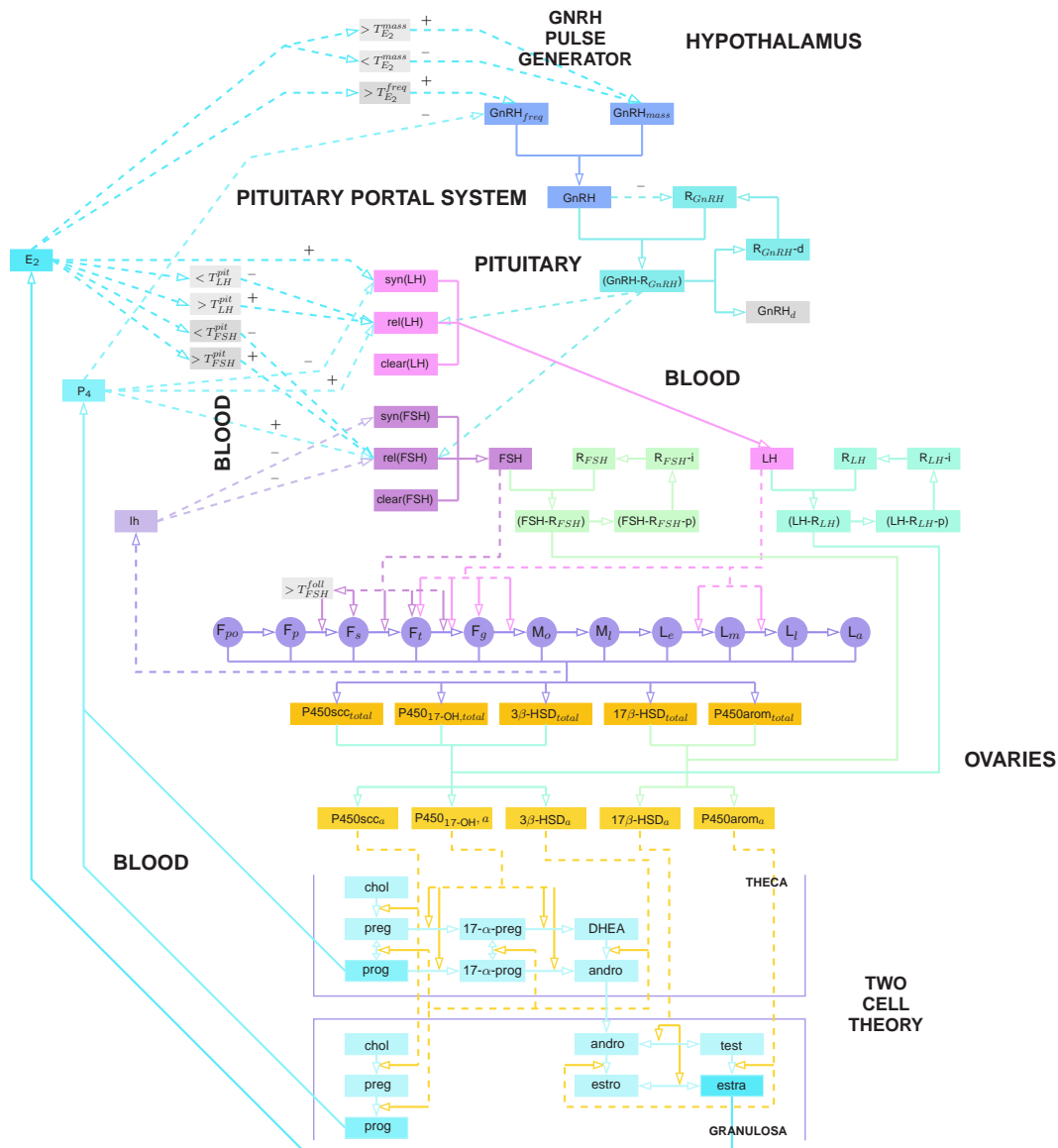


ABBILDUNG 2.10: Schema des komplexen Modells für den weiblichen Hormonzyklus

Der weibliche Hormonzyklus hat bislang nur eine relativ kleine Rolle in der mathematischen Modellierung gespielt. Daher wurde ein komplexes Modell am ZIB entwickelt, das im letzten Jahr um weitere Komponenten erweitert worden ist (siehe Abbildung 2.10).

Die wesentlichen Vorgänge auf den drei Ebenen Hypothalamus, Hypophyse und Ovarien sowie die Interaktionen dieser drei Kompartimente wurden betrachtet. Sowohl die Vorgänge in den Ovarien – wie die Dynamik der Enzyme, die bei der Steroidogenese eine Rolle spielen –, als auch die Biosynthese der Steroide an sich, sind ausführlicher modelliert worden. Zur Zeit liegen 43 Delaydifferentialgleichungen für die Dynamik von Hormonen, Rezeptoren, Enzymen und Follikelmassen vor [11].

Ein wichtiger Bestandteil dieses Regelkreises ist der GnRH-Pulsgenerator. Das Hormon GnRH wird nicht kontinuierlich sondern in Pulsen aus dem Hypothalamus freigesetzt. Dahinter steht ein Mechanismus, der GnRH-Pulsgenerator, dessen Neuronen-Netzwerk durch die Steroide Estradiol und Progesteron via Feedback reguliert wird. Die Pulszeitpunkte werden in diesem Modell durch einen stochastischen Prozess modelliert. Zwischen den Pulszeitpunkten sammelt sich GnRH an, das dann zum nächsten Pulszeitpunkt ins hypophysäre Blut freigesetzt wird.

Die Parameterschätzung ist für ein Teilmodell bereits erfolgt, und erste Anwendungen wie die Simulation eines einfachen Pillenmodells sind nun möglich.

### **Vergleich von Simulationsmethoden** (Alexander Riemer, Marcus Weber)

Beim Abtasten des Konformationsraums großer molekularer Systeme mit thermodynamisch rigorosen Methoden kommt es aufgrund stark zerklüfteter hochdimensionaler Energielandschaften zu Trapping-Effekten, die die Konvergenz des Samplings verlangsamen.

Im Rahmen einer Masterarbeit [6] wurden drei Verfahren zum Beschleunigen der Konvergenz hinsichtlich ihrer Genauigkeit und ihres Rechenaufwandes verglichen. Es handelt sich dabei um die am ZIB entwickelten Methoden ConfJump [8] und ZIBgridfree [9] sowie die Replica-Exchange-Strategie. Die Verfahren beruhen alle auf dem HMC-Ansatz, verfolgen aber unterschiedliche Strategien, um Trapping-Effekten zu entgehen.

Zum Vergleich der Konvergenzgeschwindigkeit wurde ein neuer allgemein anwendbarer Konvergenzschätzer entwickelt. Um die Ergebnisse verschiedener Methoden vergleichen zu können, wurde ein Distanzmaß auf Punktwolken eingeführt.

In einer Reihe von Computersimulationen stellte sich heraus, dass ein Samplingverfahren generell stabiler ist, je weniger Informationen es über hochenergetische Übergangsregionen benötigt. ConfJump ist dabei die schnellste und stabilste Methode. Für große Systeme ist eine Kombination aus ZIBgridfree und ConfJump als die erfolgversprechendste Methode zu sehen. Es scheint bei hochdimensionalen, stark zerklüfteten Potentiallandschaften unausweichlich, eine Partitionierung des Konformationsraums vorzunehmen und Teilräume unabhängig voneinander abzutasten, wie es in [10] beschrieben wurde.

### **Computergestützte Modellierung eines Inhibitors der Dipeptidyl-Peptidase IV zur Verwendung in der Therapie von Diabetes Typ II** (Alexander Bujotzek, Marcus Weber, Frank Cordes; Kooperation: Hua Fan, Charité, Campus Benjamin Franklin)

Das Enzym Dipeptidyl-Peptidase IV (DPP-IV) steht seit seiner funktionellen Charakterisierung in den neunziger Jahren im Fokus der Entwicklung neuartiger Diabetes-Therapeutika, da ihm eine Schlüsselrolle in der Aufrechterhaltung eines ausgeglichenen Blutzuckerspiegels zufällt.

Bei Diabetes-Patienten kann eine Hemmung von DPP-IV dazu beitragen, die Regulierung und Normalisierung des Blutzuckerspiegels einzuleiten, noch bevor die Glukose nach einer Nahrungsaufnahme ins Blut gelangt. Gefährliche Schwankungen im Blutzuckerspiegel werden so vermieden, und die allgemeine Glukose-Toleranz nähert sich der von gesunden Menschen an.

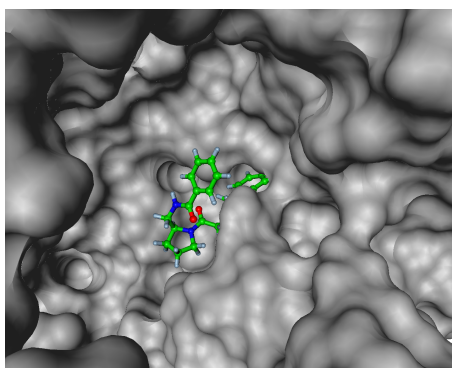


ABBILDUNG 2.11: Bindungstasche von Dipeptidylpeptidase-IV mit einem gedockten Inhibitorokandidaten.

Seitdem im Jahre 2003 die Struktur von DPP-IV aufgeklärt werden konnte, wurde eine Vielzahl von experimentellen Wirkstoffen veröffentlicht, die potentielle DPP-IV-Inhibitoren darstellen könnten. Im Berichtszeitraum wurde eine größere Serie dieser experimentellen Inhibitoren in Docking-Experimenten erprobt, und ihre Affinität zum Zielprotein DPP-IV durch Simulationen quantifiziert, siehe Abbildung 2.11. Aufgrund der gewonnenen Erkenntnisse wurde dann, unter Berücksichtigung der Topologie der Bindungstasche von DPP-IV, ein neues Wirkstoffmolekül vorgeschlagen, welches wiederum im Computerexperimenten erprobt wurde. Anhand einer Maximierung der Interaktionen von Wirkstoffmolekül und Bindungstasche soll eine gute Wirksamkeit und Spezifität gewährleistet werden. Die erstmalige Synthese des potentiellen Inhibitors sowie seine Erprobung im Labor wird bald im Rahmen der Kooperation erfolgen.

### Publikationen

- [1] D. Baum and H.-C. Hege, *A point-matching based algorithm for 3D surface alignment of drug-sized molecules*, Computational Life Sciences II, Second International Symposium, CompLife 2006, Cambridge (UK), Sept. 2006 (M.R. Berthold, R. Glen, and I. Fischer, eds.), Lecture Notes in Bioinformatics, vol. 4216, Springer, 2006, pp. 183–193.
- [2] I. Horenko, J. Schmidt-Ehrenberg, and Ch. Schütte, *Set-oriented dimension reduction: Localizing principal component analysis via hidden Markov models*, Computational Life Sciences II: Second International Symposium CompLife 2006, Cambridge (UK), Sept. 2006 (M.R. Berthold, R. Glen, and I. Fischer, eds.), Lecture Notes in Bioinformatics, vol. 4216, Springer, 2006, pp. 98–115.
- [3] S. Kube and M. Weber, *Coarse grained molecular kinetics*, Report 06-35, ZIB, 2006.

- [4] S. Kube and M. Weber, *Identification of metastabilities in monomolecular conformation kinetics*, Report 06-01, ZIB, 2006.
- [5] S. Kube and M. Weber, *A coarse graining method for the identification of transition rates between molecular conformations*, J. Chem. Phys. **126** (2007), no. 2.
- [6] A. Riemer, *Accuracy, stability, convergence of rigorous thermodynamic sampling methods*, Master's thesis, Freie Universität Berlin, 2006.
- [7] J. Schmidt-Ehrenberg, D. Baum, and H.-C. Hege, *Visualizing dynamic molecular conformations.*, IEEE Visualization, 2002.
- [8] L. Walter and M. Weber, *Confjump: a fast biomolecular sampling method which drills tunnels through high mountains*, Report 06-26, ZIB, 2006.
- [9] M. Weber, *Meshless methods in conformation dynamics*, Doctoral thesis, Department of Mathematics and Computer Science, Freie Universität Berlin, 2006, published by Verlag Dr. Hut, München.
- [10] M. Weber, S. Kube, L. Walter, and P. Deuffhard, *Stable computation of probability densities for metastable dynamical systems*, Report 06-39, ZIB, 2006, accepted for publication.
- [11] I. Reinecke and P. Deuffhard, *A complex mathematical model of the human menstrual cycle*, Report 06-18, ZIB, 2006, accepted for publication.

### 2.2.3 Medizinische Therapie- und Operationsplanung

Auch in diesem Berichtszeitraum stellte die medizinische Therapieplanung wieder einen wichtigen Schwerpunkt der Aktivitäten des Bereiches *Numerische Methoden* am ZIB dar. Die Arbeitsgruppen *Computational Medicine* und *Medical Planning* arbeiteten dabei eng zusammen. Aufgrund diverser eingeworbener Drittmittel konnte die AG *Medical Planning* auf insgesamt neun Mitarbeiter vergrößert werden (ein Post-Doktorand, drei Doktoranden und fünf studentische Mitarbeiter). Der bisherige Schwerpunkt der Kopfchirurgie wurde dabei unter anderem um Fragestellungen der orthopädischen Chirurgie und der Kardiophysiologie erweitert. Insgesamt ergeben sich aus der Kombination der Themen wertvolle Synergieeffekte und somit ein Portfolio, mit dem das ZIB als kompetenter Partner für interdisziplinäre Projekte mit Medizinbezug auftreten kann.

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

**Bearbeitet von:** Stefan Zachow, Peter Deuffhard, Martin Weiser, Hans Lamecker, Britta Weber, Kai Pöthkow, Michael Zilske

**Kooperationspartner:** Anders Westermarck, Klinik für Mund-, Kiefer-, Gesichtschirurgie, Karolinska Hospital Stockholm, Schweden; Risto Kontio, Klinik für Mund-, Kiefer-, Gesichtschirurgie, Universitätsklinik Helsinki, Finnland; Alexander Schramm und Nils-Claudius Gellrich, Klinik und Poliklinik für Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie, Medizinische Hochschule Hannover

Die Verfahren zur Planung chirurgischer Knochensegmentverlagerungen an dreidimensionalen Patientenmodellen – unter Berücksichtigung der funktionellen und ästhetischen Rehabilitati-

on [20, 4] – wurden im Berichtszeitraum mit kooperierenden Chirurgen für komplexe klinische Fälle genutzt (Abb. 2.12). Im Rahmen der praktischen Anwendung ergaben sich dabei überwiegend technische Anforderungen an die Weiterentwicklung des Planungssystems. So wurden Segmentierungswerkzeuge verbessert und Verfahren zur optimierten Oberflächenvernetzung entwickelt, mit denen die Erstellung geometrischer Modelle patientenspezifischer Anatomien vereinfacht und die Planung beschleunigt werden konnte (siehe Abschnitt 2.2.3).

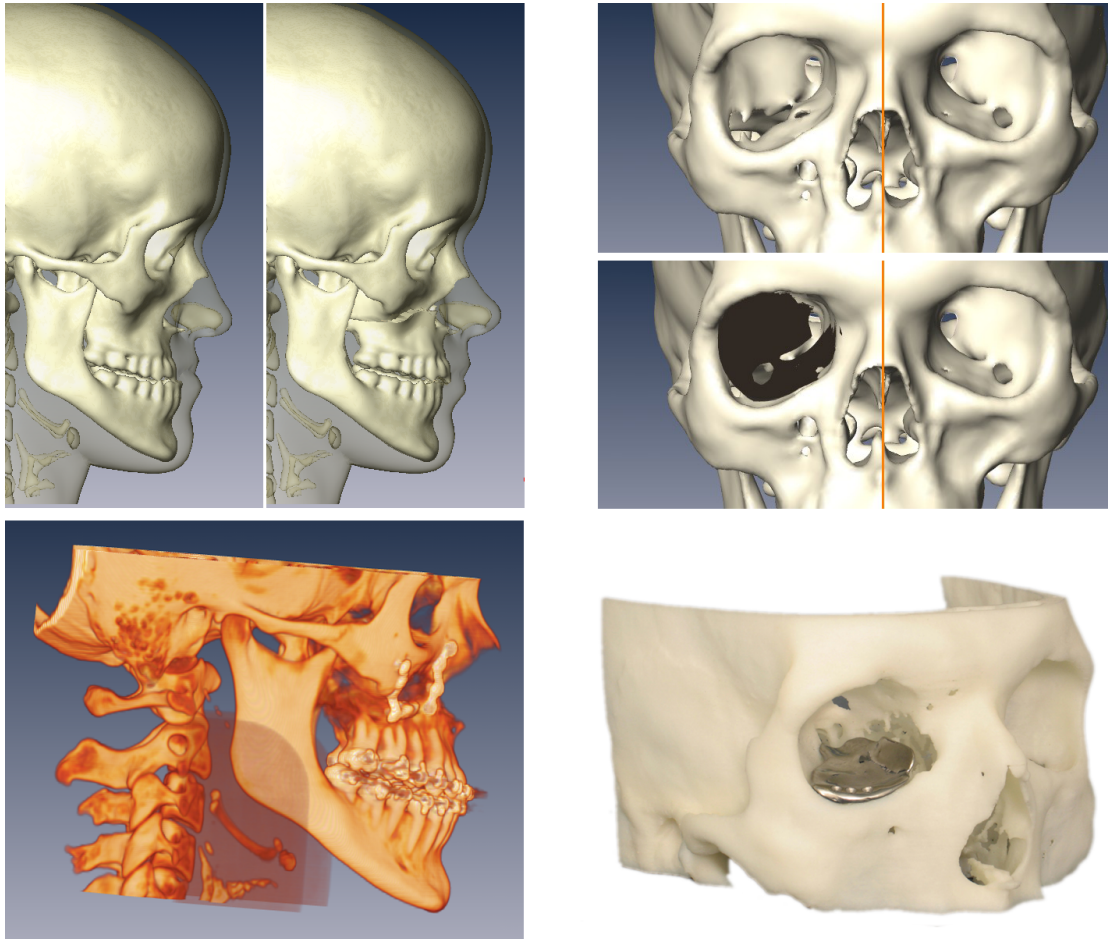


ABBILDUNG 2.12: Links: Planung mit A. Westermark, Rechts: Planung mit R. Kontio

Zur *interaktiven* Knochenschnitt- und -umstellungsplanung mit *gleichzeitig* dargestellter Weichgewebeerlagerung wurden Deformationsmodelle auf Basis von expliziten Integrationsverfahren implementiert und analysiert (Abschnitt 2.2.3). Ziel ist es, diese Verfahren durch Nutzung von Spezialprozessoren auch für sehr komplexe Geometrien einsetzbar zu machen.

Die Nutzung statistischer 3D-Formmodelle von anatomischen Strukturen des Kopfes (Augenhöhle, Unterkiefer, Neurokranium etc.) erweist sich bei komplizierten Fragestellungen der chirurgischen Rekonstruktion als sehr hilfreich (vergl. Abschnitt 2.2.3, Seite 46 und 48) [10, 21]. Mit Unterstützung der Medizinischen Hochschule Hannover wird daher die Entwicklung eines statistischen Formmodells des gesamten menschlichen Schädels aus einer umfangreichen CT-Sammlung vorangetrieben. Unter Kenntnis einer normal ausgeprägten Anatomie, die partiell an individuelle Gegebenheiten eines Patienten angepasst werden kann, lassen sich

Rekonstruktionsvorschläge generieren, die eine wichtige Grundlage für die präoperative Planung und das Implantatdesign darstellen.

### Computergestützte 3D-Therapieplanung für die Rhinochirurgie

**Bearbeitet von:** Stefan Zachow, Michael Zilske, Kai Pöthkow, 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 Behinderung der Nasenatmung, 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, wobei sich die operativen und medikamentösen Behandlungsmöglichkeiten in den letzten Jahren und Jahrzehnten stark verbessert haben. Unverändert schwierig ist es aber, die komplexen Funktionsstörungen der Nase präzise einzuschätzen und Vorhersagen über die Erfolgsaussichten operativer Behandlungsmethoden zu treffen. Die Fortschritte bei der numerischen Strömungssimulation erlauben es, unter Verwendung eines individualisierten geometrischen Modells des oberen Atemtraktes, die Atemströmung örtlich und zeitlich hochaufgelöst zu berechnen. Ziel der Untersuchung ist es, komplexe Strömungsphänomene geeignet darzustellen, in Abhängigkeit von geometrischen Gegebenheiten zu analysieren und zu vergleichen, um pathologische Auffälligkeiten schnell erfassen und Therapiekonzepte entwickeln zu können [22, 1].

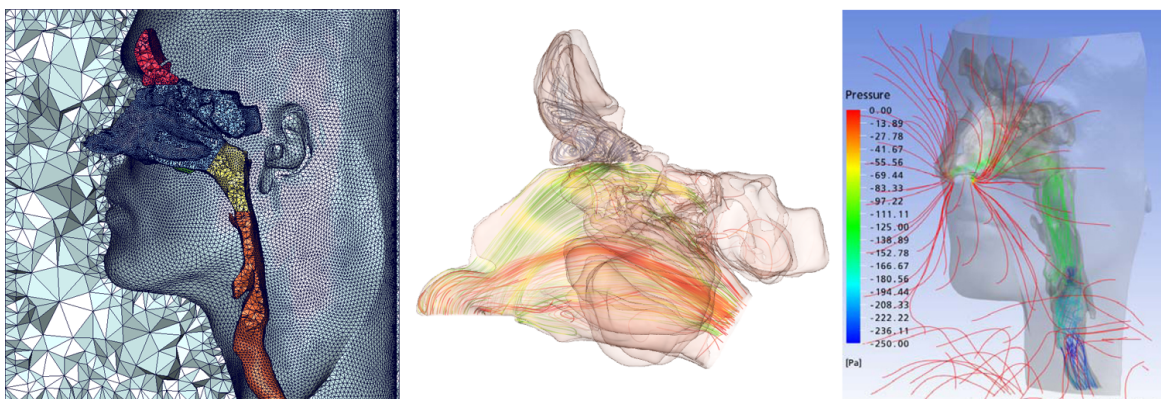


ABBILDUNG 2.13: Links: Diskretisiertes Rechengebiet im Schnitt, Mitte: Stromlinien (Seitenvergleich farbcodiert), Rechts: Stromliniendarstellung für den Einatemvorgang (relativer Druck farbcodiert).

Basierend auf einem aus CT-Daten rekonstruierten, anatomischen Referenzmodell des oberen Atemtraktes (inklusive Kiefer- und Stirnhöhlen, Siebbeinzellen, Nasopharynx und Luftröhre bis hin zum Kehlkopf) wurde ein räumliches Rechengitter erzeugt, das zusätzlich den Einströmbereich um den Kopf herum umfasst. Zur Modellierung der Anströmung sind die Grenzflächen der Gesichtsoberfläche im Referenzmodell ebenfalls berücksichtigt (Abb. 2.13). Das Gitter wurde hinsichtlich der Anforderungen an eine FE-Analyse mit Hilfe neu ent-

wickelter Verfahren zur Gitterverbesserung in seiner Komplexität angepasst und bzgl. der initialen Elementverzerrung qualitätsoptimiert (siehe Abschnitt 2.2.3 auf Seite 55). Anhand verschiedener Komplexitätsstufen erfolgte eine Gitterunabhängigkeitsstudie, bei der die Auswirkungen des Gitters auf die Ergebnisse der Strömungssimulation untersucht wurden. Ein Rechengitter, dessen Einfluss auf den berechneten Gesamtvolumenstrom unter 1 % liegt, bildet die Grundlage für numerische Strömungssimulationen.

Im Berichtszeitraum erfolgten sowohl stationäre als auch transiente Berechnungen der Luftströmung mit Hilfe der Software ANSYS CFX 11, deren Ergebnisse von rhinomanometrischen Messungen um weniger als 5 % abwichen [23]. Zur genaueren Berechnung der Wandschubspannungen wurde im Berichtszeitraum ein Verfahren zur Generierung von Prismenschichten an Randflächen entwickelt (siehe Abschnitt 2.2.3 auf Seite 56). Hierbei werden im unstrukturierten Tetraedergitter an relevanten Wandflächen Dreiecksprismenschichten generiert. Der daraus resultierenden Verschlechterung der Qualität angrenzender Tetraederschichten wird mit einem physikalisch basierten Deformationsansatz begegnet, der die Lage innerer Gitterpunkte in Abhängigkeit von der Wandverschiebung derart verändert, dass die Summe der Elementqualitäten maximiert wird (siehe Abschnitt 2.2.3 auf Seite 56).

Das entwickelte Referenzmodell der oberen Atemwege stellt eine ideale Voraussetzung für die Analyse von Strömungsphänomenen bei der Nasenatmung in Abhängigkeit von der individuellen Anatomie dar. Zur Abschätzung der Auswirkungen von chirurgischen Veränderungen der Atemwegsgeometrie wurde z. B. die äußere Nase in ihrer Form typischen Befunden angepasst (Sattelnase, Spannungsnase, hängende Nasenspitze) und die Strömungssimulation mit veränderter Atemwegsgeometrie bei gleichen Randbedingungen wiederholt. Die Strömungsmuster verändern sich augenscheinlich. Eine Auswertung bzw. physiologische Interpretation ist Thema weiterer Untersuchungen, die schließlich in ein größeres Forschungsprojekt in Kooperation mit der Universität Karlsruhe münden sollen.

### **Planung der chirurgischen Rekonstruktion der knöchernen Augenhöhle**

**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 anatomisch korrekte, chirurgische Rekonstruktion einer frakturierten oder fehlgebildeten Augenhöhle erfordert besondere Erfahrung und chirurgische Expertise. Eine unzureichende Wiederherstellung hat funktionelle und auch ästhetische Beeinträchtigungen zur Folge. Ziel ist es, die Stellung der Augen sowohl in ihrer Höhe und Tiefe, als auch im Abstand zur Nase zu harmonisieren, um Sehprobleme (z. B. Doppelbilder) zu beheben und harmonische Gesichtsproportionen wieder herzustellen. Einen solchen Eingriff erfolgreich „frei Hand“ vorzunehmen, ist selbst für sehr erfahrene Chirurgen nahezu unmöglich. Eine präoperative Planung ist daher unverzichtbar. Typischerweise erfolgt sie an zweidimensionalen CT-Schnittbildern. Dreidimensionale Planungsansätze nutzen die Gesichtssymmetrie und spiegeln die Augenhöhle an der mittsagittalen Medianebene.

Ein verbesserter Planungsansatz nutzt das Wissen um die statistische Variation der Orbitaform, sowohl im individuellen links-rechtsseitigen Vergleich als auch über eine größere Popula-



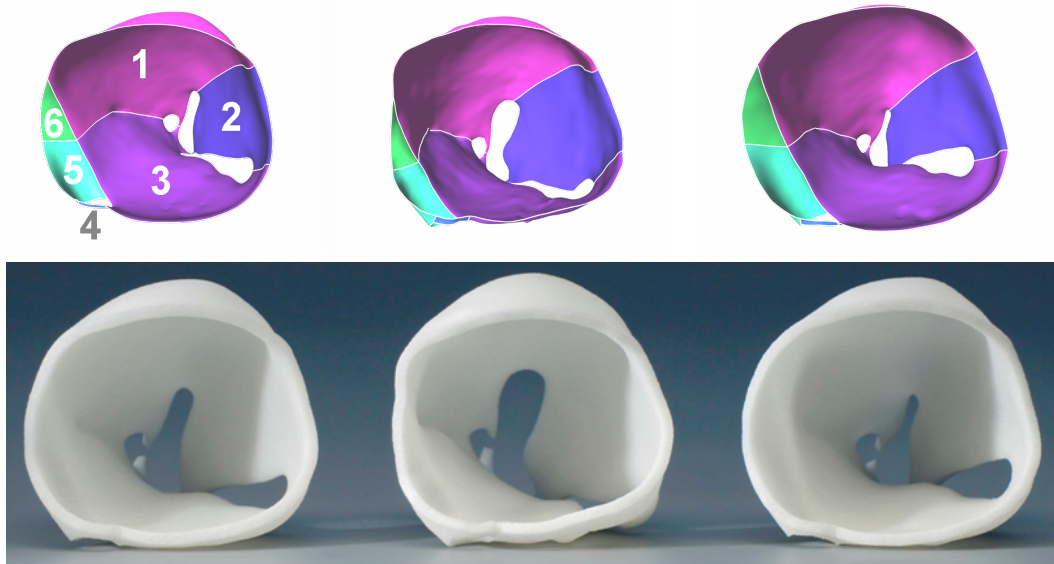


ABBILDUNG 2.14: Oben links: Regionenzerlegung am Beispiel der gemittelten Augenhöhle, mitte und rechts: Formvariationen des statistischen Orbitamodells; Unten: Gefertigte Prototypen charakteristischer Orbitaausprägungen

tion betrachtet. Zur computergestützten, präoperativen Planung einer dreidimensionalen Rekonstruktion der knöchernen Augenhöhle werden deshalb statistische Formmodelle aus einer größeren Menge von CT-Datensätzen von normal ausgeprägten Augenhöhlen ohne pathologischen Befund erstellt. Dabei werden die linke und die rechte Augenhöhle separat betrachtet um einen paarweisen Formvergleich durchführen zu können. In einer ersten Analyse wurden charakteristische anatomische Landmarken am Oberflächenmodell der knöchernen Orbita identifiziert und spezifiziert, anhand derer eine automatische Gebietszerlegung mittels Oberflächengraphen vorgenommen werden kann (siehe Abb. 2.14 oben). Diese Gebietszerlegung erfolgte analog bei allen rekonstruierten Modellen, wobei bereits entwickelte Verfahren für die interaktive Regioneneinteilung (Abschnitt 2.2.6) weiter verbessert wurden [13].

Mit Hilfe der statistischen Modellierung kann unter anderem ermittelt werden, wie sich linke und rechte Orbita unterscheiden. Weiterhin kann bestimmt werden, in welchen Regionen sich relevante Unterschiede zwischen den Augenhöhlen verschiedener Personen befinden, die eine individuelle Anpassung benötigen, bzw. wo die Variabilität gering ist und eventuell vorgefertigte Implantate verwendet werden können (siehe Abb. 2.14 unten) [10].

Neben der Nutzung als Rekonstruktionsgrundlage stellen statistische Formmodelle auch A-priori-Wissen für eine automatische Segmentierung der Augenhöhle aus medizinischen Bilddaten dar (siehe Abschnitt 2.2.4). Durch Nutzung von Formwissen lassen sich typische, aufgrund des Partialvolumeneffektes auftretende Rekonstruktionsprobleme der zum Teil papierdünnen Orbitawände beheben.

## Computergestützte 3D-Planung in der dentalen Implantologie

**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

In der dentalen Bildgebung werden Standard-Panorama-Röntgenaufnahmen mehr und mehr durch die Digitale Volumentomographie (DVT, Cone-Beam-CT) abgelöst. Letztere liefert deutlich mehr Information für die dreidimensionale Bewertung der Zahn- und Knochen-substanz. Allerdings besitzen entsprechende Scanner eine im Vergleich zu konventionellen Computer-Tomographen deutlich geringere Strahlenenergie, wodurch Weichgewebestrukturen weniger gut differenziert werden und die Bildgüte durch metallene Zahnfüllungen drastisch reduziert wird. Für die Planung in der dentalen Implantologie spielt neben der Rekonstruktion des knöchernen Unterkiefers aber auch die Lage des mandibulären Nerves eine wesentliche Rolle. Der chirurgische Eingriff zur Einbringung eines Zahnwurzelimplantats erfordert eine genaue Planung. Das Implantat muss vollständig in Knochen eingebettet in seiner Lage optimiert werden, wobei der Schutz des Mandibulärnervs höchste Priorität hat. Somit ergibt sich für die präoperative Planung die Forderung einer *verlässlichen* dreidimensionalen Rekonstruktion der harten und weichen Knochenstrukturen einschließlich des links- und rechtsseitigen Nervenkanals.

Im Berichtszeitraum wurde aus einer noch relativ kleinen Anzahl von qualitativ hochwertigen Computertomogrammen ein statistisches 3D-Formmodell des normal ausgeprägten menschlichen Unterkiefers erstellt. Dieses Formmodell stellt in seiner angestrebten Endform einen alters- und geschlechtsgemittelten, unbezahnten Unterkiefer mit Nervenkanälen, einschließlich seiner Formvariabilität dar. Dieses Modell bildet die Grundlage sowohl für die Segmentierung schwachkontrastiger DVT-Daten, als auch für die 3D-Implantatplanung. Es wurde ein robustes Verfahren zur Segmentierung entwickelt, das den Unterkiefer aus den Bilddaten auf Basis eines statistischen Modells rekonstruiert (siehe Abschnitt 2.2.4 auf Seite 64). Bei der Analyse von Grauwertprofilen zur Anpassung des Formmodells werden Mark- und Knochengrenzen detektiert. Kontrastreichere Regionen mit verlässlicherer Bildinformation werden dabei automatisch bevorzugt ausgewertet. Erste Ergebnisse mit einem noch nicht repräsentativen Formmodell (bestehend aus ca. 10 Datensätzen) weisen einen mittleren Fehler von ca. 1–3 mm auf [12].

Neben den knöchernen Strukturen sollen auch die Lage und der Verlauf des Mandibulärnervs über das statistische Modell vorsegmentiert und rekonstruiert werden (Abb. 2.15). Dazu wurde das statistische 3D-Formmodell um den Verlauf der Nerven erweitert [21]. Erste Ergebnisse sind erfolgversprechend und weisen darauf hin, dass zumindest der Suchraum für eine automatische Segmentierung des Nervkanals über das Modell sinnvoll vorgegeben werden kann. Genauigkeitsabschätzungen können aufgrund der geringen Stichprobenanzahl allerdings noch nicht angegeben werden. Erweist sich die Nutzung eines statistischen 3D-Formmodells des unbezahnten Unterkiefers zur Unterkiefersegmentierung als robust und verlässlich, dann stellt die Nutzung eines solchen Modells für die 3D-Rekonstruktion aus kalibrierten, *zweidimensionalen* Panorama-Röntgenaufnahmen ein längerfristiges Ziel dar (siehe auch Abschnitt 2.2.4 auf Seite 66).

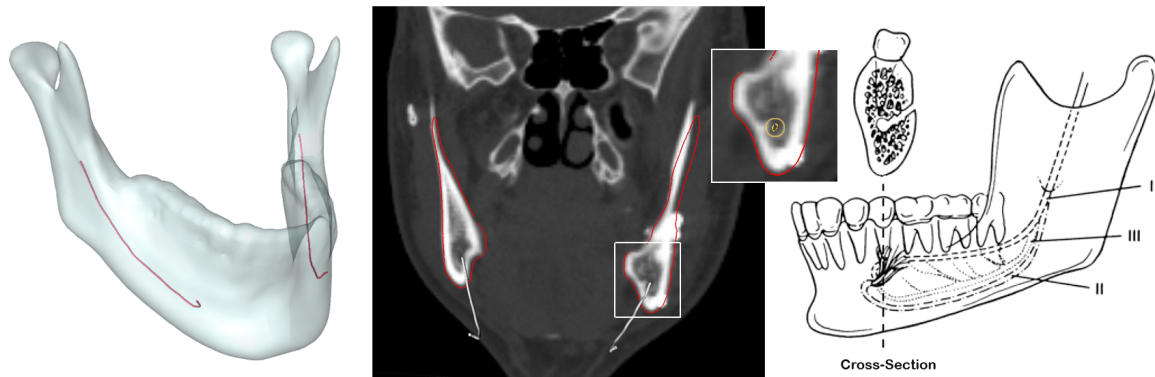


ABBILDUNG 2.15: Links: Statistisches 3D-Formmodell des Unterkiefers einschließlich der Mandibulärnerven. Mitte: Nutzung des Modells für die Nervsegmentierung. Rechts: Lagevariation des Mandibulärnervs.

### DeSSOS – Bildbasierte 3D-Planung für die orthopädische Chirurgie

**Bearbeitet von:** Heiko Seim, Stefan Zachow, Hans-Christian Hege, Hans Lamecker

**Kooperationspartner:** Mark Taylor, School of Engineering Sciences, University of Southampton Highfield, Vereinigtes Königreich; Markus Heller, Charité, Campus Virchow-Klinikum; Edvard Valstar, Leiden University Medical Center, Niederlande; Manuel Doblaré, University of Zaragoza, Spanien; Argiris Kamoulakos, ESI Group S.A., Rungis, Frankreich; Andy Taylor, Finsbury Orthopaedics Ltd., Leatherhead, Vereinigtes Königreich; Nigel Lambert, Pera Innovation Ltd., Leicestershire, Vereinigtes Königreich; Allan Ritchie, DePuy International Ltd., Leeds, Vereinigtes Königreich

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

Das Kernziel des EU-Projektes DeSSOS (Decision Support Software for Orthopedic Surgery) liegt in der Entwicklung von Methoden und Werkzeugen zur Rekonstruktion patientenspezifischer Knieanatomie für die prä- und intraoperative Implantatsplanung und die biomechanische Bewegungssimulation.

Zur computergestützten Operationsplanung in der orthopädischen Chirurgie, insbesondere des vollständigen Kniegelenkersatzes, werden dreidimensionale Modelle der individuellen Anatomie des Knies benötigt, an denen Implantate angepasst werden können. Deren Funktion wird in der Bewegung unter Berücksichtigung wirkender Kräfte (Hebel-, Muskel- und Zugkräfte) simuliert und getestet (siehe Abb. 2.16 links). Ziel unseres Teilprojektes ist es, mittels eines automatisierten Segmentierungsverfahrens die knöchernen Anatomie patientenspezifisch zu rekonstruieren, inklusive der für die biomechanische Simulation erforderlichen Parameter wie Rotationszentren bzw. -achsen, Ansatzflächen von Bändern, Sehnen, Muskeln und Knorpeln.

Zu diesem Zweck wird zunächst eine Referenzgeometrie erzeugt, die alle relevanten anatomischen Strukturen beinhaltet und die an individuelle Daten (Röntgenbilder, CT- bzw. MRT Ausschnitte u. ä.) angepasst werden kann. Das Referenzmodell soll neben der knöchernen Anatomie und den relevanten Ansatzflächen der benachbarten anatomischen Strukturen (Bänder, Sehnen, Muskeln und Knorpel) auch die statistisch auftretenden geometrischen Variationen erfassen. Unter Nutzung dieser Information sollen anschließend die knöchernen Strukturen

und die Ansatzflächen auf die individuellen Gegebenheiten eines Patienten übertragen werden. Langfristiges Ziel ist die dreidimensionale Anpassung von Implantaten am Modell zum Zwecke der funktionellen Bewegungssimulation.

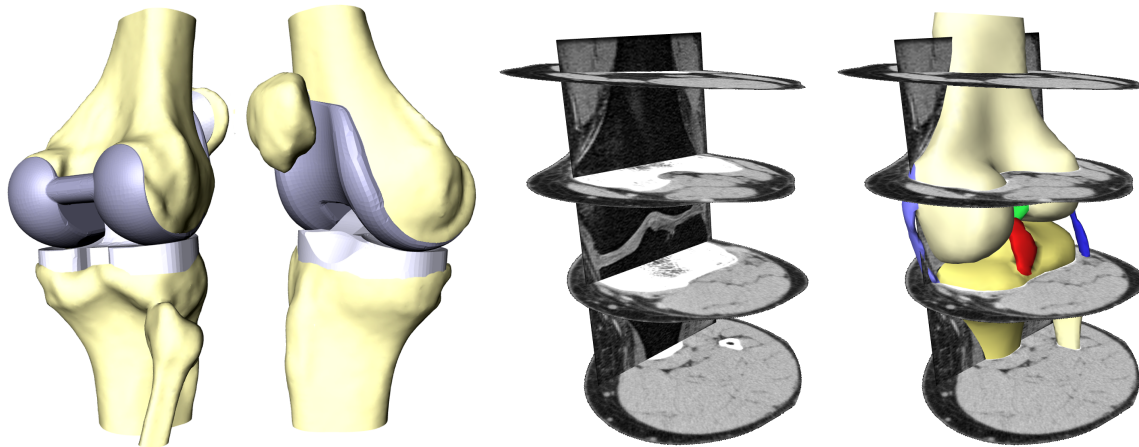


ABBILDUNG 2.16: Links: Patientenindividuelle Knieanatomie mit eingepasstem Implantat. Rechts: Registrierte CT- und MRT-Daten zur Rekonstruktion von Knochen sowie Bändern und Sehnen.

Im Berichtszeitraum wurde an der Erzeugung eines Referenzmodells der Knieanatomie gearbeitet. Grundlage dafür bildete der *Visible Korean Human* Datensatz der Ajou-Universität Suwon in Korea [15], aus dem das rechte Bein – einschließlich Knochen, Sehnen, Bänder, Knorpel und Muskeln – geometrisch rekonstruiert wurde. Zudem wurden ein hochaufgelöstes Knie-CT sowie mehrere dazu korrespondierende MRTs eines Probanden ohne Befund angefertigt, aus denen ebenfalls die relevanten Strukturen rekonstruiert wurden (Abb. 2.16 rechts). Neben der Erstellung eines Referenzmodells ist es ein weiteres Ziel, die geometrischen Variationen der anatomischen Strukturen statistisch zu erfassen und in die Referenzgeometrie zu integrieren. Die Sammlung und Auswertung der hierfür notwendigen Trainingsdaten begann im Berichtszeitraum. Einzelne anatomische Objekte, wie etwa die Patella oder die Femurkondylen, ließen sich auf diese Weise bereits zu statistischen 3D-Formmodellen zusammenfassen und erfolgreich zur Segmentierung medizinischer Bilddaten anwenden. Diese Einzelstrukturen sollen langfristig zu einem vollständigen, die komplette Knieanatomie beschreibenden, Gesamtmodell zusammengeführt werden, mit dem es möglich sein soll, die vorab geforderte Anatomierekonstruktion zu automatisieren.

### **Geometrische Rekonstruktion der unteren Extremitäten für die biomechanische Modellierung und Simulation**

**Bearbeitet von:** Dagmar Kainmüller (ab 01.01.07), Hans Lamecker, Stefan Zachow, Hans-Christian Hege

**Kooperationspartner:** Georg Duda, Georg Bergmann, Charité, Campus Mitte; Petra Knaus, Institut für Chemie-Biochemie der FU Berlin; Ralf Kornhuber, Institut für Mathematik der FU Berlin; Peter Fratzl, Max-Planck-Institut für Kolloid- und Grenzflächenforschung, Gollm; Stefan Mundlos, Max-Planck-Institut für Molekulare Genetik, Berlin; Andreas Lendlein, Institut für Polymerforschung am GKSS-Forschungszentrum, Teltow

**Förderung:** DFG, SFB 760

In diesem Projekt wurden Vorarbeiten für den DFG-Sonderforschungsbereich 760 „Biomechanics and Biology of Musculoskeletal Regeneration – From Functional Assessment to Guided Tissue Formation“ durchgeführt. Der SFB wurde im Berichtszeitraum beantragt und Ende 2006 bewilligt.

Zentrales Thema ist die Heilung und Regeneration von Knochen, insbesondere soll ein besseres Verständnis des endogenen Wachstums von biologisch und mechanisch leistungsfähigem Knochengewebe erlangt werden. Eine Schlüsselfrage ist, welche physikalischen Bedingungen zur optimalen Regeneration eines solchen Gewebes notwendig sind. Individuelle Modelle der Beinanatomie sind eine grundlegende Voraussetzung, um patientenspezifisch die muskuloskeletale Funktion und Belastungszustände – das heißt, die physikalischen Bedingungen – im Bein zu charakterisieren. In unserem Teilprojekt erfolgt die Entwicklung von Methoden zur geometrischen Rekonstruktion aller relevanten anatomischen Strukturen der unteren Extremitäten für die biomechanische Modellierung und Simulation. In einem weiteren am ZIB und der FU Berlin angesiedelten Teilprojekt dieses Sonderforschungsbereiches (siehe S. 52) werden numerische Verfahren für die patientenspezifische biomechanische Simulation entwickelt und zur klinischen Anwendung gebracht.

### **Geometriebasierter Formvergleich**

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

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

**Förderung:** DFG-Forschungszentrum MATHEON (Teilprojekt F2)

Der Vergleich dreidimensionaler Formen spielt in vielen Disziplinen, von der Computergraphik über die Bildanalyse (siehe S. 64) bis hin zur Medizin (siehe S. 46 und 48), eine wichtige Rolle. Detaillierte Analysen erfordern eine Repräsentation der Formen in einem gemeinsamen Raum, dem sogenannten „Shape-Space“. Zum Vergleich ist es notwendig, korrespondierende Punkte auf verschiedenen, zueinander homöomorphen Formen mittels einer Korrespondenzabbildung zu identifizieren.

Kriterien für eine geeignete Identifikation hängen im Allgemeinen von der Anwendung ab. Gängig sind physikalisch basierte Ansätze, die etwa die zur Überführung von Formen notwendige Deformationsenergie minimieren. Häufig sind die Formunterschiede allerdings nicht durch physikalische Verformungen bedingt, oder die Komplexität einer physikalischen Modellierung ist dem Problem nicht angemessen. Es wurde daher ein Funktional  $E : C^\infty(M, N) \rightarrow \mathbb{R}$  auf dem Raum der Diffeomorphismen zwischen zwei Flächen  $M$  und  $N$  erarbeitet, das die Ähnlichkeit zweier Formen auf Basis ihrer Charakterisierung durch das Fundamentaltheorem der Flächentheorie bewertet. Seine freien Parameter sind zum einen die Gewichtung von Winkeln gegenüber Flächenerhaltung (metrische Größen) und zum anderen eine Gewichtung dieser metrischen Terme gegenüber der punktwisen Krümmungsdifferenz der Flächen. Ein erster Ansatz, beide Flächen konsistent in zusammenhängende Gebiete zu zerlegen und ein ähnliches Problem dort zu lösen, führt durch die Definition von Gebietsgrenzen zu willkürlich definierten Korrespondenzen. Daher wurde im Berichtszeitraum eine direkte Methode zur Lösung des Problems entwickelt. Dazu wurden sowohl Variationen des kontinuierlichen Problems untersucht, als auch geeignete Finite-Elemente-Räume für  $C^\infty(M, N)$ .

### Heterogene muskuloskeletale Modellierung und Simulation der Tibia

**Bearbeitet von:** Peter Deuffhard, Rainald Ehrig, Susanne Ertel (bis 30.06.06, Corinna Klapproth (ab 01.10.06)

**Kooperationspartner:** Georg Duda, Norbert Haas, Markus Heller, Bill Taylor, (Charité Campus Virchow-Klinikum, HU Berlin), Georg Bergmann (UKBF, FU Berlin), Ralf Kornhuber, Oliver Sander (FU Berlin, Fachbereich Mathematik und Informatik, Rolf Krause (Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, Zuse-Fellow)

**Förderung:** Klinische Forschergruppe Biomechanik und Biologie der Knochenheilung: Individuelle, beanspruchungsgerechte Osteosynthese, DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt A2

Die Methoden einer einheitlichen und konsistenten Beschreibung der Bewegung von Gelenken wurde im Jahr 2006 im Wesentlichen abgeschlossen [7, 6, 5, 17, 18]. Basierend auf einer Singulärwert-Zerlegung ermöglichen diese Verfahren nicht nur eine Analyse der Hauptkomponenten der Bewegung der Segmente zueinander sondern liefern auch eine zuverlässige Abschätzung der unterschiedlichen Fehlerquellen. Dies wird eine routinemässige optimale patientenspezifische Platzierung von Hautmarkern ermöglichen.

Mit diesen Werkzeugen ist jetzt auch eine wesentlich detailliertere Rekonstruktion der Bewegungen der Knochensegmente erreichbar, siehe Abbildung 2.17. Hierbei werden individuelle anatomische Größen, wie etwa Segmentlängen, bei der Bestimmung von Gelenkachsen und -zentren verwendet. Mathematisch ergibt dies ein lineares Ausgleichsproblem mit nichtlinearen Regularisierungstermen.

Die zuverlässige und robuste Rekonstruktion ermöglicht im nächsten Schritt eine realistische Berechnung der in Gelenken und Segmenten auftretenden Kräfte mit Mitteln der inversen Dynamik. Hiermit ist inzwischen auch eine Analyse der lateralen und proximalen Lastanteile im Knie möglich [16, 19].

Ergänzt wurden diese Arbeiten durch die Entwicklung eines dynamischen Modells auf der Grundlage der Mehrkörpersimulation, das speziell ein detailliertes Modell des menschlichen Knies beinhaltet.

Diese Resultate wurden in enger Kooperation innerhalb der klinischen Forschergruppe erzielt.

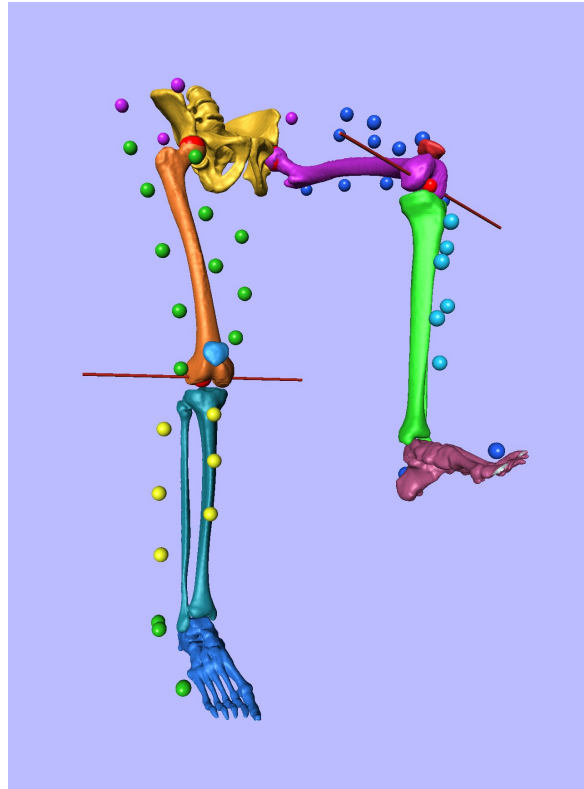


ABBILDUNG 2.17: Rekonstruktion der Knochensegmente beim Treppensteigen.

Die Zusammenarbeit wird ab dem 01.07.2007 im neugegründeten SFB 760 „Biomechanics and Biology of Musculoskeletal Regeneration“ im Projekt C-5 „Fast and reliable multilevel algorithms in a virtual orthopaedic surgery lab“ intensiviert werden.

### Simulation des menschlichen Gangs

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

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

**Förderung:** DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt A2; Klinische Forschergruppe der DFG „Biomechanik und Biologie der Knochenheilung: Individuelle, beanspruchungsgerechte Osteosynthese“

Im Berichtszeitraum konnte die schon im Vorjahr vorgeschlagene Stabilisierung des Newmark-Verfahrens (in der Variante nach Kane et al., 1999) in einfacher Weise theoretisch hergeleitet und analysiert werden. Die Reduktion der in den vorigen Varianten aufgetretenen Oszillationen konnte konzise erklärt werden. Diese Theorie sowie die augenfälligen Verbesserungen wurden in [3] publiziert, ihre Kombination mit monotonen Mehrgittermethoden findet sich in einer Publikation mit Kornhuber et al. [11]. Ein Eindruck von der Verbesserung lässt sich aus Abbildung 2.18 gewinnen.

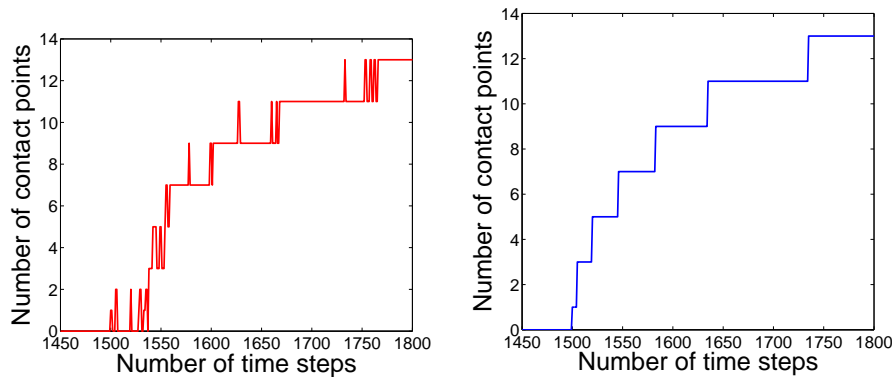


ABBILDUNG 2.18: Anzahl von Kontaktpunkten. *Links*: Newmark-Variante nach Kane et al., 1999: etwa 400 Oszillationen während des gesamten Kontakts. *Rechts*: stabilisierte Newmark-Variante (ZIB): 3 Oszillationen während des gesamten Kontaktes.

### Dynamische FEM-Simulation der elektrischen Herzmuskelanregung

**Bearbeitet von:** Peter Deuffhard, Bodo Erdmann, Rainer Roitzsch, Martin Weiser

**Kooperationspartner:** Luca Pavarino, Universität Mailand, Italien; Piero Colli Franzone, Universität Pavia, Italien; Glenn Lines, Aslak Tveito, Simula, Norwegen; Jens Lang, Technische Universität Darmstadt

Zur Simulation der elektrischen Aktivität im Herzmuskel, wie sie im Elektrokardiogramm sichtbar wird, werden viele verschiedene Modelle herangezogen. Alle bestehen aus parabolischen Differentialgleichungen (PDE) zur Beschreibung des elektrischen Potentials, die mit einem System gewöhnlicher Differentialgleichungen (ODE) gekoppelt sind, das die Ionenströme und die Ca-Konzentration in den Zellmembranen modelliert. Die besten, aber auch rechenintensivsten Modelle (z. B. Bidomain Luo-Rudy) geben das Potentialverhalten in den Phasen *Anregung*, *Plateau* und *Erholung* im zeitlichen und örtlichen Verlauf sehr gut wieder, während einfachere Modelle nur Teilaspekte gut simulieren.

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 fortgesetzt. Zunächst wurde eine Simulation des Herzkammerflimmerns – basierend auf einer realistischen Geometrie und den Gleichungen von Aliev und Panfilo – durchgeführt, siehe Abbildung 2.19. Die auf einer Rothe-Methode beruhende adaptive Steuerung in Zeit und Ort bewies in diesem Beispiel ihre Effizienz, die Rechenzeit war allerdings noch unerwünscht hoch [2].

Zur Beschleunigung des Algorithmus wurde eine neue Diskretisierung durch Entkopplung der ODEs von den PDE („Splitting“ vorbereitet. Beim Bidomain-Luo-Rudy-Modell ergibt sich damit beispielsweise eine Verkürzung der Rechenzeit um einen Faktor 10, beim einfacheren Aliev-Panfilov-Modell eine Halbierung.

Eine weitere Effizienzsteigerung konnte durch Ausnutzen von Multi-Threading-Techniken zur Parallelisierung einiger Code-Abschnitte erzielt werden.

Auf der Agenda steht der gründliche Test dieser Splitting- und Parallelisierungstechniken in Simulationen auf realistischen Herzmodellen.



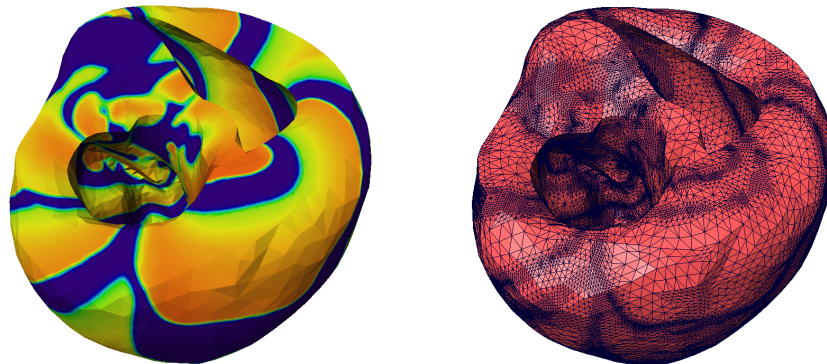


ABBILDUNG 2.19: Typisches Profil des Potentials bei Herzkammerflimmern und adaptives Gitter.

### Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

#### Optimierung der Qualität von Dreiecksnetzen (Michael Zilske, Hans Lamecker, Stefan Zachow)

Remeshing-Verfahren ermöglichen es, die Auflösung von triangulierten Oberflächenmodellen zu ändern und die Qualität der Dreiecke zu verbessern (siehe Abbildung 2.20, links). Ein in *Amira* implementiertes Verfahren war nur auf Mannigfaltigkeiten anwendbar. In den biomedizinischen Projekten werden aber allgemeinere Oberflächen verwendet, um die Grenzflächen zwischen unterschiedlichen Gewebetypen zu modellieren. Wo mehr als zwei Gewebearten aufeinander treffen, ist das Gitter nicht-mannigfaltig – normalerweise entlang einer Kurve. Im Rahmen einer Diplomarbeit wurde ein adaptives Remeshing-Verfahren so erweitert, dass auch diese Fälle behandelt werden können. Die Knotenverteilung wird durch Verschiebung entlang der jeweiligen Kurven geglättet. Durch Kantenkontraktion kann sie nach Bedarf auch ausgedünnt werden. So wird erreicht, dass auch in der Nähe nicht-mannigfaltiger Stellen keine entarteten Dreiecke entstehen und die Knotendichte derjenigen der angrenzenden Triangulation entspricht.

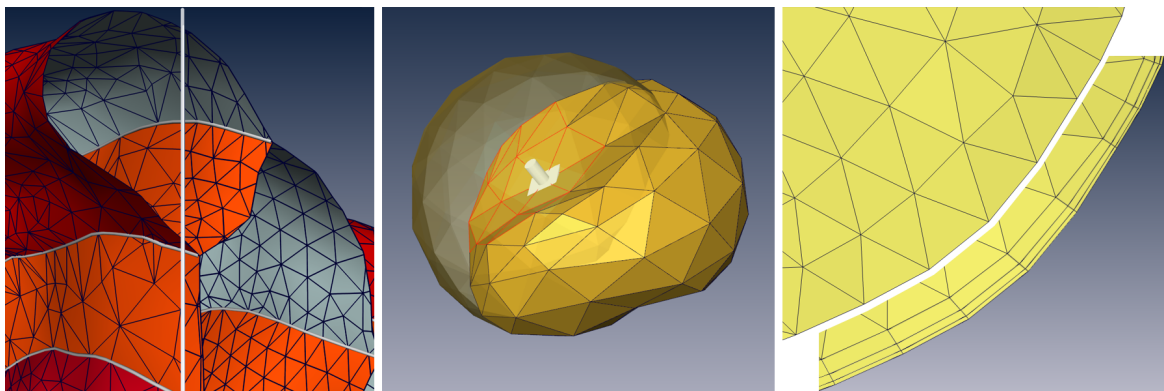


ABBILDUNG 2.20: Links: Remeshing. Mitte: Deformation. Rechts: Wandschichten.

**Interaktive Deformation von Tetraedergittern** (Kai Pöthkow, Stefan Zachow)

Die Simulation von Weichgewebe auf der Grundlage von Tetraedergittern ist mit geeigneten Verfahren interaktiv in Echtzeit möglich. Mit Masse-Feder- bzw. Masse-Tensor-Modellen sowie mit expliziten Integrationsverfahren zur Lösung der Bewegungsgleichungen wurden unterschiedliche Verfahren implementiert. Dabei wird die Masse jedes Tetraeders auf seine vier Eckpunkte aufgeteilt und die Kräfte, die sich aus einer Deformation ergeben, nur für diese Massepunkte ausgewertet. Die Übertragung der Kräfte zwischen den Punkten ergibt sich entweder aus dem Hooke'schen Gesetz und den Federkonstanten auf Basis der Kanten-konnektivität oder aus physikalisch basierten Steifigkeitsmatrizen für Tetraeder beim Masse-Tensor-Modell. Da die Bestimmung der Steifigkeitsmatrizen auf dem Elastizitätsmodul und der Poissonzahl beruht, ist das Masse-Tensor-Modell besonders geeignet, gemessene Materialeigenschaften von menschlichem Weichgewebe zu berücksichtigen. Ebenso ist die Volumenerhaltung deutlich einfacher zu modellieren als beim Masse-Feder Ansatz. Für kleine Deformationen liefern die Simulationen bereits realitätsnahe Ergebnisse (siehe Abbildung 2.20, Mitte). Die Volumenerhaltung bei großen Deformationen ist unter Berücksichtigung unstrukturierter Gitter mit inhomogener Elementgröße noch zu verbessern. An der Beschleunigung der Berechnung durch das parallele Ausführen von Simulationen auf modernen GPUs wird momentan gearbeitet.

**Erzeugung von Tetraedergittern mit prismatischen Wandelementen für die Strömungssimulation** (Bertram Woelk, Kai Pöthkow, Stefan Zachow)

Für numerische Strömungssimulationen eignen sich Tetraedergitter nur bedingt. Zwar gelingt es, qualitativ hochwertige Gitter mit guter Elementqualität zu erzeugen, die eine stabile Konvergenz ermöglichen, doch sind Tetraeder zur Berechnung von Wandschubspannungen generell eine schlechte Wahl. Um bessere Simulationsergebnisse bei der Strömungssimulation zu erzielen, werden an den als glatt angenommenen Randflächen (Gebietswänden) parallel verschobene, innere Elementgrenzflächen benötigt (siehe Abbildung 2.20, rechts). Für Tetraedergitter mit triangulierten Wandflächen bieten sich hier Dreiecksprismen als Gebietsabschluss an. Das Einfügen solcher inneren Schichten soll das bereits erzeugte Tetraedergitter nach Möglichkeit nur geringfügig verändern.

Im gewählten Lösungsansatz wird zuerst pro Punkt auf ausgezeichneten Wandflächen die Richtung ermittelt, in welche die Prismenschichten extrudiert werden sollen (typischerweise ins Gebietsinnere oder ggf. beidseitig). Je nach Beschaffenheit der Wandfläche müssen unter Umständen für einen Randpunkt mehrere Richtungsvektoren erstellt werden, um valide Randelemente zu erhalten. Anschließend werden alle Tetraeder, die an die jeweiligen Wandflächen grenzen, mit Hilfe der Richtungsvektoren verschoben. Der entstandene Freiraum wird abschließend mit einer vorgebbaren Anzahl von Prismenschichten aufgefüllt. Der implementierte Algorithmus liefert gute Ergebnisse für einfache geometrische Modelle. Bei der Generierung von Prismenschichten für komplexe Geometrien erhöht sich die Anzahl der defekten Randelemente stark. Diesem wird mit einem physikalisch basierten Deformationsalgorithmus begegnet (s. S. 56), der die inneren Punkte des Tetraedermodells in Abhängigkeit von ihrer Entfernung zur Randschicht so verschiebt, dass das Gitter mit gemischten Elementen keine inneren Überschneidungen besitzt und die Tetraeder am Rand ein vorgegbares Qualitätskriterium erfüllen.

**Parameteridentifizierung in der Hyperthermie** (Martin Weiser; Kooperation: P. Wust, J. Gellermann, M. Weihrauch (Charité, Campus Virchow-Klinikum); Förderung: DFG)

Die Anpassung mittels FE- oder FDTD-Simulation berechneter E-Felder in der regionalen Hyperthermie anhand von MR-Temperaturmessungen [8] wurde weiter verfolgt. Dabei konnte aus den gemittelten Korrekturen verschiedener Meßreihen zu verschiedenen Phantomlagerungen auf eine systematische Abweichung geschlossen werden, deren alleinige Berücksichtigung den Simulationsfehler schon signifikant verringert.

Außer einer Anpassung der simulierten E-Felder wurde die Anpassung der sich daraus ergebenden Energiemetrik untersucht. Dieses lineare Modell läßt sich schneller anpassen, enthält aber mehr zu identifizierende Parameter und läßt unphysikalische Zusammenhänge zu. Dennoch liegt die erreichte Vorhersagequalität in der gleichen Größenordnung wie bei dem komplexeren, physikalisch korrekten Modell.

Im Berichtszeitraum wurde das Anschlußprojekt bewilligt und begonnen, hier liegt der Schwerpunkt auf der Erweiterung der an Phantomen entwickelten Verfahren auf die klinische Therapie.

**Mehrskalenmodellierung des Wärmetransports im Gefäßsystem** (Martin Weiser, Peter Deuffhard, Susanne Gerber, Andre Massing; Kooperation: R. Hochmuth, Universität Kassel; C. D'Angelo, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Schweiz)

Das bisher für die Hyperthermieplanung verwendete Modell der Wärmeverteilung im Patienten berücksichtigt die kühlende Durchblutung nur sehr grob, weshalb seit einiger Zeit an einer Mehrskalenmodellierung der Perfusion gearbeitet wird. Im Berichtszeitraum wurde insbesondere die Mesoskala der mittelgroßen Blutgefäße bearbeitet.

Einen wesentlichen Einfluß auf umliegendes Gewebe hat bei größeren Temperaturgradienten der konvektive Wärmetransport durch den Blutstrom. Die direkte numerische Umsetzung einer Konvektions-Diffusions-Gleichung für den Wärmetransport scheitert jedoch an der feinen Geometrie der relevanten Adern. Deshalb wurde ein singuläres Modell erstellt, das den konvektiven Transport auf einen Kantenzug im FE-Gitter konzentriert. Insbesondere der dadurch induzierte Approximationsfehler wurde im Rahmen einer Diplomarbeit untersucht [14].

Der konvektive Wärmetransport ist besonders im Tumorgebiet wichtig. Aufgrund der unzureichenden Strukturierung des Adergeflechts im Tumor kann dies als poröses Medium aufgefaßt werden, so daß aus den Zu- und Abflüssen durch versorgende Gefäße ein Strömungsprofil berechnet werden kann. Im Rahmen einer Masterarbeit wurde dieses Modell aufgestellt und numerisch untersucht [9].

Ein weiterer, in der klinischen Praxis beobachteter Effekt (Steal-Effekt) beruht auf der Konkurrenz verschiedener Gewebegebiete um arterielles Blut. Für die dadurch hervorgerufene globale Kopplung der Perfusionsstärke wurde ein hierarchisches Modell ausgearbeitet und analysiert.

**Publikationen**

- [1] P. Bartsch, A. Steinmann, S. Zachow, Th. Hildebrandt: *ANSYS CFX Simulation of Nasal Airflow - Flow Investigation and Evaluation of Nasal Anatomy to Support Treatment Planning for Functional Rhinosurgery*. CD-Proceedings of 24th CADFEM Users Meeting 2006, Stuttgart, October 25-27, 2006.
- [2] P. Deuffhard, B. Erdmann, R. Roitzsch, and G. T. Lines, *Adaptive finite element simulation of ventricular fibrillation dynamics*, Report 06-49, ZIB, 2006.
- [3] P. Deuffhard, R. Krause, and S. Ertel, *A contact-stabilized Newmark method for dynamical contact problems*, International Journal for Numerical Methods in Engineering (to appear).
- [4] P. Deuffhard, M. Weiser und S. Zachow: *Mathematics in Facial Surgery*. AMS Notices 53(3), S. 1012–16, 2006.
- [5] R. Ehrig, W. R. Taylor, G. N. Duda, and M. O. Heller, *A new approach for the determination of joint axes*, Proceedings of the 52th Annual Meeting of the Orthopedic Society (Chicago), 2006.
- [6] R. Ehrig, W. R. Taylor, G. N. Duda, and M. O. Heller, *A survey for formal methods for determining functional joint axes*, Journal of Biomechanics, in press (2006).
- [7] R. Ehrig, W. R. Taylor, G. N. Duda, and M. O. Heller, *A survey for formal methods for determining the centre of ball joints*, Journal of Biomechanics (2006), no. 39, 2798–2809.
- [8] 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*, Medical Physics **33** (2006), 3912–3920.
- [9] S. Gerber, *Perfusionsmodellierung in menschlichen Tumoren*, Master's thesis, Freie Universität Berlin, in Vorbereitung.
- [10] L. Kamer, H. Noser, H. Lamecker, S. Zachow, A. Wittmers, Th. Kaup, A. Schramm und B. Hammer: *Three-dimensional statistical shape analysis – A useful tool for developing a new type of orbital implant?* AO Development Institute, New Products Brochure 2/06, S. 20–21, 2006.
- [11] R. Kornhuber, R. Krause, O. Sander, P. Deuffhard, and S. Ertel, *A monotone multigrid solver for two body contact problems in biomechanics*, Computing and Visualization in Science (CVS) (to appear).
- [12] H. Lamecker, S. Zachow, A. Wittmers, B. Weber, H.-C. Hege, B. Elsholtz und M. Stiller: *Automatic segmentation of mandibles in low-dose CT-data*, Int. J. Computer Assisted Radiology and Surgery, 1(1):393–395, 2006.
- [13] H. Lamecker, L. Kamer, A. Wittmers, S. Zachow, Th. Kaup, A. Schramm, H. Noser und B. Hammer: *A method for the three-dimensional statistical shape analysis of the bony orbit*, angenommen für Computer Aided Surgery around the Head, 2007.
- [14] A. Massing, Master's thesis, Freie Universität Berlin, in Vorbereitung.

- [15] J.S. Park, M.S. Chung, S.B. Hwang, Y.S. Lee, D.-H. Har, and H.S. Park. *Visible Korean human: Improved serially sectioned images of the entire body*. IEEE Trans. Med. Imaging, 24(3):352–360, 2005.
- [16] W.R. Taylor, R. Ehrig, M.O. Heller, H. Schell, P. Seebeck, and G. Duda, *Tibio-femoral joint contact forces in sheep*, Journal of Biomechanics (2006), no. 39, 791–798.
- [17] W.R. Taylor, R.M. Ehrig, G.N. Duda, and M.O. Heller, *The determination of joint axes: the performance of a new approach*, 5. World Congress of Biomechanics, Munich, Journal of Biomechanics, no. 39, Suppl. 1, 2006, pp. S571–S572.
- [18] W.R. Taylor, R.M. Ehrig, G.N. Duda, and M.O. Heller, *The symmetrical axis of rotation approach (SARA) for determination of joint axes in clinical gait analysis*, 1st Joint ESMAC-GCMAS Meeting, Amsterdam, 2006.
- [19] W.R. Taylor, C. König, A.D. Speirs, R.M. Ehrig, G.N. Duda, and M.O. Heller, *Die medio-laterale Kraftverteilung im Schafsknie*, Deutscher Kongress für Orthopädie und Unfallchirurgie, Berlin, 2006.
- [20] S. Zachow, H.-C. Hege und P. Deuffhard: *Computer Assisted Planning in Cranio-Maxillofacial Surgery*. Journal of Computing and Information Technology – Special Issue on Computer-Based Craniofacial Modelling and Reconstruction, CIT 14(1), S. 53–64, 2006.
- [21] S. Zachow, H. Lamecker, B. Elsholtz und M. Stiller: *Is the course of the mandibular nerve deducible from the shape of the mandible?* Int. Journal of Computer Assisted Radiology and Surgery, Springer, S. 415–17, 2006.
- [22] S. Zachow, A. Steinmann, Th. Hildebrandt, R. Weber und W. Heppt: *CFD simulation of nasal airflow: Towards treatment planning for functional rhinosurgery*. Int. Journal of Computer Assisted Radiology and Surgery, Springer, S. 253–55, 2006.
- [23] S. Zachow, A. Steinmann, Th. Hildebrandt und W. Heppt: *Understanding nasal airflow via CFD simulation and visualization*. angenommen für Computer Aided Surgery around the Head, Innsbruck, Feb. 2007.

#### 2.2.4 Bild- und Signalanalyse

Die Aktivitäten in diesem Schwerpunkt umfassen sowohl die Entwicklung grundlegender mathematischer Verfahren im Bereich der inversen Probleme und der mathematischen Bild- und Signalanalyse als auch die anwendungsorientierte Bildverarbeitung.

In der Arbeitsgruppe *Inverse Problems in Science and Technology* werden insbesondere Verfahren zur Lösung von inversen Problemen entwickelt. Der Schwerpunkt liegt hierbei bei der Entwicklung von Verfahren zur Lösung von nichtlinearen inversen Problemen mit Sparsity-Nebenbedingungen. Anwendungen dieser Verfahren sind insbesondere die meteorologische Datenanalyse, die medizinische Bilddatenrekonstruktion im Bereich der pränatalen Diagnostik, das Farbbild-Inpainting und die Sparse-Approximation von Support-Vektor-Maschinen im Bereich der effizienten Gesichtserkennung.

In der Abteilung *Visualisierung und Datenanalyse* werden Themen der anwendungsorientierten Bildverarbeitung, wie Segmentierung, Objektrekonstruktion und Registrierung bearbeitet.

### Meteorologische Datenanalyse

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

**Kooperationspartner:** Volker Lehmann, Deutscher Wetterdienst, Observatorium Lindeberg; Frank Gekat, SELEX Sistemi Integrati GmbH, Neuss; G. Peters, Max-Planck-Institut Hamburg; Hans-Jürgen Kirtzel, Metek GmbH, Meckenheim

**Förderung:** Deutsche Forschungsgemeinschaft, AG Industrieller Forschungsförderung, Deutscher Wetterdienst (Werkvertrag)

Dieses Projekt unterteilt sich in zwei Schwerpunkte: die Rekonstruktion von Windvektorfeldern und die Analyse der Mikrostruktur von Wolkenschichten.

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, Wolkenstruktur etc. können mittels Radar- oder akustischen Systemen gemessen werden. Die Verarbeitung der gemessenen Atmosphären Daten ist zum Teil unzureichend bzw. ist durch äußere Einflüsse sehr fehlerbehaftet.

In einer Kooperation mit dem DWD wurden Algorithmen entwickelt, die entsprechende Messgeräte (sogenannte Windprofiler) in die Lage versetzen, Störkomponenten in Radarechos automatisch zu erkennen und 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 [13]. Die entwickelten Algorithmen werden derzeit beim DWD getestet, und es gibt Gespräche mit dem Weltmarktführer von meteorologischen Messsystemen, diese standardmäßig zu integrieren.

In einer weiteren Kooperation mit dem DWD und der Firma Metek begann man im letzten Jahr, Algorithmen zur Analyse der Mikrostruktur von Wolkenschichten zu entwickeln; siehe Abbildung 2.21. Hierbei geht es insbesondere um eine sogenannte Targetklassifizierung der gemessenen Atmosphärenpartikel. Auf Grundlage dieser Daten soll es gelingen, sekundäre Parameter wie z. B. den Flüssigwassergehalt, Schmelzschichten etc. zu quantifizieren. Hierzu hat der DWD eine studentische Hilfskraft finanziert, um durch erste Untersuchungen von Wolkenradarmessungen aus den Jahren 2005 und 2006 typische „Strukturcharakteristiken“ zu extrahieren. Erste Targetklassifizierungen wurden entwickelt [17], und darauf aufbauend wurde ein Forschungsprojekt mit der Firma Metek konzipiert. Der Förderantrag dazu wurde bei der AIF (Arbeitsgemeinschaft industrieller Forschungseinrichtungen „Otto-von-Guericke“ e. V.) eingereicht und Anfang 2007 bewilligt.

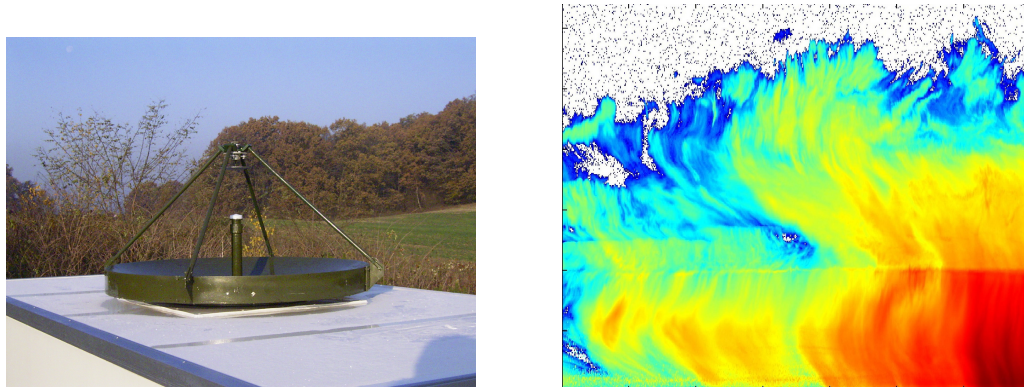


ABBILDUNG 2.21: Links: Wolkenradargerät MIRA36 der Firma Metek, rechts: Wolkenradarmessung (sichtbar: Schmelzschicht und Niederschlag).

### Inverse Probleme – Algorithmen zum Farbbild-Inpainting

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

**Kooperationspartner:** R. Ramlau, Johann-Radon-Institut Linz, Österreich; I. Daubechies und M. Fornasier, Princeton University, USA; L. Vese, University of California Los Angeles, IPAM, USA

**Förderung:** Deutsche Forschungsgemeinschaft

Farbbild-Inpainting kann als inverses Problem formuliert werden: gegeben seien eine vollständige Grauwertbilddarstellung (möglicherweise deformiert oder „geblurt“) und eine zufällige partielle Farbwertbildinformation; gesucht wird eine vollständige Farbbildrekonstruktion, siehe Abbildung 2.22. Dieses Problem hat mehrere Besonderheiten. Zum einen ist es nichtlinear, zum anderen wird der Operator, der zwischen Grauwert und Farbwert vermittelt, durch die Daten selbst beschrieben – er ist also nicht explizit als Modell gegeben, sondern muss anhand der Daten geschätzt werden. Zudem werden neuartige Randbedingungen betrachtet: *Joint sparsity*. Joint sparsity bedeutet, dass nicht individuelle Komponenten der gesuchten Funktion isoliert betrachtet werden, sondern jede Komponente mit den anderen gekoppelt ist (Kanten in Farbbildern treten typischerweise in allen Farbkanälen simultan auf).

Dieses Projekt wurde und wird gemeinsam mit Ronny Ramlau (RICAM), Ingrid Daubechies und Massimo Fornasier (PACM, Princeton) und Luminita Vese (UCLA) bearbeitet. In Zusammenarbeit mit I. Daubechies und L. Vese wurden Verfahren für lineare inverse Probleme und allgemeine „Sparsity“-Randbedingungen entwickelt [6, 16]. Diese Resultate und Forschungsergebnisse haben zum Schreiben eines eingeladenen Buchkapitels in *Advances in Imaging and Electron Physics* geführt, das voraussichtlich 2007 erscheinen wird. In Zusammenarbeit mit Ronny Ramlau und teilweise mit M. Fornasier wurden insbesondere Methoden zu nichtlinearen inversen schlechtgestellten Problemen unter Sparsity-Randbedingungen entwickelt, siehe [14, 18]. 2006 wurde zum Thema „Image Inpainting“ ein Einzelantrag von der DFG bewilligt. Im Rahmen der Kooperation mit R. Ramlau wurde 2006 ein gemeinsames DFG/FWF-Forschungsprojekt beantragt, das Anfang 2007 bewilligt wurde.



ABBILDUNG 2.22: Oben: Grauwertbild, partielle Farbbildinformation; unten: iterative Rekonstruktion.

## Machine Learning – schnelle Verfahren zur Gesichtserkennung

**Bearbeitet von:** Gerd Teschke

**Kooperationspartner:** M. Rätsch, T. Vetter, Universität Basel

**Förderung:** Deutsche Forschungsgemeinschaft

Machine Learning im Kontext der Gesichtserkennung bedeutet hier, einen Klassifikator zu beschreiben, der in der Lage ist, ganze Gesichter oder Gesichtsmarkmalen automatisch zu erkennen. In diesem Projekt unterscheiden wir deshalb zwei Ebenen. Erstens: die Erkennung eines „vollständigen“ Gesichtes. Hierbei geht es insbesondere um eine besonders effiziente Klassifizierung, denn die Verfahren sollen im Bereich der Analyse von Filmsequenzen eingesetzt werden. Mathematisch werden Reduzierte-Support-Vektormaschinen (Reduced support vector machines) generiert, die mit erheblich weniger Aufwand sehr gute Klassifikationsergebnisse erzielen (siehe Abbildung 2.23). Zum Einsatz kommen hier wavelet-frame-basierte Approximationen von klassischen Support-Vektor-Maschinen [15]. Zweitens: die Erkennung von Gesichtsmarkmalen. Im Gegensatz zur Erkennung eines vollständigen Gesichtes werden hier nur markante Punkte (Mund, Nase, Augenwinkel etc.) klassifiziert. Die Konstruktionsprinzipien von Support-Vektor-Maschinen funktioniert hier ähnlich, jedoch wird der Klassifikationsprozess nur als Vorstufe einer weiteren Verarbeitung angesehen. In einer Kooperation mit der Universität Basel (T. Vetter) wird dann in dieser Weiterverarbeitung ein dreidimensionales Gesichtsmodell auf Grundlage der zuvor klassifizierten Merkmalspositionen berechnet. Dazu wurde u. a. eine kleine Studie für das LKA Berlin zur Anfertigung von 3D-Phantomskizzen angefertigt, siehe Abbildung 2.24.



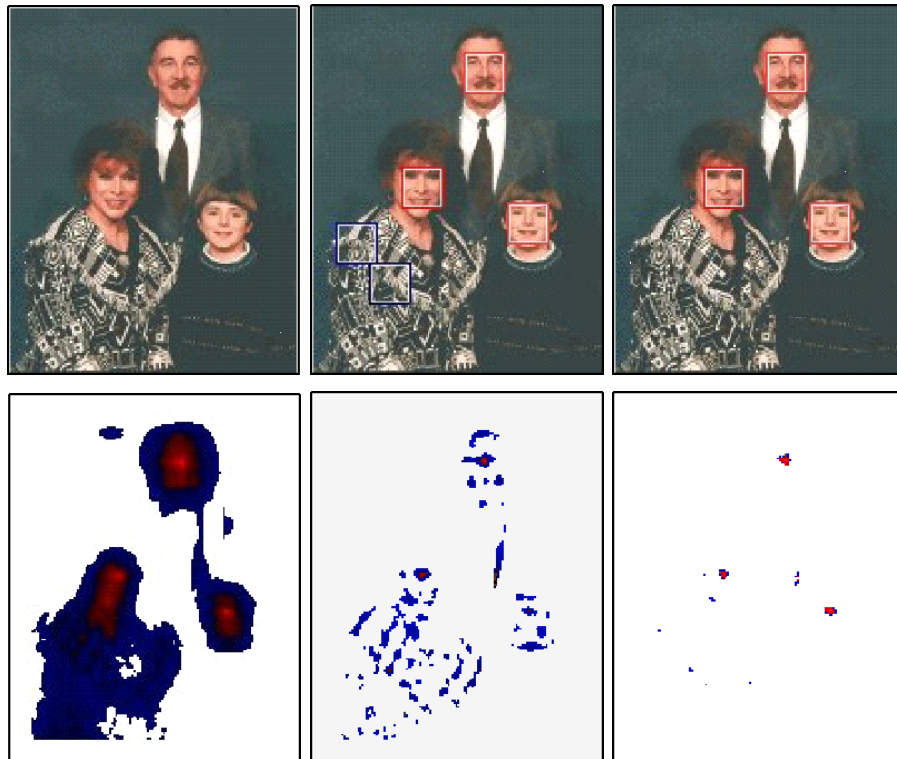


ABBILDUNG 2.23: Oben: Kaskadenartige Klassifizierung von vollständigen Gesichtern, unten: Bildpunkte, die nach Klassifikation einem Gesicht zugeordnet wurden.

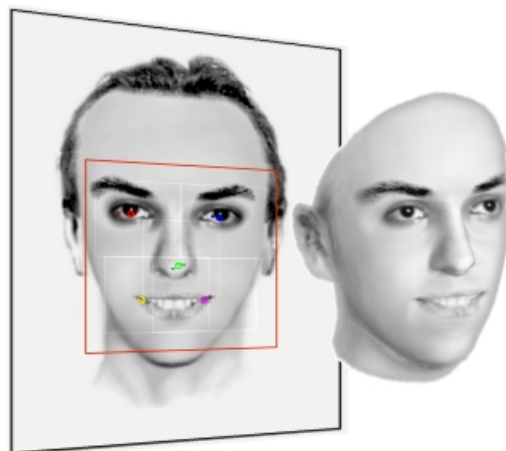


ABBILDUNG 2.24: 2D-Phantom-Skizze mit identifizierten Merkmalen und auf Merkmalsklassifizierung beruhend berechnetes 3D-Gesichtsmodell.

### **Inverse Rekonstruktion fötaler Gehirnaktivitäten**

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

**Kooperationspartner:** R. Ramlau, Johann Radon Institute for Computational and Applied Mathematics (RICAM), Linz, Österreich; Hubert Preissl, MEG-Zentrum Universität Tübingen; Chris Lowery, University of Arkansas for Medical Sciences, Little Rock, USA

**Förderung:** Deutsche Forschungsgemeinschaft

Die Rekonstruktion der fötalen Gehirnaktivität ist ein junges Forschungsgebiet in der pränatalen Diagnostik, das durch jüngste Weiterentwicklungen der medizinischen Gerätetechnik motiviert wird. Mit einem 151-channel SQUID fMEG System (SARA) wurde ein Gerät konstruiert, das es erstmals erlaubt, großflächig Magnetfelder zu messen, siehe Abbildung 2.25. Im Gegensatz zu einem 2006 ausgelaufenen Projekt, in dem die Uteruskonstruktion analysiert wurden, bestand und besteht nun das Ziel darin, die fötale Gehirnaktivität zu rekonstruieren.

Mathematisch wird angenommen, dass die elektrischen Quellen und das elektrische Feld über die Poissongleichung 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 Leitfähigkeit und elektrischen Quellen ein elektrisches Feld am diskret abgetasteten Rand zuordnet. Da anders als bei bisher benutzten Methoden die Leitfähigkeitsfunktion als unbekannt angenommen wird, handelt es sich um einen neuen Schwierigkeitsgrad bei der Lösung des inversen Problems. Methodisch wurden bisher Verfahren [14] entwickelt, die eine generelle Lösungsstrategie bieten. Da jedoch die Lokalisierung der fötalen Aktivitätsquellen eine besondere Herausforderung darstellt, werden die bisher entwickelten Methoden mit geometrischen Verfahren aus dem Bereich Shape-Optimierung kombiniert. Dazu wurde ein gemeinsames DFG/FWF-Projekt (Kooperation MEG-Zentrum/RICAM/ZIB) konzipiert und bei der DFG eingereicht.

### **Modellbasierte Segmentierung von 3D-Bilddaten**

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

**Kooperationspartner:** Martin Seebaß, Mercury Computer Systems; Peter Wust, Johanna Gellermann, Charité, Campus Berlin-Buch; Thomas Lange, Peter Schlag, Charité, Campus Berlin-Buch; Ernst-Johannes Haberl, Maja Zöckler (AG Pädiatrische Neurochirurgie), Charité, Campus Virchow-Klinikum; Barbara Elsholtz, Michael Stiller, 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 biomedizinischen Bildanalyse. Sie ist unter anderem Voraussetzung für computergestützte Therapie- und Operationsplanung (siehe S. 43). 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

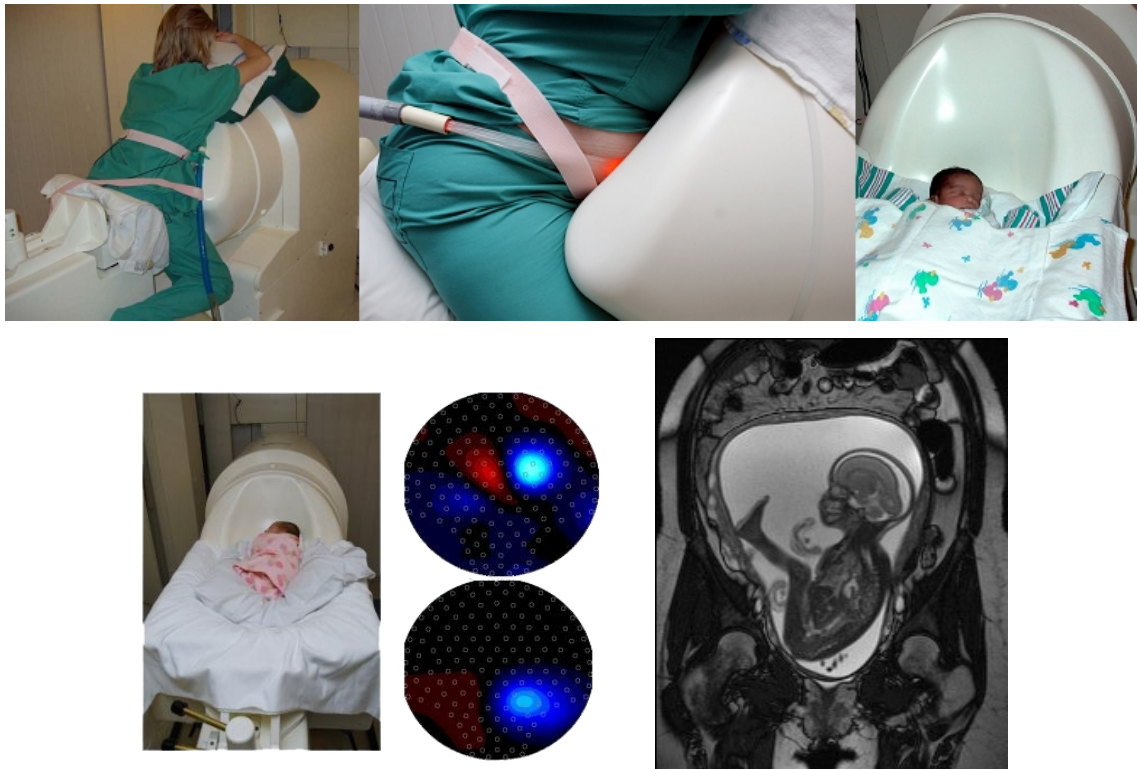


ABBILDUNG 2.25: Oben: Neuentwickelte Messapparatur; Frau und Baby in der Messapparatur; Unten: Fötale Gehirnaktivität topografisch auf dem Sensorarrayfeld abgebildet (links) und geometrische Zusatzinformation (rechts)

werden. Dies kann z. B. durch Einbeziehung von Vorwissen über Form, Grauwertverteilung und Textur der zu segmentierenden Objekte geschehen. Ziel dieses Projektes ist die Entwicklung von Methoden zur Nutzung solchen Vorwissens im Segmentierungsprozess.

Am ZIB wurde in den vergangenen Jahren ein Verfahren entwickelt, das es ermöglicht, sowohl statistisches Vorwissen über die Variabilität von anatomischen Formen als auch spezifisches Wissen über die zu segmentierenden Bilddaten in den Segmentierungsvorgang einfließen zu lassen. Dazu werden in einem vorgelagerten Schritt Verfahren zur quantitativen Analyse inter-individueller anatomischer Variationen und Erstellung von statistischen Formmodellen (siehe S. 51) genutzt. Die Aufgabe der Segmentierung liegt nun darin, die Freiheitsgrade eines statistischen Modells so zu bestimmen, dass es das zu segmentierende Objekt in den Bilddaten möglichst genau beschreibt.

Im Berichtszeitraum wurde ein Verfahren zur Segmentierung des Unterkiefers aus Niedrigdosis-CT-Daten entwickelt (s. S. 48). Dabei wurde das ursprüngliche Verfahren um eine hierarchische Strategie erweitert, welche die Verlässlichkeit der Bildinformation auswertet. Dies erlaubt die Segmentierung stark verrauschter Daten [11]. Weiterhin wurden im DeSSOS-Projekt (s. S. 49) erste Experimente zur Segmentierung von knöchernen Strukturen am Knie unternommen. Zur Segmentierung der Calyx-Struktur aus konfokalen Mikroskopiedaten (Abb. 2.26) im Rahmen des Virtuellen Neurolabors (s. S. 76) wurde als Optimierungskriterium der Mahalanobis-Abstand eines statistischen Modelles der Grauwertprofile zu den

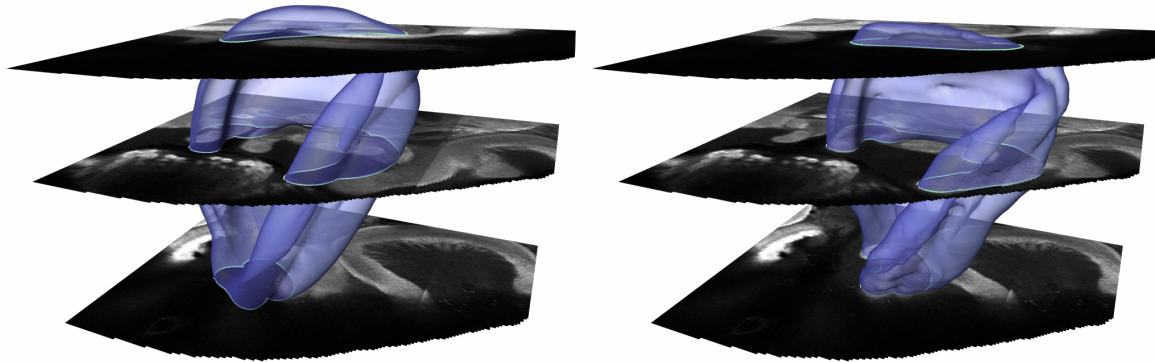


ABBILDUNG 2.26: Segmentierung des Calyx (Struktur zur Verarbeitung von Sinnesreizen im Bienenhirn) aus konfokalen Mikroskopiedaten. Links: Initialisierung des Modells, Rechts: Ergebnis des Anpassungsprozesses.

Bilddaten angewandt.

### Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

**Konstruktion von Funktionenräumen und Banach-Frames auf Mannigfaltigkeiten** (Gerd Teschke; Kooperation: S. Dahlke (Universität Marburg), G. Steidl (Universität Mannheim), M. Fornasier (Princeton University, USA), H. Rauhut (Universität Wien, Österreich) und G. Kutyniok (Universität Gießen))

Ausgehend von der klassischen Coorbit Theory (nach Feichtinger und Gröchenig) wurden Coorbit-Räume auf homogenen Räumen konstruiert, siehe [2, 5]. Diese Art der Konstruktion gestattet z. B. Funktionenräume auf Mannigfaltigkeiten wie etwa die Sphäre. Entscheidend ist dabei, dass durch den Konstruktionsansatz in natürlicher Weise Ansatzsysteme (Banach frames und atomare Zerlegungen) generiert werden können, die überaus vernünftige Darstellungen von Funktionen in diesen Räumen gestatten, siehe [3, 4, 8]. Darüber hinaus konnten entsprechende Approximationsresultate in diesen Funktionenräumen gezeigt werden. Diese Resultate finden eine vielfältige Anwendung, insbesondere können sie bei der Lösung von Operatorgleichungen verwendet werden.

**Rekonstruktion von kortikalen Gefäßnetzwerken** (Steffen Prohaska; Kooperation: Bruno Weber (MPI für biologische Kybernetik, Tübingen), Marco Stampanoni (Paul-Scherrer-Institut, Villingen, Schweiz))

Vom ZIB mitentwickelte Methoden wurden eingesetzt, um Gefäßnetzwerke im primären visuellen Hirnareal des Makaka mulatta zu rekonstruieren. Dazu wurden Synchrotron-Mikrotomographie-Aufnahmen von etwa  $1/8 \text{ mm}^3$  großen würfelförmigen Proben erstellt. Mittellinien und Dicke der Gefäße wurde mit den in [1, 7] vorgestellten Verfahren ermittelt. Die Verfahren zur Abschätzung der Gefäßdurchmesser und die Nachverarbeitung der rekonstruierten Gefäßnetzwerke mussten an die spezifischen Daten angepasst werden.

**Atlas-basierte 3D-Rekonstruktion des Beckens aus 2D-Projektionsbildern** (Hans Lamecker, Hans-Christian Hege; Kooperation: Markus Heller, Georg Duda, Norbert P. Haas (Charité, Campus Virchow-Klinikum); Förderung: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Teilprojekt F2)

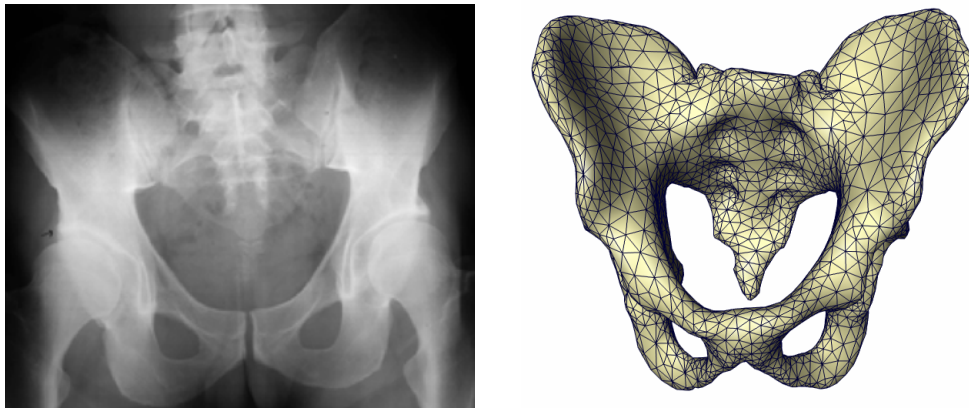


ABBILDUNG 2.27: Rekonstruktion der 3D-Geometrie aus Röntgenbildern.

Häufig liegt einer computergestützten Operationsplanung lediglich ein Satz von wenigen 2D-Röntgenbildern zugrunde. Dennoch ist es ein Anliegen, auf Basis solcher Daten Rückschlüsse auf die dreidimensionale Anatomie des Patienten zu ziehen. Es wurde ein Verfahren entwickelt, das mit Hilfe eines statistischen 3D-Formmodells des Beckens die geometrisch sowie topologisch komplexe 3D-Form aus wenigen Röntgenbildern rekonstruiert [10]. Dies geschieht durch die Minimierung eines Abstandsmaßes, das den Unterschied zwischen Projektionen des Formmodells und den Röntgendaten bewertet. Im Berichtszeitraum wurde aufgrund theoretischer wie auch experimenteller Untersuchungen ein Abstandsmaß vorgeschlagen, das den Abstand der Silhouetten des Objektes in den Röntgenprojektionsebenen misst [9]. Das Verfahren wurde an 23 synthetisch erzeugten Datensätzen validiert und zeigt bereits vielversprechende Ergebnisse für eine Anwendung in der biomechanischen Belastungsanalyse.

**Registrierung von Gefäßmodellen mit 3D-Bilddaten** (Hans Lamecker, Hans-Christian Hege; Kooperation: Thomas Lange, Peter Schlag, Charité, Campus Berlin-Buch))

Nicht-lineare Registrierung von medizinischen Bilddaten ist im Allgemeinen ein rechenaufwendiges Problem. Dennoch sind schnelle Verfahren notwendig: z. B. bei der Umsetzung präoperativer Planungen im Operationssaal, etwa zur Navigation von chirurgischen Instrumenten. Anwendungsspezifisches Vorwissen über die zu segmentierenden Strukturen und deren Bildeigenschaften kann helfen, den Registrierungsprozess zu verbessern und zu beschleunigen. Im Berichtszeitraum wurde in enger Kooperation mit der Charité eine neue Klasse von Ähnlichkeitsmaßen entwickelt [12], die die Übereinstimmung zwischen geometrischen Modellen röhrenförmiger Strukturen (z. B. Blutgefäße) und 3D-Bilddaten misst. Diese lassen sich mittels globalen Filterkernen effizient berechnen und sind daher für den Einsatz in nicht-linearen Registrierungsproblemen gut geeignet, wie erste Untersuchungen mit Powerdoppler-Ultraschalldaten belegen.

**Publikationen**

- [1] 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*, in: *Microcirculation*, 13:15–32, 2006.
- [2] S. Dahlke, M. Fornasier, H. Rauhut, G. Steidl, and G. Teschke, *Generalized Coorbit Theory, Banach Frames, and the Relations to  $\alpha$ -Modulation Spaces*, under review (2006).
- [3] S. Dahlke, G. Kutyniok, P. Maass, C. Sagiv, H.-G. Stark, and G. Teschke, *The uncertainty principle associated with the continuous shearlet transform*, Preprint Nr. 151, DFG Schwerpunktprogramm 1114, submitted (2006).
- [4] S. Dahlke, D. Lorenz, P. Maass, C. Sagiv, and G. Teschke, *The canonical coherent states associated with quotients of the affine Weyl-Heisenberg group*, to appear in *Journal of Applied Functional Analysis* (2006).
- [5] S. Dahlke, G. Steidl, and G. Teschke, *Frames and coorbit theory on homogeneous spaces with a special guidance on the sphere*, *Journal of Fourier Analysis and Applications* (2006).
- [6] I. Daubechies, G. Teschke, and L. Vese, *Iteratively solving linear inverse problems with general convex constraints*, *Inverse Problems and Imaging* **1** (2007), no. 1, 29–46.
- [7] C. Fouard, G. Malandain, S. Prohaska und M. Westerhoff. *Blockwise processing applied to brain micro-vascular network study*, in: *IEEE Transactions on Medical Imaging*, 25(10):13–19, 2006.
- [8] M. Holschneider and G. Teschke, *Existence and Computation of Optimally Localized Coherent States*, *Journal of Mathematical Physics* **47** (2006), 123503.
- [9] H. Lamecker, T.H. Wenckeback und H.-C. Hege, *Atlas-based 3D-shape reconstruction from X-ray images*, in: *Proc. Int. Conf. of Pattern Recognition (ICPR2006)*, Vol. I, S. 371–374. IEEE Computer Society, 2006.
- [10] H. Lamecker, T. H. Wenckeback, H.-C. Hege, G. N. Duda und M. O. Heller, *Atlas-basierte 3D-Rekonstruktion des Beckens aus 2D-Projektionsbildern*, in: H. Handels et al. (Hrsg.), *Bildverarbeitung für die Medizin 2006: Algorithmen – Systeme – Anwendungen*, S. 26–30, 2006.
- [11] H. Lamecker, S. Zachow, A. Wittmers, B. Weber, H.-C. Hege, B. Elsholtz und M. Stiller: *Automatic segmentation of mandibles in low-dose CT-data*, *Int. J. Computer Assisted Radiology and Surgery*, 1(1):393–395, 2006.
- [12] T. Lange, H. Lamecker, M. Hünerbein, S. Eulenstein, S. Beller und P. M. Schlag: *A New Class of Distance Measures for Registration of Tubular Models to Image Data*, angenommen zum Workshop *Bildverarbeitung für die Medizin*, 2007.
- [13] V. Lehmann and G. Teschke, *Advanced intermittent clutter filtering for radar wind profiler: Signal separation through a Gabor frame expansion and its statistics*, submitted (2007).

- [14] R. Ramlau and G. Teschke, *A Projection Iteration for Nonlinear Operator Equations with Sparsity Constraints*, Numerische Mathematik **104** (2006), 177–203.
- [15] M. Rätsch, S. Romdhani, G. Teschke, and T. Vetter, *Wavelet frame accelerated reduced support vector machine*, under review (2006).
- [16] G. Teschke, *Multi-Frame Representations in Linear Inverse Problems with Mixed Multi-Constraints*, Applied and Computational Harmonic Analysis **22** (2007), 43 – 60.
- [17] G. Teschke, U. Görsdorf, P. Körner, and D. Trede, *A new approach for target classification in ka-band radar data*, Proc. ERAD Barcelona (2006).
- [18] G. Teschke and R. Ramlau, *An Iterative Algorithm for Nonlinear Inverse Problems with Joint Sparsity Constraints in Vector Valued Regimes and an Application to Color Image Inpainting*, submitted (2006).

### 2.2.5 Visuelle Strömungsanalyse

In der Strömungsanalyse stehen Verfahren im Vordergrund, die über eine bloße Darstellung der Strömung hinausgehen und die stattdessen die wesentlichen Strukturmerkmale von Strömungen extrahieren und anzeigen.

#### **Merkmalsbasierte Analyse parameterabhängiger Strömungen**

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

**Kooperationspartner:** Bernd R. Noack, Bert Günter, Frank Thiele, Institut für Strömungsmechanik und Technische Akustik, TU Berlin; Holger Theisel, Technische Fakultät, Universität Bielefeld; Kuangyu Shi, Hans-Peter Seidel, Max-Planck-Institut für Informatik Saarbrücken; George Haller, Department of Mechanical Engineering, Massachusetts Institute of Technology, USA

**Förderung:** DFG-Sonderforschungsbereich 557 „Beeinflussung komplexer turbulenter Scherströmungen“, Projekt A2

Im Sonderforschungsbereich 557 wird die Strömung u. a. um eine Hochauftriebskonfiguration durch periodisches Ein- und Ausblasen aktiv beeinflusst (siehe Abbildung 2.28). Ziel der Anregung ist es, den Auftrieb zu steigern und somit bei Start und Landung Treibstoff zu sparen. Die Beeinflussung lässt eine Vielzahl von Parametern zu, wie zum Beispiel den Ort, die Frequenz und die Stärke der Anregung. Ziel ist es, den Parametersatz zu ermitteln, der den Auftrieb maximiert. Da die simulierten Daten schnell einige hundert Gigabyte erreichen, ist eine Auswertung der Daten mit interaktiven Visualisierungsmethoden – wie der Stromliniendarstellung in Abbildung 2.28(b) und (c) – nicht zu leisten. Es werden Algorithmen benötigt, die die Datensätze automatisch auf die für die jeweilige Fragestellung wesentlichen Merkmale reduzieren [7].

Wirbel spielen in der Strömungsmechanik eine große Rolle, da deren Entstehung den Auftrieb vermindert. Die Kontrolle des Wirbelsystems um den Flügel ist somit ein Hauptziel der Strömungsbeeinflussung. Zur exakten Identifikation des Wirbelsystems wurde die aus unserer Vorarbeit bekannte Tatsache genutzt, dass sich Wirbel als Extremalstrukturen gewisser Strömungsgrößen beschreiben lassen. Aufbauend auf Vorarbeiten zur topologischen Analyse [5, 8] wurde ein besonders robustes und schnelles Verfahren entwickelt, um jene Extremalstrukturen nur unter Verwendung von ersten Ableitungen dieser Größen zu berechnen [3].

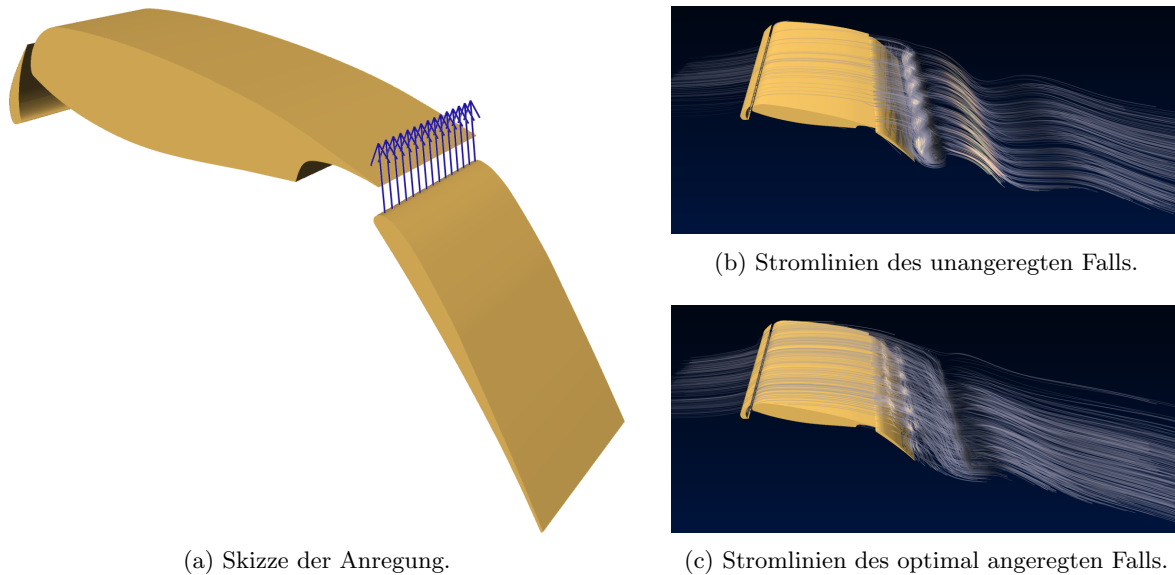


ABBILDUNG 2.28: Anregeprinzip und zwei verschiedene Anregungen.

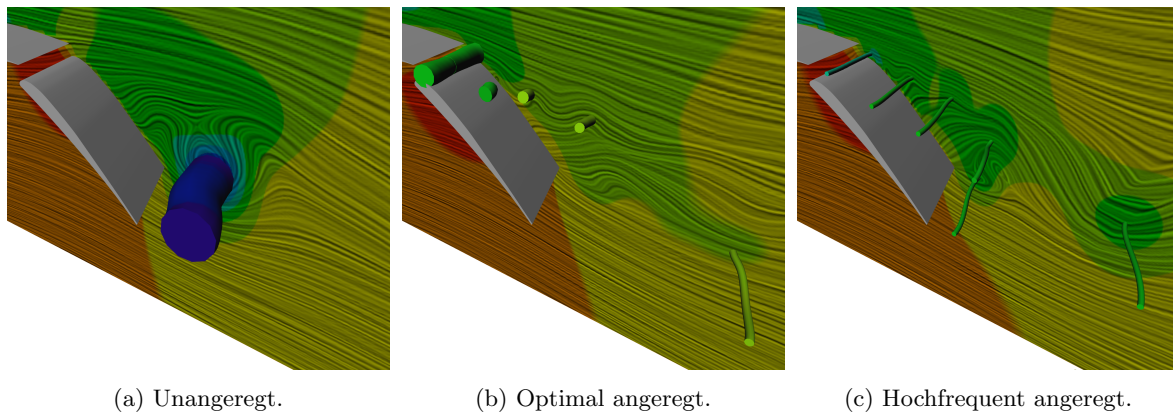


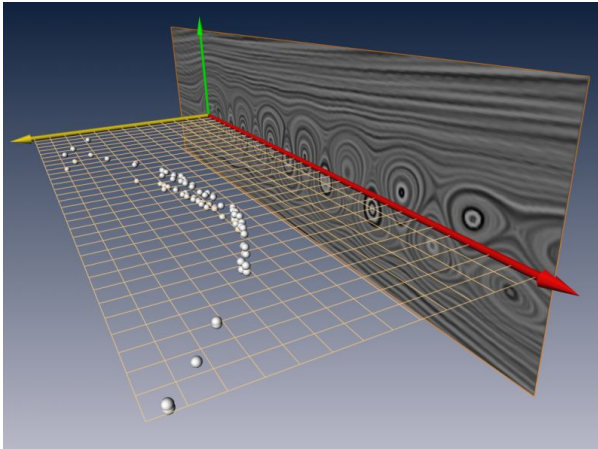
ABBILDUNG 2.29: Hochauftriebskonfiguration zu drei verschiedenen Anregungen. a) Starker, dominanter Wirbel im unangeregten Fall. b) Im optimal angeregten Fall ist der dominante Wirbel abgeschwächt und in kleinere Strukturen zerfallen. c) Zu hochfrequente Anregung führt zu anregungsinduzierten Wirbeln.

Methodisch werden in diesem Verfahren Wasserscheiden, also Extremallinien mit besonderen topologischen Eigenschaften, extrahiert.

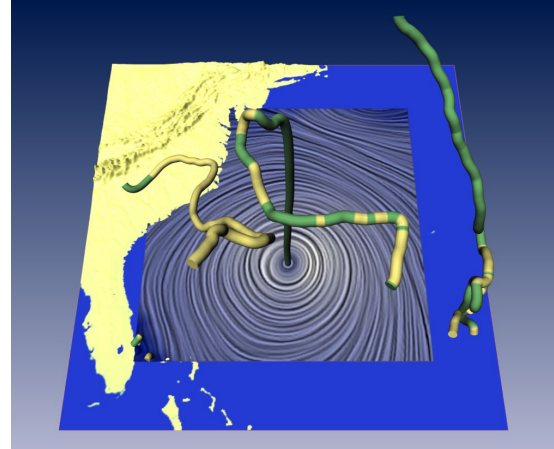
Damit wurde ein wesentlicher Schritt auf dem Weg zur automatischen Analyse und zum automatischen Vergleich parameterabhängiger Strömungen gemacht. Unsere Projektpartner im SFB 557 konnten mit dem Verfahren die strömungsphysikalischen Vorgänge an der Hochauftriebskonfiguration und somit den durch die Anregung erhaltenen Auftriebsgewinn erklären (siehe Abbildung 2.29).

Ein weiteres Ziel ist die Verfolgung von Merkmalen bei Variation von Parametern. Die dabei gewonnene Information ermöglicht eine gezielte Einstellung von Parametern, so dass das





(a) Strömung hinter einem Zylinder: Abhängigkeit von Ereignissen („Auslöschung kritischer Punkte“) von einem Parameter (gelbe Koordinatenachse). Daten von Gerd Mutschke (FZ Rossendorf) und Bernd R. Noack (TU Berlin).



(b) Extraktion und Verfolgung des Sturmzentrums des Hurrikans „Isabel“ (dargestellt als 2D-Strömung mit den Parametern Zeit und Höhe). Daten erstellt mit dem Weather Research and Forecast (WRF) Model von NCAR und NSF.

ABBILDUNG 2.30: Verfolgung kritischer Punkte von 2D-Strömungen in einem 2D-Parameterraum.

Zielfunktional (z. B. der Auftrieb am Flugzeugflügel) positiv beeinflusst wird. Im Berichtszeitraum wurde eine Methode entwickelt, um die Topologie von Strömungen zu erfassen, die von zwei Parametern abhängen [6]. Dazu wurden Vektorfelder konstruiert, deren Integralkurven die gesuchten linienhaften Merkmale darstellen. Abbildung 2.30 zeigt die Anwendung der Methode auf Datensätze aus der Strömungsmechanik und der Klimaforschung.

### VIRTUE – VIRTual Tank Utility in Europe

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

**Kooperationspartner:** Dieke Hafermann, HSVA, Deutschland; Henk Prins, Marin, Niederlande; Leif Broberg, FLOWTECH International AB, Schweden; Alex Duffy, Zichao Wu, CAD Centre, University of Strathclyde, Vereinigtes Königreich; Stefan Harries, FRIENDSHIP-Systems, Potsdam

**Förderung:** EU-Projekt VIRTUE

Für die Vorhersage der hydrodynamischen Eigenschaften eines neuen Schiffmodells werden traditionell maßstabsgetreu verkleinerte Schiffmodelle hergestellt und in großen Schlepp-tanks untersucht. Diese Experimente sind sehr aufwendig und kostspielig, so dass sie jeweils nur für wenige Varianten eines Schiffes durchgeführt werden können. In dem EU-Projekt VIRTUE wird ein virtuelles Schiffsbassin zur Simulation des Schiffsverhaltens entwickelt. Es werden der Wasserwiderstand eines fahrenden Schiffes, die Stabilität im Wasser bei Wellengang, Steuerungseigenschaften des Schiffes und Kavitationseffekte am Propeller untersucht. Die numerischen Methoden ermöglichen es, eine größere Anzahl von Schiffsvarianten zu untersuchen und Optimierungen der Schiffsförmungen durchzuführen [1].

Bei der Optimierung eines Schiffmodells inklusive Propeller und Ruder ist der mögliche Parameterraum sehr groß, und mehrere Zielfunktionale, wie etwa die Geschwindigkeit ei-

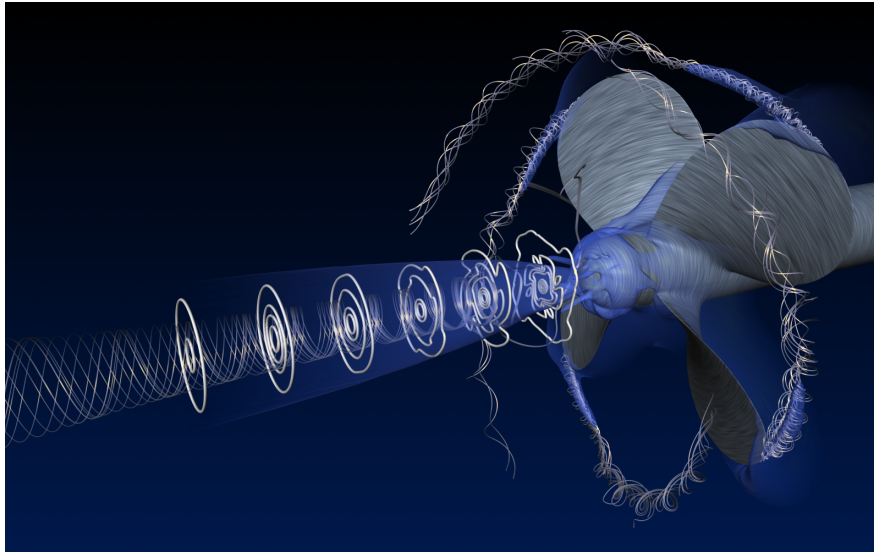


ABBILDUNG 2.31: Strömungsfeld um einen rotierenden Schiffspropeller: Wirbelstrukturen sind durch beleuchtete Stromlinien dargestellt, der Druck durch eine transparente Isofläche sowie der im Abstand zum Propeller geringere Einfluss der Propellergeometrie auf das Geschwindigkeitsfeld durch Isolinien in parallelen Ebenen senkrecht zur Propellerachse. (Daten von INSEAN, HSVA)

nes Schiffes und der Energieverbrauch, müssen gegeneinander abgewogen werden. Die CFD-Berechnungen für die Bewertung stellen einen Kosten- und Zeitfaktor dar, weshalb mit Hilfe von Expertenwissen der Suchraum vorab weiter eingeschränkt werden muss. Visualisierung ist ein wichtiges Werkzeug, um solches Expertenwissen zu gewinnen. In Abbildung 2.31 sind verschiedene Aspekte der Strömung, die durch einen rotierenden Schiffspropeller verursacht worden sind, zu sehen. Dazu gehören die Spitzenwirbel an den Propellerblättern, die Signatur der Strömung im Nachlauf des Propellers, der erzeugte Druck und die Strömung in unmittelbarer Nähe der Propelleroberfläche [2]. Die Kenntnis der dreidimensionalen Strömungsstruktur hilft dem Experten, die Optimierung des Propellers gezielt zu steuern.

Im Berichtszeitraum wurden Datenstrukturen und Visualisierungsalgorithmen in Amira dahingehend erweitert, dass Resultate auf adaptiv verfeinerten unstrukturierten Hexaedergittern mit hängenden Knoten (vgl. Abbildung 2.32) untersucht werden können.

### Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

**Pfadlinien-basierte Topologie von Strömungen** (Tino Weinkauff, Hans-Christian Hege; Kooperation: Holger Theisel, Universität Bielefeld; Helwig Hauser, University of Bergen, Norwegen; Helmut Doleisch, Kresimir Matkovic, VRVis Wien, Österreich; Kuangyu Shi, Hans-Peter Seidel, Max-Planck-Institut für Informatik, Saarbrücken)

Am ZIB wurden bisher topologische Methoden im Rahmen der Strömungsvisualisierung zur Klassifikation des Verhaltens von Stromlinien angewendet. Ziel der Forschungsarbeit ist es, das Verhalten von Pfadlinien zu klassifizieren [4].

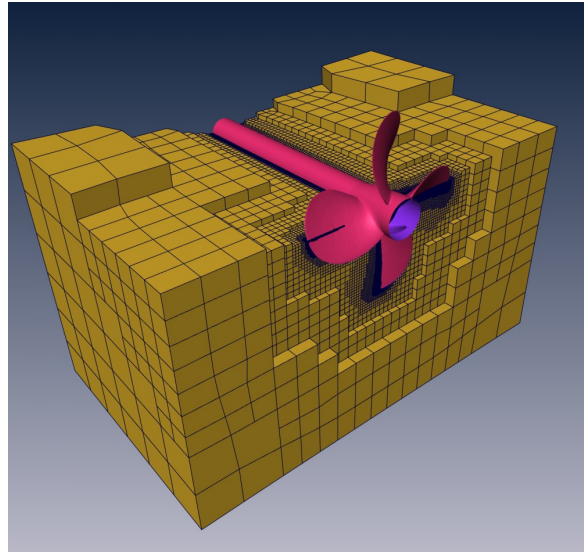


ABBILDUNG 2.32: Rechengebiet um einen Propeller, bestehend aus einem adaptiv verfeinerten unstrukturierten Hexaedergitter mit hängenden Knoten (nur ein Teil des Gitters ist dargestellt). (Daten von HSVA)

**Kritische Punkte von Feldern aus Punktladungen** (Tino Weinkauff, Hans-Christian Hege; Kooperation: Nelson Max, Lawrence Livermore National Laboratory, USA)

In Naturwissenschaft und Technik werden viele Felder aus Quellen erzeugt, die als punktförmig angenommen werden können (z. B. elektrische Felder durch Elektronen oder Gravitationsfelder durch sphärisch symmetrische Körper). Es wurde ein Verfahren entwickelt, das für derartige Felder *alle* kritischen Punkte findet und so garantiert vollständige Darstellungen der Feldtopologie ermöglicht.

**Publikationen**

- [1] A. Duffy, S. Harries, J. Marzi, C. Petz, Z. Wu: *VIRTUE: integrating CFD ship design*, in Proc. 7th International Conference on Hydrodynamics, Theory and Applications (ICHDT), S. 615–624, 2006.
- [2] C. Petz, T. Weinkauff, H. Streckwall, F. Salvatore, B.R. Noack, H.-C. Hege: *Vortex Structures at a Rotating Ship Propeller*, Entry from the 24th Annual Gallery of Fluid Motion exhibit, held at the 59th Annual Meeting of the American Physical Society, Division of Fluid Dynamics, Tampa, November 2006.
- [3] J. Sahner, T. Weinkauff, N. Teuber, H.-C. Hege: *Vortex and Strain Skeletons in Eulerian and Lagrangian Frames*, IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics (zur Veröffentlichung akzeptiert).
- [4] K. Shi, H. Theisel, T. Weinkauff, H. Hauser, H.-C. Hege, H.-P. Seidel: *Path Line Oriented Topology for Periodic 2D Time-Dependent Vector Fields*, Proc. Eurographics/IEEE VGTC Symposium on Visualization (EuroVis '06), Lisbon, Portugal, S. 139–146, 2006.

- [5] H. Theisel, T. Weinkauff, H.-C. Hege, H.-P. Seidel: *On the Applicability of Topological Methods for Complex Flow Data*, Proc. TopoInVis 2005, Springer Verlag (im Druck).
- [6] T. Weinkauff, H. Theisel, H.-C. Hege, H.-P. Seidel: *Topological Structures in Two-Parameter-Dependent 2D Vector Fields*, Computer Graphics Forum 25(3), Eurographics 2006, Vienna, Austria, S. 607–616, 2006.
- [7] T. Weinkauff, J. Sahner, H. Theisel, H.-C. Hege, H.-P. Seidel: *A Unified Feature Extraction Architecture*, in Proc. Active Flow Control 2006, Berlin, Germany, September 27-29, 2006
- [8] T. Weinkauff, H. Theisel, H.-C. Hege, H.-P. Seidel: *Feature Flow Fields in Out-of-Core Settings*, Proc. TopoInVis 2005, Springer Verlag (im Druck).

### 2.2.6 Virtuelle Labore

Integrierte, visuell unterstützte Softwaresysteme zur Datenanalyse, *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 Labors für die Anwendungsgebiete Astrophysik, Landschaftsplanung, Neuroanatomie und Pflanzenbiologie vorgestellt.

#### Virtuelles Astrophysiklabor

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

**Kooperationspartner:** Luciano Rezzolla, Albert-Einstein-Institut, Potsdam; Tom Abel, Kavli Institute for Particle Astrophysics and Cosmology (KIPAC), Stanford Linear Accelerator Center, (SLAC) Stanford, USA ; Ed Seidel, Louisiana State University, Baton Rouge, USA

**Förderung:** Max-Planck-Gesellschaft

Interaktive, photorealistische Visualisierungsverfahren spielen eine wichtige Rolle bei der Interpretation astrophysikalischer Simulationen. Heutzutage ist die Astrophysik, insbesondere die Kosmologie, vermutlich stärker als jedes andere wissenschaftliche Forschungsgebiet, auf numerische Simulationen angewiesen, da für die meisten Forschungsprobleme keine analytische Lösungen bekannt und direkte Experimente nicht durchführbar sind. Um diese Simulationen zu interpretieren und zu verifizieren, ist es wichtig, die Resultate mit beobachteten Bilddaten zu vergleichen. Photorealistische Visualisierung bietet eine mögliche Lösung.

Adaptive Multi-Level-Verfahren sind für astrophysikalische Problemstellungen häufig zwingend, da sehr viele unterschiedliche Längenskalen in Betracht gezogen werden müssen. Ein Beispiel ist die Simulation der Entstehung stellarer Objekte im Universum, wobei Protogalaxien mit einem Durchmesser von mehr als 10.000 Lichtjahren in bestimmten Regionen mit einer Genauigkeit von wenigen Lichtstunden aufgelöst werden müssen. Ein spezieller adaptiver Ansatz zur Lösung partieller Differentialgleichungen, der in der numerischen Astrophysik häufig verwendet wird, ist *Structured-Adaptive-Mesh-Refinement (SAMR)*. Dieser Ansatz kombiniert die Vorteile strukturierter Gitter mit denen lokaler Gitterverfeinerung.

Im betrachteten Projektabschnitt wurde ein GPU-basierter Raycasting-Algorithmus entwickelt und implementiert, der interaktives Volume-Rendering hochauflöster SAMR-Daten

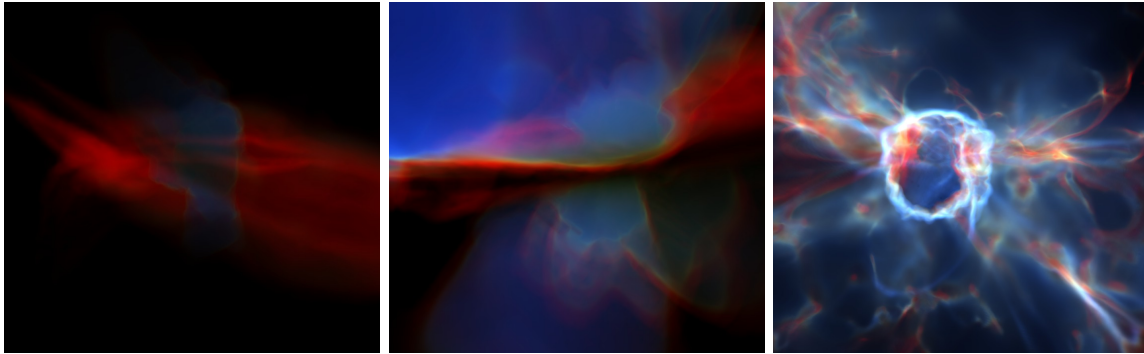


ABBILDUNG 2.33: Drei Zeitschritte einer Simulation zur Entstehung der ersten Galaxien und Sterne im Universum. Die dunklen Bereiche im mittleren Bild resultieren von nicht-leuchtenden Gasverteilungen, die die dahinterliegende Strahlung vollständig absorbieren.

ermöglicht [4]. Im Gegensatz zu ebenfalls interaktiven, texturbasierten *Volume-Rendering*-Ansätzen entstehen bei diesem Verfahren keine Bildfehler aufgrund zu geringer Genauigkeit des Bildspeichers und veränderlicher Sample-Abstände in Bereichen mit variierender Gitterauflösung.

Ferner wurde ein physikalisch motiviertes Beleuchtungsmodell entwickelt und in den Raycasting-Ansatz integriert, um gegebene Temperatur- und Dichtefelder an jedem Punkt im Datenvolumen auf Farb- und Transparenzwerte abzubilden. Die Farbemission wird hierzu mithilfe des Planckschen Strahlungsspektrums berechnet, während die Absorption durch die frequenzabhängige Rayleighstreuung modelliert wird (Abb. 2.33).

### Landschaftsvisualisierung

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

**Kooperationspartner:** Wieland Röhrich, Institut für Landnutzungssysteme und Landschaftsökologie, Zentrum für Agrarlandschaftsforschung (ZALF) e. V., Müncheberg; Klaus Müller, Astrid Artner, Institut für Sozioökonomie am ZALF Müncheberg; Hans Pretzsch, Stefan Seifert, Lehrstuhl für Waldwachstumskunde, TU München; Oliver Deussen, Carsten Colditz, Institut für Computergrafik und Medieninformatik, Universität Konstanz

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

Der Schwerpunkt Landschaftsvisualisierung beschäftigt sich primär mit der interaktiven Darstellung von Vegetation und von GIS-Daten. Das Hauptanwendungsgebiet ist die Landschaftsplanung und die Landschaftsarchitektur. Probleme stellen die Erzeugung einer realistisch wirkenden Vegetation aus nur groben Beschreibungen (etwa: „Wald des Typs ...“, ohne Informationen über die Positionen und Arten der einzelnen Bäume) sowie die morphologische Komplexität und Vielzahl der Pflanzen dar.

In dem seit August 2005 laufenden Projekt SILVISIO, einem Forschungsverbundvorhaben in den Bereichen Waldwahrnehmung, Waldsimulation und Landschaftsvisualisierung, wurde, aufbauend auf dem Vorgängerprojekt Lenné3D, das System Biosphere3D zur interaktiven 3D-Landschaftsvisualisierung entwickelt. Der Schwerpunkt lag hierbei darin, Gelände und Vegetation beliebiger Größe möglichst realitätsnah darzustellen. Dazu wurde ein Verfahren

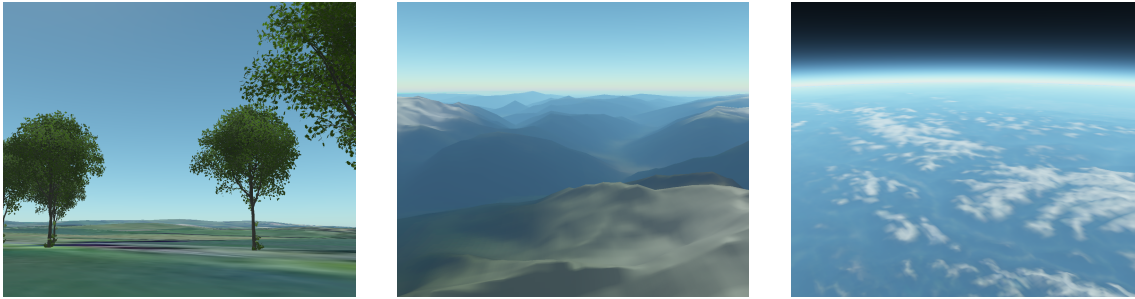


ABBILDUNG 2.34: Physikalisch plausible Computergrafik am Beispiel der Erdatmosphäre: Durch ein physikalisches Lichtstreuungsmodell können atmosphärische Effekte für jede Kameraposition in Echtzeit berechnet werden.

entwickelt, das das Terrain ganzer Planeten unter Nutzung moderner GPU interaktiv auf gängigen PCs anzeigen kann [1]. Die Plausibilität der Computergrafik wurde durch ein physikalisches Lichtstreuungsmodell für atmosphärische Effekte verbessert (s. Abbildung 2.34). Biosphere3D ermöglicht es, die aus dem Lenné3D-Projekt bekannten Vegetationsdaten zu visualisieren.

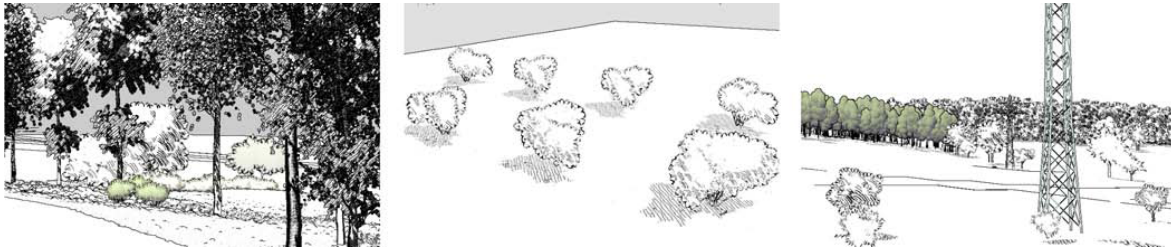


ABBILDUNG 2.35: Nicht-photorealistisches Rendering: Die skizzierten Bilder werden interaktiv aus gegebenen 3D-Daten errechnet.

Weiterhin wurde der Lenné3D-Player um eine frei konfigurierbare skizzenhafte Darstellung erweitert (s. Abbildung 2.35) [2]. Der Benutzer kann interaktiv Parameter wie Abstraktionsgrad, Detailgenauigkeit und Strichstärke einstellen. Dabei kann die Szene so strukturiert werden, dass verschiedene Vegetationsgruppen visuell unterschiedlich dargestellt werden.

### Virtuelles Neurolabor

**Bearbeitet von:** Vincent Dercksen, Anja Kuß, Maro Bader, Hans-Christian Hege

**Kooperationspartner:** Randolf Menzel, Sabine Krofczik, Neurobiologie, FU Berlin; Bert Sakmann, MPI für medizinische Forschung, Heidelberg; Alexander Borst, MPI für Neurobiologie, Martinsried

**Förderung:** Deutsche Forschungsgemeinschaft

Populationsgemittelte Atlanten bilden Referenzsysteme, mit denen neurobiologische Daten zur Erforschung von Lern- und Verhaltensmustern räumlich korrekt geordnet und in ihrem räumlichen Zusammenhang analysiert werden können [8].

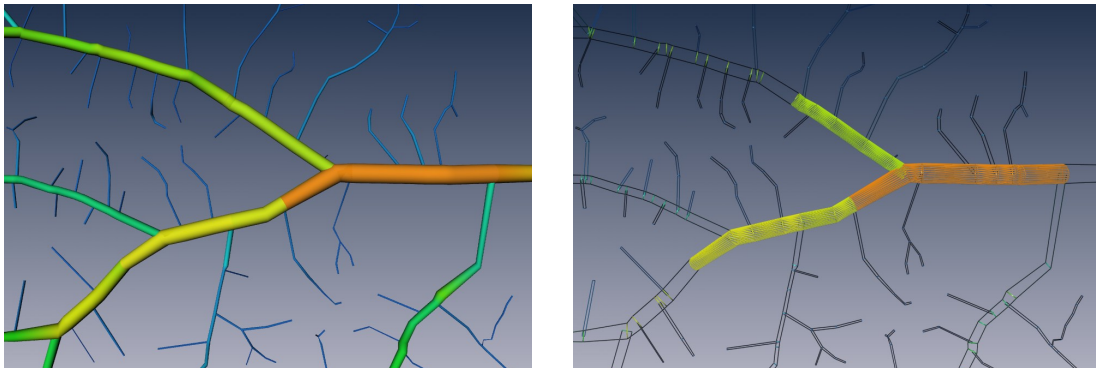


ABBILDUNG 2.36: Links: Darstellung eines Liniendatensatzes mit einem schnellen Hybridzeicherverfahren für sich verzweigende Linien. Rechts: Verdeutlichung der Bereiche des Datensatzes in denen die rechteckigen Billboards mit Zylindern überdeckt werden, um grafische Artefakte an Verzweigungspunkten zu vermeiden.

Aus dem Vergleich von anatomischen Strukturen und Funktionen des Gehirns verschiedener Individuen oder verschiedener Entwicklungsstufen eines Individuums und aus den unterschiedlichen Bildgebungsmodalitäten ergeben sich große Mengen von Bilddaten.

Im abgeschlossenen BMBF-Projekt „Virtual NeuroLab“ wurden Methoden zur Generierung oberflächenbasierter Atlanten von Insektengehirnen entwickelt. Aufbauend darauf wurden die Verfahren verallgemeinert, neue Anwendungsgebiete erschlossen und zusätzliche neuronale Strukturen in Atlanten integriert. Des Weiteren erfolgte eine Einführung von strukturellen, geometrischen und ontologischen Hierarchien, um die hierarchische Organisation neuronaler Strukturen zu repräsentieren.

Methodisch wurde das Virtuelle Neurolabor im Bereich Geometrie- und Bilderzeugung verbessert. Im Hinblick auf eine hierarchische Repräsentation der Daten wurden die Vereinfachung von Dreiecksnetzen und das im letzten Jahr verbesserte Remeshing (siehe S. 55) in die Protokolle zur Atlasgenerierung und zur Integration von Substrukturen aufgenommen. Zusätzlich wurde die Neuronendarstellung durch hardware-unterstütztes Rendering wesentlich beschleunigt (siehe Abbildung 2.36).

In Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe Menzel konnten die bestehenden Atlanten um zusätzliche Strukturen ergänzt werden. So wurde dem Atlas des Fliegengehirns ein mittleres Modell der thorakalen Ganglien hinzugefügt, das den Ausgangspunkt für die Analyse des gesamten thorakal-abdominalen Nervensystems der Fliege bildet.

Um funktionelle und morphologische Eigenschaften des olfaktorischen Systems der Honigbiene zu untersuchen, wurden olfaktorische Projektionsneurone in den vorliegenden Honigbienenatlas integriert. Mit Hilfe des Atlanten konnte gezeigt werden, wie Duftkomplexität und Duftidentität in verschiedenen Kanälen kodiert werden und die Morphologie der Neurone alters- und geruchsabhängigen plastischen Veränderungen unterliegt.

Parallel dazu wurde ein Kooperationsprojekt mit dem MPI für medizinische Forschung in Heidelberg (AG Sakmann) und dem MPI für Neurobiologie (AG Borst) zur Erstellung eines 3D-populationsbasierten Atlas des somatosensorischen Kortexes vorbereitet. In diesen Atlas sollen aus Bilddaten rekonstruierte Neurone integriert und somit die Erforschung von neuronalen Verschaltungen ermöglicht werden. Dazu sollen am ZIB Algorithmen entwickelt

werden, die es ermöglichen, komplexe neuronale Netze zu rekonstruieren und darzustellen. Das Projekt wurde Anfang 2007 bewilligt.

### **Virtuelles Pflanzenbiologielabor**

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

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

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

Ziel des Projektes *Erkennung und Analyse räumlich-zeitlicher Entwicklungsmuster* ist es, effektive und effiziente Algorithmen und Werkzeuge zur Rekonstruktion von 3D-Pflanzenmodellen aus hochaufgelösten Serienschnitten zu entwickeln. Auf Basis solcher 3D-Modelle soll ein vierdimensionaler Atlas erstellt werden, in den experimentelle Daten, wie z. B. Genexpressionsmuster, raumzeitlich referenziert eingetragen werden können. Die Bilddaten sind aufgrund der aufwendigen manuellen Präparation mit vielerlei Artefakten behaftet. Außerdem macht die Größe der Datensätze Out-of-core-Verfahren erforderlich.

Alle Schritte zur Modellerstellung wurden im Rahmen des 3D-Visualisierungssystems Amira implementiert und erfolgreich zur Erstellung von 3D-Modellen von Gerstenkörnern eingesetzt [7]. Die Verarbeitungsschritte sind im Detail: Zusammensetzung sowie rigide und elastische Registrierung der Schnittbilder, Bildsegmentierung, Rekonstruktion der Außenfläche und der inneren Trennflächen, Glätten und schließlich das Vereinfachen der resultierenden Polygonmodelle.

Im Jahr 2006 wurde die Software zur Modellerstellung weiter verbessert. Die für Out-of-core-Datensätze sehr zeitaufwendige elastische Registrierung der Schnittbilder wurde erheblich beschleunigt, einerseits durch Parallellisierung, andererseits durch Minimierung der Anzahl von zeitaufwendigen Festplattenzugriffen. Des Weiteren wurde die Flächenrekonstruktion aus Segmentierungsdaten, deren Umfang den Hauptspeicher übersteigt, ermöglicht, so dass die arbeitsintensive Aufteilung in Datenblöcke und die damit einhergehende Datenverwaltung überflüssig wird (siehe 2.2.6). Das Modul zur starren Alignment wurde angepasst, um die Benutzerfreundlichkeit, Stabilität und Interaktivität auch bei der Verarbeitung von sehr großen Datensätzen zu gewährleisten. Zum Beispiel werden die orthogonalen Seitenansichten zur visuellen Kontrolle des Alignmentstatus jetzt nebenläufig erzeugt, um sie von der Nutzerinteraktion zu entkoppeln.

Es wurden erste Ergebnisse bei der Integration von Genexpressionsmarkierungen in 3D-Modellen erreicht. Da die Experimentdaten von einem anderen Individuum als dem 3D-Modell stammen, müssen die Daten zunächst affin und elastisch registriert werden. Die transformierten Genexpressionsmuster können anschließend in das Modell integriert werden (siehe Abbildung 2.37). Die Integration von Daten aus unterschiedlichen Experimenten in ein Referenzsystem bietet Biologen die Möglichkeit, bisher nicht zugängliche räumliche und raumzeitliche Korrelationen zwischen beliebigen experimentell zugänglichen Größen aufzufinden.



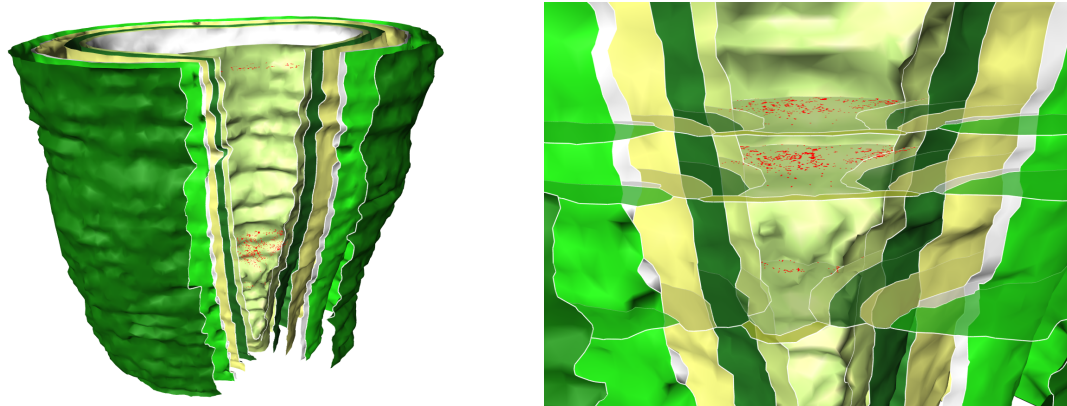


ABBILDUNG 2.37: Integration mehrerer Schnittbilder mit Genexpressionsmarkierungen in einen Teil eines 3D-Gerstenkornmodells (Daten: S. Gubatz).

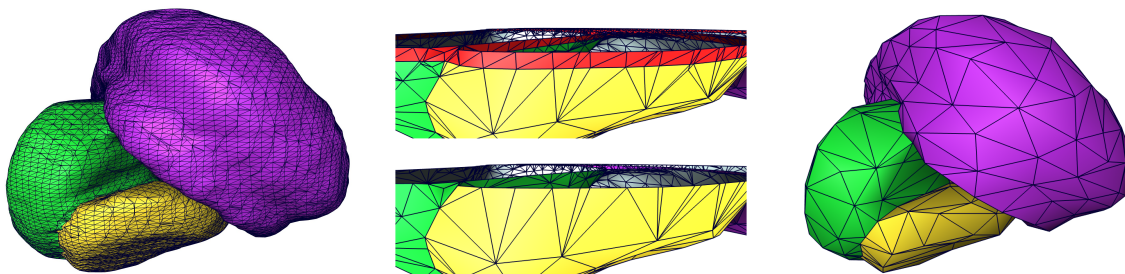


ABBILDUNG 2.38: Simultane Flächenerzeugung und -simplifizierung. Links: Initiales, fein aufgelöstes Oberflächenmodell. Mitte: Progressive Vereinfachung der Oberfläche. Rechts: Endergebnis nach vollständiger Vereinfachung.

### Zusammenfassung weiterer Aktivitäten

#### Simultane Flächenerzeugung und -simplifizierung für Out-of-core-Daten (Vincent Dercksen, Maria Gensel, Hans-Christian Hege)

Zur Erstellung von 3D-Oberflächenmodellen aus den Bilddaten biologischer Objekte müssen die Bilddaten segmentiert, die segmentierten Regionen klassifiziert sowie die zwischen den Regionen befindlichen Trenn- und Außenflächen konstruiert werden. Die räumliche und zeitliche Auflösung der modernen Bildgebungsverfahren wächst derzeit so schnell, dass der Datenumfang die heutigen Hauptspeicherkapazitäten häufig übersteigt. Die Daten müssen dann *out-of-core* verarbeitet, und die Dreiecksanzahl der erzeugten 2D-Flächen muß durch Vereinfachungsverfahren erheblich reduziert werden.

Im Berichtszeitraum wurde ein Verfahren implementiert, das aus segmentierten *Out-of-core*-Daten geometrisch vereinfachte Oberflächen erzeugt. Hierzu werden in einem iterativen Prozess schichtweise Dreiecke mit einem verallgemeinerten *Marching-Cubes*-Verfahren generiert [3]. Die Dreiecke einer Schicht werden einem *Streaming Buffer* hinzugefügt (Abbildung 2.38 Mitte). Das Dreiecksnetz im Puffer wird durch wiederholte Kantenkollabierung vergrößert, bis eine vorgegebene Fehlerschranke oder Dreieckszahl erreicht ist. Diese Schritte werden wiederholt, bis alle Schichten verarbeitet sind (Abbildung 2.38). Falls die Ergebnis-

fläche zu groß für den Hauptspeicher ist, können Dreiecke, die aufgrund der Vorgaben nicht weiter vereinfacht werden können, am Ende jeder Iteration aus dem Puffer entfernt und auf die Festplatte geschrieben werden.

### Interaktive Bearbeitung von Kurven auf Dreiecksnetzen (Britta Weber, Antonia Wittmers, Stefan Zachow, Hans Lamecker, Hans-Christian Hege)

Bei der Analyse und der Bearbeitung von Oberflächen sind häufig in die Flächen eingebettete Pfade interaktiv zu manipulieren, u. a. zur Spezifikation von korrespondierenden Oberflächenregionen, etwa beim „Morphing“, oder zur Vermessung von Strecken, oder zur Definition von Schnittlinien, etwa für die Operationsplanung an virtuellen Patienten (siehe S. 43, Abschnitt 2.2.3):

Im Berichtszeitraum wurde der in Amira implementierte Editor zur interaktiven Bearbeitung von Kurven auf Dreiecksnetzen um diverse Funktionen erweitert. So erfolgte eine Verbesserung der existierenden Algorithmen zur Pfadgenerierung. Unter anderem wurde ein effizienter Algorithmus zur Berechnung von lokal-kürzesten Verbindungen zwischen zwei Punkten auf einer Oberfläche auf Basis von [5] implementiert (Abb. 2.39 Mitte) und der Dijkstra-Algorithmus so modifiziert, dass er auch Kantengewichte berücksichtigt (Abb. 2.39 rechts). Des Weiteren können Pfade nun auch frei von vorgegebenen Strategien erzeugt werden, beispielsweise als Schnittkurve zwischen zwei Flächen oder durch Freihandzeichnen. Zusätzlich wurde ein Verfahren zur Projektion von Raumkurven auf Oberflächen implementiert. Dies erlaubt eine Rückführung von Pfaden nach komplexen Gittermanipulationen, wie z. B. Vergrößerungen oder kompletten Neuvernetzungen (s. S. 55). Geplant sind Verfahren zur Verbindung von Oberflächenpunkten unter Berücksichtigung von markanten geometrischen Merkmalen, wie etwa „Kämmen“ oder „Talsohlen“.

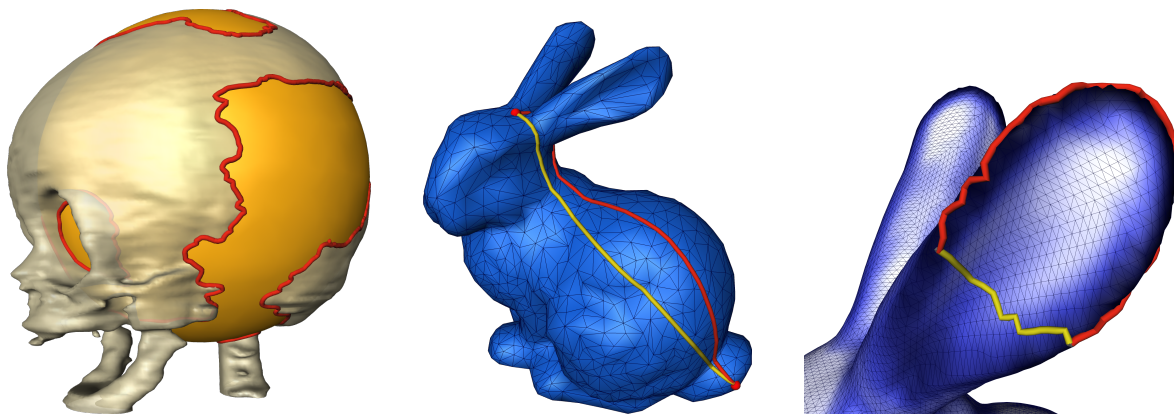


ABBILDUNG 2.39: Links: Schnittkurven eines Schädels mit einer Kugel. Mitte: Lokale Geodäten (rot) lassen sich schneller berechnen, sind aber nicht immer die kürzesten Pfade (gelb). Rechts: Ein mit krümmungsgewichtetem Dijkstra-Algorithmus berechneter Pfad (rot) passt sich dem Kamm an (gelb: ohne Krümmungsgewichtung).

**Effiziente Darstellung von Linien auf moderner Grafik-Hardware** (Maro Bader, Steffen Prohaska, Anja Kuss, Vincent Dercksen; Kooperation: Carsten Stoll, MPI für Informatik, Saarbrücken; Stefan Gumhold, TU Dresden)

Ziel ist es, komplexe neuronale Netze oder Gefäßsysteme grafisch interaktiv darzustellen. Dazu wurde das Rendern mit Hilfe von auf dem Grafikchipsatz arbeitenden Programmen, sogenannten „Shadern“, beschleunigt.

Der auf texturierten Billboards basierende Ansatz von Stoll und Gumhold [6] wurde so weiterentwickelt, dass die an den Verzweigungspunkten auftretenden Artefakte verschwinden. Das neue Verfahren wurde mit dem ursprünglichen durch Angleichung der Farb- und Normalenberechnung zu einem schnellen und artefaktfreien Hybridverfahren kombiniert.

### Publikationen

- [1] M. Clasen und H.-C. Hege, *Terrain rendering using spherical clipmaps*, EuroVis 2006 – Eurographics/IEEE VGTC Symposium on Visualization, Seiten 91–98, 2006.
- [2] L. Coconu, O. Deussen, and H.-C. Hege *Real-time pen-and-ink illustration of landscapes*, in: NPAR '06: Proceedings of the 3rd International Symposium on Non-Photorealistic Animation and Rendering, Seiten 27–35, New York, USA, 2006.
- [3] H.-C. Hege, M. Seebaß, D. Stalling and M. Zöckler, *A Generalized Marching Cubes Algorithm Based on Non-Binary Classifications*, Preprint SC-97-05, ZIB, 1997
- [4] R. Kaehler, J. Wise, T. Abel and H.-C. Hege, *GPU-Assisted Raycasting of Cosmological Adaptive Mesh Refinement Simulations*, in: Proceedings of Volume Graphics 2006, Eurographics/IEEE VGTC 2006, Seiten 103–110, Boston, USA, 2006.
- [5] D. T. Lee and F. P. Preparata, *Euclidean Shortest Paths in the Presence of Rectilinear Barriers*, Networks, 14, pp. 393–410, 1984.
- [6] C. Stoll, S. Gumhold, and H.-P. Seidel, *Visualization with stylized line primitives*, in Proc. IEEE Visualization 2005, Seiten 695–702, Minneapolis, USA, 2005.
- [7] V. Dercksen, C. Brüß, D. Stalling, S. Gubatz, U. Seiffert and H.-C. Hege, *Towards Generation of 3D Biological Models on Basis of Serial Sections*, submitted to: IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics, 2006.
- [8] A. Maye, T. H. Wenckebach and H.-C. Hege, *Visualization, Reconstruction, and Integration of Neuronal Structures in Digital Brain Atlases*, Int. Journal of Neuroscience, 116(4), Seiten 431–459, 2006.

### 2.2.7 Ganzzahlige Optimierung

Die ganzzahlige Optimierung beschäftigt sich mit Problemen, bei denen diskrete Entscheidungen getroffen werden müssen. Zum Beispiel kann eine Fabrik entweder gebaut werden oder nicht, ein Speditionsunternehmen kann entweder 3 oder 4, aber keine 3,7 neue LKW anschaffen, für Datenleitungen in der Telekommunikation stehen nur bestimmte diskrete Kapazitätsstufen wie 64 KBit, 2 MBit, 34 MBit usw. zur Auswahl. Viele solche Probleme aus Bereichen wie Telekommunikation, Verkehr und Logistik lassen sich als sogenannte *gemischt-ganzzahlige Programme* (mixed integer programs, MIPs) formulieren.

Auf Grund des zunehmenden Rationalisierungsdrucks und der vielfältigen praktischen Probleme wird es immer wichtiger neue Problemstellungen in einfacher Weise zu modellieren und schnell akzeptable Lösungen finden zu können. Das Ziel ist MIPs so weit wie möglich mittels eines allgemeinen, von der Problemstruktur unabhängigen Algorithmus lösen zu können. Die enorme Anwendungsbreite stellt jedoch große Anforderungen an die Lösungsalgorithmen. Der Hauptaugenmerk des Schwerpunkts *Ganzzahlige Optimierung* liegt derzeit auf der Erforschung von Methoden, die die grundlegenden Lösungsalgorithmen weiter verbessern.

Die Projekte des Schwerpunkts *Ganzzahlige Optimierung* ordnen sich in diesen Rahmen wie folgt ein. Das Projekt *Gemischt-ganzzahlige Programmierung* verbessert die Algorithmen zur allgemeinen Lösung von MIPs – insbesondere den MIP-Löser SCIP. *Symmetrien in der ganzzahligen linearen Optimierung* behandelt die besonderen Schwierigkeiten, die bei der Lösung hochgradig symmetrischer ganzzahliger Optimierungsprobleme auftreten. *Unzulässige lineare Ungleichungssysteme* treten in interessanten Anwendungen auf und erfordern spezielle Algorithmen z. B. zum Auffinden von maximal-zulässigen Teilsystemen.

Des Weiteren wird innerhalb des Schwerpunkts die folgende Software entwickelt, siehe Abschnitt 6.3.

- Die *Modellierungssprache Zimpl* beschleunigt die Umsetzung von mathematischen Modellen zu Eingaben für MIP-Löser.
- Der *LP-Löser SoPlex* dient zum Lösen von linearen Programmen, die unter anderem bei der Lösung von gemischt-ganzzahligen Programmen als Unterprobleme auftreten.
- Der *Basisverifizierer perPlex* erlaubt die Bestimmung von exakten Optimallösungen von linearen Programmen.
- Das *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.

Wie in der Vergangenheit haben wir auch 2006 besonderes Gewicht auf die Vermittlung diskreter Mathematik nach außen gelegt. Hauptaktivitäten waren hier im Rahmen des MATHEON-Projektes *Combinatorial Optimization at Work* ein zweiwöchiger Kurs während der Sommerakademie Görlitz mit 18 Teilnehmern der Studienstiftung des deutschen Volkes und ein zweiwöchiger Workshop am Morningside Center of Mathematics der chinesischen Akademie der Wissenschaften in Peking mit 50 Teilnehmern aus ganz China. 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.

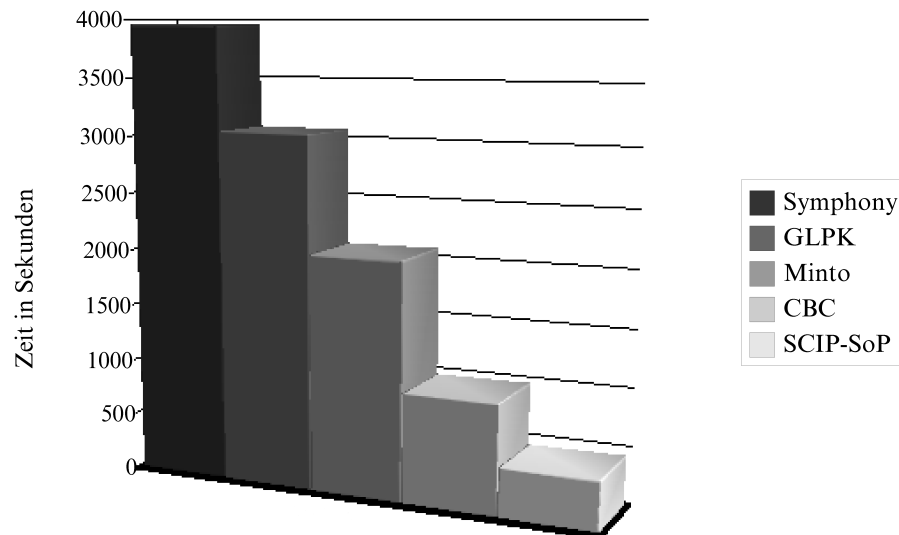


ABBILDUNG 2.40: Mittlere Laufzeit verschiedener nicht-kommerzieller IP-Löser. Betrachtet wurden 56 Instanzen, die Daten stammen von der Webseite von Mittelman [7].

## Lineare, ganzzahlige und Constraint-Programmierung

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

**Kooperationspartner:** Alexander Martin, Technische Universität Darmstadt; Christoph Helmberg, Technische Universität Chemnitz

**Förderung:** Siemens AG, München

Eine Vielzahl von Problemen der kombinatorischen Optimierung lassen sich als *gemischt-ganzzahliges Programm (MIP)* formulieren. Zwei bekannte Techniken zur Lösung von MIPs sind Schnittebenenverfahren und Branch-and-bound unter Verwendung von LP-Relaxierungen. Diese beiden Methoden lassen sich zu einem *Branch-and-cut*-Verfahren kombinieren, das die Grundlage für alle gängigen MIP-Löser bildet.

Zugleich werden Branch-and-bound-Techniken auch zur Lösung von *Constraint Programs (CP)* eingesetzt, die eine Oberklasse der MIPs darstellen und sich durch eine allgemeinere Modellierungsmethodik auszeichnen.

Die in der Abteilung Optimierung entwickelte Software SCIP [1] bietet hierfür zweierlei Anwendungen: Zum einen verbindet es MIP- und CP-Techniken und kann als Branch-cut-and-price-Framework zur Entwicklung problemspezifischer Codes eingesetzt werden. Zum anderen ist es durch die bereits integrierten Standard-Plugins der derzeit schnellste, nicht-kommerzielle MIP-Löser (siehe Abbildung 2.40).

Ebenfalls am ZIB entwickelt wurde die Software SoPlex (siehe Abschnitt 6.3), die *Lineare Programme (LPs)* löst und insbesondere in SCIP zum Lösen der LPs integriert werden kann, sowie die Modellierungssprache Zimpl. In Zimpl beschriebene Modelle können direkt in SoPlex oder SCIP eingelesen werden. Zimpl, SoPlex und SCIP bilden gemeinsam ein umfassendes, für akademische Zwecke frei verfügbares Paket zur linearen und ganzzahligen Optimierung; in dieser Form ist dies einzigartig.

Im Berichtszeitraum wurde die Implementierung und Untersuchung von Schnittebenen und Primalheuristiken durch zwei Diplomarbeiten [9, 2] weiter vorangetrieben. Die Qualität der im Vorjahr bereits integrierten Heuristiken und Schnittebenen konnte durch die in diesem Rahmen durchgeführten Untersuchungen nochmals verbessert werden.

Nachdem 2005 die erste Version von SCIP auf <http://scip.zib.de> öffentlich zur Verfügung gestellt wurde, konnten im Laufe des Jahres 2006 diverse Fehler beseitigt werden. Die numerische Stabilität wurde erhöht, Zeitlimits werden inzwischen wesentlich besser beachtet, es gab Verbesserungen im Presolving, und die Konfliktanalyse wurde auf allgemeine Klauseln ausgedehnt. Zur besseren Anbindung an andere Programme wurde ein LP-Interface zu XPress und Mosek geschaffen, Zimpl wurde in SCIP integriert, Branch-and-generate-Verfahren, Lazy Constraints und User Cuts werden unterstützt.

Die Separierer für die Klassen der c-MIR-Ungleichungen und der binären Knapsackungleichungen konnten durch neue Separierungsheuristiken effizienter gestaltet werden. Des Weiteren wurde ein neuer Separierer für das 0-1-Single-Node-Flow-Problem implementiert.

Zum frühzeitigen Auffinden zulässiger Lösungen wurden weitere Rundeheuristiken hinzugefügt, namentlich „Shifting“, „Intshifting“ und die Wurzelheuristik „RENS“ (siehe [2]). Weiterhin wurde die Koordination zwischen den einzelnen Heuristiken verbessert.

Die Laufzeit von SCIP als MIP-Löser konnte im Jahr 2006 um über 50 % verbessert werden. Damit ist SCIP 0.90 mit CPLEX als LP-Löser etwa 20 % langsamer als CPLEX 9.13 und etwa 75 % langsamer als der derzeit schnellste kommerzielle MIP-Löser CPLEX 10.01. Hingegen benötigt SCIP 0.90 mit SoPlex als LP-Löser im geometrischen Mittel nur die Hälfte der Zeit des derzeit zweitschnellsten nicht-kommerziellen MIP-Lösers (siehe [7] und Abbildung 2.40). Im Berichtsjahr fand SCIP als Branch-and-cut-Framework in insgesamt elf institutsinternen und mindestens zehn externen Projekten Verwendung, wurde über 500-mal heruntergeladen und in drei Universitäten zur Lehre eingesetzt.

## Symmetrien in der ganzzahligen linearen Optimierung

**Bearbeitet von:** Timo Berthold, Martin Grötschel, Marc Pfetsch

**Kooperationspartner:** Volker Kaibel, Andreas Loos, Matthias Peinhardt; Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg

**Förderung:** DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt B12

Obwohl Symmetrien in vielen Teilen der Mathematik hochwillkommen sind, können sie in der Formulierung ganzzahliger linearer Programme (IP) deren praktische Lösbarkeit erheblich einschränken. Die Arbeit von IP-Lösern wird auf zweierlei Weise beeinträchtigt. Zum einen wird der Suchraum 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 Symmetrien aufweisen.

Im Berichtszeitraum haben wir ein polyedrisches Verfahren entwickelt, mit dem Symmetrien in sogenannten Zuordnungsstrukturen behandelt werden können [6]. Hierzu betrachtet man 0/1-Matrizen mit genau einer 1 in jeder Zeile. Die Symmetrien zeigen sich durch Permutationen der Spalten der Matrizen. Man betrachtet nun die konvexe Hülle solcher 0/1-Matrizen, die

lexikographisch maximal bezüglich der zeilenweisen Ordnung sind. Diese speziellen Polytope heißen *Orbitope*.

Ein klassisches Beispiel, das eine solche Zuordnungsstruktur enthält, 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. Eine natürliche Modellierung dieses Problems verwendet Binärvariablen, die für jede Kombination von Knoten  $v$  und Farbe  $c$  anzeigen, ob  $v$  mit  $c$  gefärbt wird. Die Symmetrie dieser Formulierung liegt in der Möglichkeit aus jeder Lösung durch Permutation der Farben viele „andere“ Lösungen (einen *Orbit*) zu erhalten, welche die gleiche Struktur und insbesondere die gleiche Anzahl von Farben haben.

Durch die Auswahl der lexikographisch maximalen Matrizen wird nun ein eindeutiger Repräsentant aus jedem Orbit ausgewählt und die Symmetrie auf diese Weise aufgelöst. Für Orbitope konnten wir nun eine vollständige lineare Beschreibung finden [6]. Zudem kann man diese Beschreibung in linearer Zeit separieren. Unser Resultat zeigt in gewissem Sinn, wie man die Lösungsmenge bestmöglich durch Hinzufügen von weiteren Ungleichungen auf ein solches Repräsentantensystem verkleinern kann, indem man sie z. B. zu obiger Formulierung des Knotenfärbungsproblems hinzufügt. Das Zusammenspiel von Knotenfärbungsproblemen und Orbitopen wurde von Yuri Faenza in einem dreimonatigen Gastaufenthalt am ZIB genauer untersucht [3].

Eine etwas andere Methode haben wir für das Graphenpartitionierungsproblem erfolgreich erprobt [5]. In diesem Problem sollen die Knoten eines ungerichteten gewichteten Graphen so in  $k$  Teilmengen partitioniert werden, dass die Summe der Gewichte von adjazenten Knoten innerhalb desselben Teils minimiert wird. Wiederum enthält eine natürliche Formulierung eine Zuordnungsstruktur. Wir haben einen Linearzeit-Algorithmus entwickelt, der zu einem Knoten und zugehöriger Fixierung von Variablen im Branch-and-cut-Baum entscheidet, ob weitere Variablen durch die Orbitop-Struktur fixiert werden können, oder ob der Knoten sogar unzulässig ist. Der Einsatz dieses Verfahrens beschleunigt die Lösung von Graphenpartitionierungsproblemen deutlich – auch im Vergleich zu existierenden Symmetriehandlungsmöglichkeiten in dem kommerziellen IP-Löser CPLEX.

Um die Grundlagen der polyedrischen Strukturen lexikographischer Symmetriebrechung besser zu verstehen, untersuchen wir auch die konvexe Hülle *aller* lexikographisch-maximalen 0/1-Matrizen der Größe  $p \times q$  (ohne Beschränkung der Anzahl der Einsen pro Zeile). Die Ungleichungen, welche zu deren Beschreibung benötigt werden, sind komplizierter. Sie haben insbesondere zahlreiche verschiedene Koeffizienten. Im Berichtszeitraum ist es uns gelungen, eine vollständige Beschreibung für den Fall  $q = 2$  zu bestimmen (in welchem die Polytope bestimmte Knapsack-Polytope sind). Ein Aufsatz dazu ist in Vorbereitung. Wir sind zuversichtlich, diese Resultate auf den Fall beliebiger Werte von  $q$  erweitern zu können.

### Unzulässige lineare Ungleichungssysteme

**Bearbeitet von:** Marc Pfetsch

**Kooperationspartner:** Sadegh Jekar, Volker Mehrmann, Harry Yserentant, TU Berlin

**Förderung:** DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt D18

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

Ein wesentliches NP-schweres 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. MAXFS ist eng verwandt mit dem Problem, eine Lösung eines überbestimmten linearen Gleichungssystems mit möglichst wenig Nicht-Null-Einträgen zu finden. Dieses Problem wurde in der letzten Zeit intensiv im Bereich der Signal- und Bildverarbeitung betrachtet. Hier entspricht die rechte Seite des Gleichungssystems dem Signal bzw. Bild, welches mit Hilfe verschiedener Basen (z. B. Fourier- und Waveletbasen) dargestellt werden kann. Erlaubt man die Auswahl von Vektoren aus unterschiedlichen Basen (erzeugt also ein überbestimmtes System) so kann die Anzahl der benötigten Nicht-Null-Einträge oft drastisch reduziert werden, was z. B. zur effizienteren Verarbeitung der Daten führen kann. Wenn darüber hinaus kleine Abweichungen in der Darstellung erlaubt sind, können weitere Effizienzsteigerungen (in Abwägung mit dem resultierenden Fehler) erreicht werden.

Im Berichtszeitraum haben wir den für MAXFS entwickelten Branch-and-cut-Algorithmus (siehe [8]) zur Berechnung solcher „dünnen Lösungen“ benutzt. Die Implementierung basiert auf dem am ZIB entwickelten Branch-and-cut-Framework SCIP, siehe Abschnitt 6.3. Eine Modifikation des Algorithmus erlaubt zudem die Untersuchung der Eindeutigkeit der Optimalösungen – eine in der Literatur häufig untersuchte Fragestellung. Weiterhin haben wir fünf verschiedene Heuristiken implementiert und verglichen. Diese Methoden stammen aus unterschiedlichen Bereichen der Literatur und wurden an das Problem angepasst bzw. neu entwickelt. Die Ergebnisse zeigen (siehe [4]), dass einige Heuristiken für viele Instanzen sehr gute Ergebnisse liefern, während das sogenannte Basis Pursuit – eine der Standardmethoden in diesem Bereich – im Vergleich schlechtere Ergebnisse liefert.

In dem einjährigen, im November 2006 angelaufenen MATHEON-Projekt „Sparse representation of solutions of differential equations“ (D18) untersuchen wir derzeit, ob die oben beschriebenen Methoden zur effizienteren Lösung von partiellen Differentialgleichungen beitragen können.

## Publikationen

- [1] T. Achterberg, *SCIP – A Framework to Integrate Constraint and Mixed Integer Programming*, Report 04-19, ZIB, 2004.
- [2] T. Berthold, *Primal Heuristics for Mixed Integer Programs*, Diplomarbeit, Technische Universität Berlin, 2006.
- [3] Y. Faenza, *Graph coloring using orbitopes*, Diplomarbeit, Università degli Studi di Roma „Tor Vergata“ (Facoltà di Ingegneria), 2006.
- [4] S. Jokar und M. E. Pfetsch, *Exact and approximate sparse solutions of underdetermined linear equations*, Report 07-05, ZIB, 2007.
- [5] V. Kaibel, M. Peinhardt und M. E. Pfetsch, *Orbitopal fixing*, Proc. Integer Programming and Combinatorial Optimization (IPCO) Conference XII, Springer-Verlag, 2007, Im Druck.
- [6] V. Kaibel und M. E. Pfetsch, *Packing and partitioning orbitopes*, (2007), Erscheint in: Math. Program.



- [7] H. Mittelman, Decision Tree for Optimization Software: Benchmarks for Optimization Software, <http://plato.asu.edu/bench.html>, 2006.
- [8] M. E. Pfetsch, *Branch-and-cut for the maximum feasible subsystem problem*, Report 05-46, ZIB, 2005.
- [9] Kati Wolter, Implementation of Cutting Plane Separators for Mixed Integer Programs, Diplomarbeit, Technische Universität Berlin, 2006.

### 2.2.8 Diskrete Strukturen

In der Regel können praxisrelevante Optimierungsprobleme überhaupt erst dadurch effizient gelöst werden, dass man ihre Struktur analysiert und die gewonnenen Resultate in Algorithmen zu deren Lösung geschickt verwendet. Aus mathematischer Sicht enthalten aber viele Optimierungsprobleme die gleichen oder ähnlichen Grundbausteine. Deshalb haben wir im Bereich der kombinatorischen Optimierung an einer Reihe von Themen gearbeitet, die von grundsätzlichem Interesse sind.

Im Berichtszeitraum wurden u. a. folgende wissenschaftlichen Ergebnisse erzielt:

- Die Ecken und Facetten des Antiblocking-Paars  $QSTAB(\overline{G})$  und  $STAB(G)$  konnten identifiziert werden.
- Die Ecken des *generalized transitive tournament polytope* konnten mit Facetten der unteren Seite des gerichteten Kreispolytops identifiziert werden.
- Es wurden auf Dynamischer Programmierung basierende Algorithmen zur exakten Bestimmung der Baumweite entwickelt.
- Es konnte eine hinreichende Bedingung angegeben werden, so dass ein zufälliges 0/1-Polytop fast sicher  $k$ -nachbarschaftlich ist.

In diesem Schwerpunkt führen wir außerdem das Projekt *Diskrete Mathematik in der Schule* durch, um gezielt Schülern und Lehrern Vorschläge zu unterbreiten, das interessante Feld der Diskreten Mathematik zu erkunden. Im Berichtszeitraum ist vorrangig an der theoretischen Fundierung der innerhalb dieses Projekts entwickelten Unterrichtskonzepte gearbeitet worden. Ferner wurden zwei Wahlmodule zur Diskreten Mathematik für den im Sommer 2006 in Kraft getretenen Berliner Rahmenplan für die Sekundarstufe I erstellt.

#### 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*

Das *Stabile-Mengen-Problem*, die Bestimmung einer stabilen Menge größter Kardinalität oder maximalen Gewichts im Graphen, ist von besonderer Bedeutung für die ganzzahlige Optimierung, da Stabile Mengen eine wichtige Struktur in vielen Anwendungen bilden. Ein besseres Verständnis des *Stabile-Mengen-Polytops*  $STAB(G)$ , der konvexen Hülle der Inzidenzvektoren aller stabilen Mengen des Graphen, führt zu Verbesserungen in Lösern für ganzzahlige Programme.

Alle Facetten von  $\text{STAB}(G)$  sind allerdings im Allgemeinen nicht bekannt. Nur für spezielle Graphenklassen wie etwa die *perfekten Graphen* ist dies der Fall. Ein Graph heißt *perfekt*, wenn für jeden seiner induzierten Untergraphen (einschließlich seiner selbst) die Cliques- und die Färbungszahl übereinstimmen. Für perfekte Graphen gilt  $\text{STAB}(G) = \text{QSTAB}(G)$ , wobei  $\text{QSTAB}(G)$  mittels aller sog. Clique-Bedingungen beschrieben wird. Das Stabile-Mengen-Problem für perfekte Graphen ist in polynomialer Zeit lösbar [15], da es ein polynomiales Separationsverfahren für eine Klasse von Ungleichungen, die alle Clique-Bedingungen enthalten, gibt. Nicht nur das Stabile-Mengen-Problem ist auf diese Art auf perfekten Graphen polynomial lösbar, auch verwandte Probleme wie das *Maximum-Clique-Problem* und das *Knotenfärbungsproblem*.

Da für allgemeine (nicht-perfekte) Graphen keine vollständige Beschreibung des Stabile-Mengen-Polytops vorliegt, sind zusätzliche Informationen zu Facetten und Ecken von  $\text{STAB}(G)$  von Bedeutung. Die Anti-Blocking-Theorie für Polyeder [12, 13] bietet hier einen möglichen Ausweg. Die Polytope  $\text{STAB}(G)$  und  $\text{QSTAB}(\overline{G})$  bilden ein sog. Anti-Blocking-Paar (hier stellt  $\overline{G}$  das Komplement von  $G$  dar). Die Anti-Blocking-Theorie besagt jetzt, dass jede Facette von  $\text{STAB}(G)$  eine Ecke von  $\text{QSTAB}(\overline{G})$  ist. Jedoch ist nicht jede Ecke von  $\text{QSTAB}(\overline{G})$  eine Facette von  $\text{STAB}(G)$ .

Wie in [20, 19] beschrieben, lässt sich diese Aussage verfeinern. Wir haben gezeigt, dass ein Vektor  $a \neq 0$  eine Ecke von  $\text{QSTAB}(\overline{G})$  darstellt genau dann, wenn die Nicht-Null-Koeffizienten eine Facette von  $\text{STAB}(G_a)$  induzieren, wobei  $G_a$  der durch  $a$  induzierte Untergraph von  $G$  ist. Mit diesem Resultat lassen sich verschiedene bekannte Resultate neu beweisen, wie z. B. das Perfekte-Graphen-Theorem [22].

## Baumweite und Kombinatorische Optimierung

**Bearbeitet von:** Arie Koster

**Kooperationspartner:** Hans Bodlaender, Utrecht University, Niederlande; Fedor Fomin, University of Bergen, Norwegen; Alexander Grigoriev, Stan van Hoesel, Bert Marchal, University Maastricht, Niederlande; Dieter Kratsch, University of Metz, Frankreich; Dimitrios Thilikos, National and Capodistrian University of Athens, Griechenland

Viele NP-schwere kombinatorische Probleme unterschiedlichster Herkunft werden mittels Netzwerken oder Graphen modelliert. Oft ist die Baumweite dieser Graphen relativ klein. Die zu der Baumweite gehörende optimale *Baumzerlegung* des Graphen kann deshalb zur Lösung des Optimierungsproblems für recht große Instanzen genutzt werden, welche mit bisherigen Methoden nicht gelöst werden konnten, siehe z. B. [9, 21].

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 der optimalen Baumzerlegung kann etwa das gewichtete Stabile-Mengen-Problem auf Graphen mit beschränkter Baumweite anhand dynamischer Programmierung in polynomieller Zeit gelöst werden (wobei die Baumweite allerdings als Konstante im Exponenten der Laufzeit auftritt). Eine wichtige Voraussetzung für die Verwendung dieses Konzepts ist die Verfügbarkeit einer Baumzerlegung optimaler oder nahezu optimaler Baumweite.

Den Schwerpunkt der Arbeiten im Berichtszeitraum bilden Methoden zur Berechnung optimaler Baumzerlegungen. Obwohl dieses Problem im Allgemeinen NP-schwer ist, gibt es verschiedene Ansätze zur Bestimmung der Baumweite. In einer Diplomarbeit [1] wird das sogenannte

Chordalisierungspolytop zu diesem Zweck untersucht und ein Branch-and-cut-Verfahren auf Graphen mit bis zu 100 Knoten getestet. Zudem kann das Chordalisierungspolytop auch zur Minimierung des Fill-In eines nicht-chordalen Graphen sowie für die Berechnung der gewichteten Baumweite verwendet werden.

In [4] werden theoretische und experimentelle Resultate zur Berechnung der Baumweite mit dynamischer Programmierung (DP) vorgestellt. Ein Algorithmus, basierend auf der DP-Methode von Held und Karp [16] für das Problem des Handelsreisenden, wurde trotz seiner  $\mathcal{O}^*(2^n)$  Laufzeit implementiert (in der  $\mathcal{O}^*$ -Notation werden Faktoren polynomial in  $n$  vernachlässigt). Die Rechenergebnisse zeigen, dass insbesondere der Speicherplatzbedarf des Algorithmus die Berechnung für größere Instanzen unmöglich macht. Aus diesem Grund wurde ein weiterer Algorithmus entwickelt, welcher zwar  $\mathcal{O}^*(2.9512^n)$  Zeit braucht, dafür aber nur polynomiellen Speicherplatz in Anspruch nimmt.

Zusätzlich sollen immer Graph-Reduktionsregeln angewendet werden, die die Baumweite des Graphen nicht beeinflussen, siehe [5, 6, 11].

### 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

Die Bemühungen der vergangenen Jahre, diskrete Mathematik stärker im Schulunterricht zu verankern, zeigten im Berichtszeitraum deutlich Wirkung. In Berlin trat im Sommer 2006 der neue Rahmenlehrplan für die Sekundarstufe I in Kraft, für den im Rahmen dieses Projekts zwei Wahlmodule erstellt wurden. Parallel dazu begann die Zusammenarbeit mit einem Schulbuchverlag, um dort die Erstellung von passenden Schulbuchkapiteln zu unterstützen.

Ein breites Angebot an weiteren Unterrichtsmaterialien soll helfen, den für viele Lehrkräfte ungewohnten Stoff zugänglich zu machen. Es gibt auf den Projektwebseiten einzelne Materialien zum Herunterladen. Fortbildungen werden in verschiedenen Kontexten angeboten, unter anderem sogar für den Elementarbereich. Ein E-learning-Kurs für das Berlin-Brandenburger Landesinstitut für Schule und Medien (LISUM) ist in Arbeit.

Anfang 2007 erscheint das Lehrbuch „Kombinatorische Optimierung erleben“ [17]. 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.

Die im Rahmen des Projektes verfasste Dissertation [23] beschäftigt sich mit der theoretischen Fundierung der entwickelten Unterrichtskonzepte. Ein Aspekt ist die Begründung der Auswahl der Inhalte und der Festlegungen für Notationen. Die historische Entwicklung des Stoffes im Unterricht wurde nachverfolgt und nach Gründen geforscht, warum die Themen nach einem Vorstoß in den 70er Jahren wieder aus dem Unterricht verschwanden. Eine di-

daktische Stoffanalyse liefert Begründungen für die auffällig leichte Zugänglichkeit des Stoffes für Schülerinnen und Schüler. Aus der Analyse der speziellen mathematischen Methoden und der Analyse des didaktischen Potenzials konnten Schlüsse auf sinnvolle Unterrichtsmethoden gezogen werden. Eine größere Anzahl von konkreten Unterrichtsmethoden wurde praktisch erprobt und steht nun interessierten Lehrkräften zur Verfügung. Eine Auswertung von Fragebögen aus dem Unterricht sowie einer Klassenarbeit und von Erarbeitungsprotokollen zeigt eindrucksvoll, dass mit diesen Themen aus der diskreten Mathematik wichtige Kompetenzen gefördert werden können.

Das Projekt endete im April 2006. An der Umsetzung von diskreter Mathematik in den Unterricht wird im Rahmen der Vertretung einer Juniorprofessur an der TU Berlin sowie im MATHEON-Projekt „Visualisierung von Algorithmen“ weiterhin gearbeitet.

### Kreis- und Wege-Polytope mit und ohne Kardinalitätsbeschränkung

**Bearbeitet von:** Rüdiger Stephan

**Kooperationspartner:** Egon Balas, Carnegie Mellon University, Pittsburgh, USA; Volker Kaibel, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg

Kreis- oder Wegepolytope sind die konvexen Hüllen der Inzidenzvektoren von (gerichteten) Kreisen oder Wegen in Graphen (Digraphen). Wenn man nur Kreise oder Wege bestimmter Kardinalitäten zulässt (= Anzahl der Kanten), spricht man von kardinalitätsbeschränkten Kreis- und Wegepolytopen.

Wie bereits im Jahresbericht 2005 beschrieben, besteht ein enger Zusammenhang zwischen *gerichteten* Kreis- und Wegepolytopen, der es erlaubt, facettendefinierende Ungleichungen für das kardinalitätsbeschränkte gerichtete Wegepolytop  $P_{(s,t)\text{-path}}^c(D)$ , definiert auf einem geeigneten Digraphen  $D$ , in facettendefinierende Ungleichungen für das kardinalitätsbeschränkte gerichtete Kreispolytop  $P_C^c(D')$  zu liften [24, 18], wobei  $D'$  der Digraph ist, der durch Kontraktion der beiden Endknoten  $s$  und  $t$  entsteht. Aufgrund dessen wurde insbesondere die Untersuchung von kardinalitätsbeschränkten Wegepolytopen – in Zusammenarbeit mit Volker Kaibel – fortgesetzt. Insgesamt wurden neun Ungleichungsklassen untersucht, sodass selbst für die meisten Spezialfälle IP-Formulierungen angegeben werden können, deren Ungleichungen facetteninduzierend sind. Ferner wurden diese Ungleichungen in gültige Ungleichungen für die übrigen kardinalitätsbeschränkten Kreis- und Wegepolytope transformiert [18].

In Zusammenarbeit mit Egon Balas wurde die von Balas und Oosten [2] begonnene Untersuchung des gerichteten (nichtkardinalitätsbeschränkten) Kreispolytops  $P_C(D_n)$ , definiert auf einem vollständigen Digraphen mit  $n$  Knoten, fortgesetzt. Eine wichtige Klasse von gültigen Ungleichungen sind die sog. *Linear-Ordering-Constraints*, die besagen, dass ein azyklisches Tournament (Linear-Ordering) und ein gerichteter Kreis mindestens einen Bogen gemeinsam haben. Die in [2] aufgestellte Behauptung, dass alle facettendefinierenden Ungleichungen der Form  $\alpha x \geq \alpha_0$  mit  $\alpha_0 > 0$  Linear-Ordering-Constraints seien, wurde aber widerlegt [3]. Sei z. B.  $D_n = (N, A)$  ein vollständiger Digraph mit einer geraden Anzahl an Knoten,  $T$  eine alternierende Tour in  $D$  und  $\tilde{T}$  die umgedrehte alternierende Tour. Dann definiert die Ungleichung

$$2x(T) + x(A \setminus (T \cup \tilde{T})) \geq 2$$

eine Facette von  $P_C(D_n)$ , falls  $|N| \geq 6$ .

Dennoch implizieren die Linear-Ordering-Constraints, dass ein enger Zusammenhang zwischen gültigen Ungleichungen der Form  $\alpha x \geq \alpha_0$  mit  $\alpha_0 > 0$  und dem Linear-Ordering-

Problem besteht. Das Linear-Ordering-Polytop kann als die konvexe Hülle der ganzzahligen Lösungen des Systems

$$\begin{aligned} y_{ij} + y_{ji} &= 1 && \text{für alle Paare von Knoten } i, j \\ y_{ij} + y_{jk} + y_{ki} &\geq 1 && \text{für alle verschiedenen Knoten } i, j, k \in N \\ y_{ij} &\geq 0 && \text{für alle } (i, j) \in A. \end{aligned} \quad (2.1)$$

beschrieben werden. Die Lösungsmenge von (2.1) selbst, bekannt als *Generalized-Transitive-Tournament-Polytope*  $P_{GTT}(D_n)$ , hat aber neben den ganzzahligen Ecken (den Linear-Orderings) noch fraktionale Ecken, falls  $|N| \geq 6$  [7, 8]. Ferner ist bekannt, dass die Dominanten von  $P_{GTT}(D_n)$  und  $P_C(D_n)$  ein Blocking-Paar bilden [10, 8]. Unser Hauptresultat verknüpft nun diese hübsche Beziehung direkt mit dem Kreispolytop  $P_C(D_n)$ . Es gilt nämlich die folgende Äquivalenz [3]:

- (i) Die Ungleichung  $\alpha x \geq \alpha_0$  mit  $\alpha_0 > 0$  definiert eine Facette von der Dominante von  $P_C(D_n)$ .
- (ii) Die Ungleichung  $\alpha x + \alpha_0 x(\delta^+(n+1)) \geq \alpha_0$  mit  $\alpha \geq 0$  und  $\alpha_0 > 0$  definiert eine Facette von  $P_C(D_{n+1})$ .
- (iii)  $\frac{1}{\alpha_0}\alpha$  ist eine Ecke von  $P_{GTT}(D_n)$ .

## Geometrie und Kombinatorik von 0/1-Polytopen

**Bearbeitet von:** Volker Kaibel

**Kooperationspartner:** Rafael Gillmann, 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.

Im Berichtszeitraum haben wir zwei wesentliche Erweiterungen eines unserer früheren Resultate über die Seitenflächenzahlen zufälliger 0/1-Polytope erzielt. Unser ursprüngliches Resultat sagt, dass für jedes feste  $k$  ein bestimmter Schwellwert-Exponent  $\tau_k$  existiert, so dass in einem zufälligen 0/1-Polytop  $P$  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 Simplexseitenfläche von  $P$  bilden.

Den Teil dieses Theorems, der besagt, dass 0/1-Polytope mit nicht zu vielen Ecken sehr viele niederdimensionale Seitenflächen haben, konnten wir in zwei Richtungen verschärfen:

- (1) Für jedes konstante  $k$  gibt es ein  $\sigma_k > 0$ , so dass für  $d$ -dimensionale zufällige 0/1-Polytope mit höchstens  $2^{\sigma_k d}$  Ecken fast sicher (d. h. mit für  $d \rightarrow \infty$  exponentiell gegen Eins konvergierender Wahrscheinlichkeit) jede  $(k+1)$ -elementige Teilmenge von Ecken die Eckenmenge einer  $k$ -dimensionalen Simplexseitenfläche ist. Die Polytope sind also fast sicher  $k$ -nachbarschaftlich. Insbesondere sind bei zufälligen  $d$ -dimensionalen 0/1-Polytopen mit ungefähr  $2^{\sqrt{d}}$  Ecken (das entspricht der Eckenzahl vieler Polytope in der kombinatorischen Optimierung, z. B. dem Cut-Polytop) für genügend großes  $d$  mit hoher Wahrscheinlichkeit alle Ecken paarweise über eine Kante (eindimensionale Seitenfläche) verbunden. Das deutet an,

dass die bei in der polyedrischen Kombinatorik auftretenden Polytopen häufig beobachteten dichten Adjazenzstrukturen nichts Besonderes sind.

(2) Die zweite Verschärfung betrifft die Anzahl der  $k$ -dimensionalen Seitenflächen für nicht notwendigerweise konstante  $k$ . Es stellt sich heraus, dass für  $k = o(d)$  (und geeignete Eckenzahl, die aber nicht trivial klein wird) immer noch mit hoher Wahrscheinlichkeit fast alle  $(k + 1)$ -elementigen Teilmengen der Ecken  $k$ -dimensionale Simplexseitenflächen bilden.

Diese Resultate sind bisher nur in der Dissertation Rafael Gillmanns [14] veröffentlicht. Zwei Aufsätze darüber sind derzeit in Arbeit.

## Publikationen

- [1] C. Anders, *Das Chordalisierungspolytop und die Berechnung der Baumweite eines Graphen*, Diplomarbeit, Technische Universität Berlin, 2006.
- [2] E. Balas und M. Oosten, *On the cycle polytope of a directed graph*, Networks **36** (2000), 34–46.
- [3] E. Balas und R. Stephan, *On the cycle polytope of a directed graph and its relaxations*, submitted to Networks.
- [4] H. L. Bodlaender, F. V. Fomin, A. M. C. A. Koster, D. Kratsch und D. M. Thilikos, *On exact algorithms for treewidth*, Proceedings 14th Annual European Symposium on Algorithms, ESA 2006 (Y. Azar und T. Erlebach, Hg.), Lecture Notes in Computer Science, Bd. 4168, Springer, 2006, 672–683.
- [5] H. L. Bodlaender und A. M. C. A. Koster, *Safe separators for treewidth*, Discrete Mathematics **306** (2006), Nr. 3, 337–350.
- [6] H. L. Bodlaender und A. M. C. A. Koster und F. v. d. Eijkhof, *Pre-processing rules for triangulation of probabilistic networks*, Computational Intelligence **21** (2005), Nr. 3, 286–305.
- [7] A. Borobia,  *$(0, \frac{1}{2}, 1)$  matrices which are extreme points of the generalized transitive tournament polytope*, Linear Algebra Applications **220** (1995), 97–110.
- [8] R. A. Brualdi und G.-S. Hwang, *Generalized transitive tournaments and doubly stochastic matrices*, Linear Algebra Applications **172** (1992), 151–168.
- [9] W. Cook und P. D. Seymour, *Tour merging via branch-decomposition*, INFORMS Journal on Computing **15** (2003), Nr. 3, 233–248.
- [10] A. B. Cruse, *On removing a vertex from the assignment polytope*, Linear Algebra Applications **26** (1979), 45–57.
- [11] F. v. d. Eijkhof, H. L. Bodlaender und A. M. C. A. Koster, *Safe reduction rules for weighted treewidth*, Algorithmica **47** (2007), Nr. 2, 139–158.
- [12] D. R. Fulkerson, *Blocking and anti-blocking pairs of polyhedra*, Mathematical Programming **1** (1971), 168–194.
- [13] D. R. Fulkerson, *Anti-blocking polyhedra*, Journal of Combinatorial Theory (B) **12** (1972), 50–71.

- [14] R. Gillmann, *0/1-Polytopes: Typical and Extremal Properties*, Dissertation, TU Berlin, 2006.
- [15] M. Grötschel, L. Lovász und A. Schrijver, *The ellipsoid method and its consequences in combinatorial optimization*, *Combinatorica* **1** (1981), 169–197.
- [16] M. Held und R. Karp, *A dynamic programming approach to sequencing problems*, *Journal of the Society for Industrial & Applied Mathematics (SIAM)* **10** (1962), 196–210.
- [17] S. Hußmann und B. Lutz-Westphal (Hg.), *Kombinatorische Optimierung erleben. In Studium und Unterricht*, Vieweg 2007.
- [18] V. Kaibel und R. Stephan, *On cardinality constrained cycle and path polytopes*, Manuskript, 2006.
- [19] A. M. C. A. Koster und A. K. Wagler, *The extreme points of  $QSTAB(G)$  and its implications*, Report 06–30, ZIB, 2006.
- [20] A. M. C. A. Koster und A. K. Wagler, *On determining the imperfection ratio*, *Electronic Notes in Discrete Mathematics* **25** (2006), 177–181, Proceedings of 5th Cologne-Twente Workshop on Graphs and Combinatorial Optimization.
- [21] 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), Nr. 3, 170–180.
- [22] L. Lovász, *Normal hypergraphs and the weak perfect graph conjecture*, *Discrete Mathematics* **2** (1972), 253–267.
- [23] B. Lutz-Westphal, *Kombinatorische Optimierung – Inhalte und Methoden für einen authentischen Mathematikunterricht*. Dissertation, TU Berlin, 2006.
- [24] R. Stephan, *Facets of the  $p$ -path polytope*, arXiv: math.OC/0606308, June 2006.

### 2.2.9 Nichtlineare Optimierung und optimale Steuerung

Nichtlineare Ansätze verfolgen wir zur Steuerung von komplexen Netzwerken, in denen Phänomene auftreten, die sich mit gewöhnlichen oder partiellen Differentialgleichungen modellieren lassen, und/oder in denen diskrete und nichtlineare Entscheidungen miteinander verflochten sind. Wir bearbeiten diese schwierigen Fragestellungen in einem gemeinsamen Schwerpunkt der Abteilungen *Numerische Analysis und Modellierung* und *Optimierung*.

Das Projekt *Optimalsteuerung von Abwassernetzen* ist ein Nachfolger des erfolgreichen Projektes *Betriebsoptimierung der Berliner Trinkwasserversorgung*, das in der Vorperiode erfolgreich abgeschlossen wurde. Ähnlich wie beim Vorläufer ergeben sich auch im aktuellen Projekt schwierige Modellierungsfragen, auf denen im Berichtszeitraum der Schwerpunkt der Arbeiten lag. Da die Lösung solcher nichtlinearer Optimierungsprobleme mit hohem Rechenaufwand verbunden ist, kommt auch der Entwicklung effizienter Algorithmen, die innerhalb der gegebenen Problemklasse eine möglichst gute Strukturausnutzung erlauben, große Bedeutung zu. Im Projekt *Funktionenraumbasierte Innere-Punkte-Methoden* sind eine ganze Reihe von Fortschritten für eine Klasse von Verfahren, die sich zur Behandlung nichtlinearer Optimierungs- und Steuerungsprobleme eignen, erzielt worden. In ähnlicher Weise versuchen wir, in dem

neuen Projekt *Lösung spezieller nicht-linearer gemischt-ganzzahliger Programme* Techniken zur Ausnutzung spezieller Struktureigenschaften von gewissen Mischungsproblemen zu entwickeln.

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

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

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

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

Anfang des Jahres wurde die Dissertation [3] erfolgreich abgeschlossen. Neben der Analyse und Implementierung der namensgebenden *steuerungsreduzierten Inneren-Punkte-Methode* wurden dort einige neue theoretische Ansätze entwickelt, insbesondere zur Behandlung von Zustandsgleichungen, die im Laufe des Jahres weiterverfolgt wurden.

Eines der Resultate war die Vereinfachung und Verallgemeinerung der lokalen Konvergenztheorie für semi-glatte Newton-Methoden in der Optimalsteuerung [2]. Deren lokal superlineare Konvergenz stellt sich nun als einfache Folgerung aus dem Satz über die Stetigkeit von Nemyckii-Operatoren in  $L_p$ -Räumen dar. Die dabei auftretende „Normlücke“ ist eine Konsequenz der beschränkten Anwendbarkeit dieses Satzes.

Außerdem wurde die Analyse von Innere-Punkte-Methoden für zustandsbeschränkte Probleme mit verteilter Steuerung vorangetrieben. Wie auch schon bei semi-infiniten Optimierungsproblemen stellte sich heraus, dass die logarithmische Barrierefunktion nicht immer eine geeignete Wahl der Regularisierung darstellt, da sie nicht immer die strikte Zulässigkeit des Zustandes erzwingt. In diesem Fall besitzt das formale Optimalitätssystem möglicherweise keine Lösung mehr. Dies kann jedoch durch geeignete Wahl der Barrierefunktion verhindert werden, was einen Konvergenzbeweis für die zugehörige Pfadverfolgungsmethode ermöglicht [4]. Interessanterweise ist das Konvergenzverhalten des Homotopiepfades auch bei Zustandsbeschränkungen sehr stabil [5].

Ebenfalls untersucht wurde die effiziente Lösung der linearen Newton-Systeme mit Block-Vorkonditionierern unter Verwendung von Multilevel-Vorkonditionierern für die auftretenden Differentialoperatoren. Für den steuerungsreduzierten Fall konnten gitterunabhängige Konvergenzraten gezeigt und numerisch beobachtet werden, die nur schwach vom Regularisierungsparameter abhängen. In komplexeren Fällen, etwa der Parameteridentifizierung mit  $H^1$ -Regularisierung, muss die Steuerung ebenfalls diskretisiert werden. Für diese Systeme wurde die Abhängigkeit der Konvergenzraten verschiedener Block-Vorkonditionierer vom Regularisierungsparameter und Kopplungstermen in der Nebendiagonalen der Hesse-Matrix numerisch untersucht. Das dabei festgestellte ausgeprägt unterschiedliche Verhalten muss noch theoretisch untersucht werden.

Um die entwickelten Algorithmen mit maximaler Flexibilität umsetzen zu können, wurde der Implementierung die Gitterbibliothek Dune [1] zugrundegelegt. Durch den Einsatz moderner Template-Techniken kann eine einfache Anwendung bei hoher Effizienz auch für stark strukturierte Blocksysteme, wie sie in Optimalsteuerungssystemen natürlicherweise auftreten, erreicht werden.



Mit der Entwicklung und Analyse von Komplementaritätsmethoden für Online-Steuerungsprobleme wurde ein neuer Anwendungsbereich bearbeitet. Das Ziel ist Echtzeitfähigkeit durch die Beschränkung auf die Lösung eines Systems je Zeitschritt, was bei etablierten Aktiven-Mengen-Strategien nicht gewährleistet werden kann.

### **Optimalsteuerung von Abwassernetzen (SewerNetOpt)**

**Bearbeitet von:** Martin Grötschel

**Kooperationspartner:** Marc Steinbach, Leibniz-Universität Hannover; Jens Burgschweiger, Berliner Wasserbetriebe; Kai Schröder, KompetenzZentrum Wasser Berlin

**Förderung:** Berliner Wasserbetriebe; Veolia Wasser GmbH, Berlin

In Siedlungsgebieten fallen häusliches und gewerbliches Schmutzwasser sowie in Abhängigkeit vom Versiegelungsgrad erhebliche Mengen an Niederschlagswasser an. Seit Mitte der 70er Jahre wurde die Abflusssteuerung angewandt, um gezielt vorhandene Entwässerungseinrichtungen zu bewirtschaften und somit die Kapazität der zuvor rein statischen Systeme möglichst vollständig zu nutzen. Die Entwicklung der integrierten Steuerung von Kanalnetz und Kläranlage wurde in den letzten 10 Jahren vorangetrieben, wenngleich eine betriebliche Umsetzung für große, komplexe Systeme nach wie vor kaum realisiert wurde. Aus diesem Grund wird in Berlin das Forschungsprojekt EVA durchgeführt, das die Umsetzung eines Entscheidungshilfesystems zur Verbundsteuerung von Abwasserpumpwerken zum Ziel hat. SewerNetOpt ist ein Teilprojekt des Verbundprojekts EVA.

Ziel des Teilprojekts ist die Herleitung von Strategien zur Steuerung der Abwasserströme innerhalb des Abwasserdruckleitungsnetzes mit dem Ziel, während extremer Niederschlagsereignisse den Austritt von Wasser aus dem Kanalsystem zu verhindern bzw. den austretenden Schmutzwasseranteil zu minimieren. Die Definition der Bewirtschaftungsstrategien erfolgt durch mathematische Optimierung basierend auf der Abbildung der abwassertechnischen Anlagen. Durch zeitliche und räumliche Diskretisierung entstehen dabei sehr große nichtlineare Optimierungsmodelle mit einer moderaten Anzahl diskreter Entscheidungsvariablen.

Im Berichtsjahr wurden vor allem Ansätze zur geeigneten Modellierung des komplexen heterogenen Systems entwickelt und es wurde untersucht, ob die jeweils erforderlichen Netz- und Anlagendaten verfügbar bzw. mit vertretbarem Aufwand zu beschaffen sind. Das Gesamtsystem zur Abwasserentsorgung in Berlin besteht aus 46 Abwasserkanalnetzen für verschiedene Einzugsgebiete mit je einem Pumpwerk, dem Abwasserdruckleitungsnetz sowie (daran angeschlossen) sechs Klärwerken. Für das Druckleitungsnetz kann ein aus Vorarbeiten vorhandenes DAE-Modell weitgehend übernommen werden; die Klärwerke werden zunächst durch äußere Approximationen der zulässigen Kapazitätsprofile im Zeitverlauf abgebildet. Die Arbeiten konzentrierten sich somit auf die Modellierung der Kanalnetze, die mit einem System von Regenüberlaufbecken sowie teilweise untereinander gekoppelt sind, wobei die diversen Kopplungsmechanismen (Pumpen, Schwellen, Drosseln, Heber, Rückläufe) auf zustandsabhängige Nichtdifferenzierbarkeiten im Modell führen.

## Lösung spezieller nicht-linearer gemischt-ganzzahliger Programme

**Bearbeitet von:** Andreas Bley

**Kooperationspartner:** Natashia Boland, University of Melbourne, Australien; Gary Froyland, University of New South Wales, Australien; BHP Billiton Group, Melbourne, Australien

Zahlreiche Probleme in technischen und wirtschaftlichen Anwendungsbereichen lassen sich nicht adäquat als rein lineare gemischt-ganzzahlige Programme formulieren. Verschiedene Prozesse und Zusammenhänge führen zwangsläufig zu nicht-linearen Bedingungen in den mathematischen Modellen. Sind die (Relaxierungen der) resultierenden Modelle konvex, so lassen sich noch Methoden der konvexen Optimierung zu ihrer Lösung verwenden. Zur Lösung allgemeiner nicht-konvexer, nicht-linearer Modelle gibt es derzeit keine praxistauglichen Verfahren.

Für einige technische und wirtschaftliche Prozesse, wie etwa für das Mischen oder Trennen verschiedener Materialien, haben die in den Modellen auftretenden Nicht-Linearitäten jedoch spezielle Struktureigenschaften, die sich bei deren Lösung ausnutzen lassen. Das Ziel dieses Projektes ist die Identifikation und Untersuchung solch spezieller Sub-Strukturen und die Entwicklung effizienter Lösungsverfahren für die entsprechenden nicht-linearen Programme.

Im Rahmen eines Gastaufenthaltes an der Universität Melbourne wurde ein Lösungsverfahren für ein Produktionsplanungsproblem im Bergbau mit Lagerhalden entwickelt. Wie bei den klassischen Produktionsplanungsproblemen im Bergbau ist das Bergwerk dabei in Blöcke mit bekanntem Gesteins- und Erzgehalt unterteilt. Pro Zeiteinheit kann im ersten Produktionsschritt eine bestimmte Menge Gestein abgebaut werden, wobei bestimmte Reihenfolgebeziehungen zwischen den Blöcken zu beachten sind. In einem nachfolgenden Verarbeitungsschritt kann das Metall aus den abgebauten Blöcken extrahiert werden. Die dabei pro Zeiteinheit verarbeitete Gesteinsmenge ist ebenfalls begrenzt.

Zusätzlich kann man auch abgebaute Gesteinsblöcke auf einer Halde lagern, um diese in einer späteren Periode zu verarbeiten. Aufgrund der Konstruktion der technischen Anlagen werden dabei jedoch die verschiedenen Gesteine in der Halde gleichmäßig durchmischt, wodurch die charakteristischen Eigenschaften der einzelnen Blöcke auf der Halde verloren gehen. Werden Gesteinsblöcke mit hohem und niedrigem Erzgehalt auf der Halde gelagert, kann in späteren Perioden nur ein Gemisch mit mittlerem Erzgehalt zur Verarbeitung entnommen werden. Dieser Mischungsprozess führt zu nicht-konvexen nicht-linearen Nebenbedingungen der Art

$$x_t^o y_t^r = x_t^r y_t^o \quad \text{für jede Zeiteinheit } t,$$

wobei  $x_t^o$  und  $x_t^r$  die Erz- und Gesteinsmengen bezeichnen, die in Zeitperiode  $t$  von der Halde entnommen und weiterverarbeitet werden, und  $y_t^o$  und  $y_t^r$  die Erz- und Gesteinsmengen bezeichnen, die von Zeitperiode  $t$  zu Zeitperiode  $t + 1$  in der Halde verbleiben. Das gesamte Produktionsplanungsproblem mit einer Lagerhalde lässt sich als gemischt-ganzzahliges Programm mit zahlreichen linearen und einigen solchen bi-quadratischen Nebenbedingungen formulieren.

Zur Lösung dieser speziellen Probleme wurde ein exakter Branch-and-bound-Algorithmus entwickelt. Dieser basiert auf einer gemischt-ganzzahligen linearen Relaxierung des eigentlich nicht-linearen Problems sowie speziellen Branching-Regeln und Heuristiken, um auch die Erfüllung der nicht-linearen Bedingungen zu garantieren. Verschiedene Relaxierungen, Branching-Regeln und Heuristiken wurden dabei theoretisch und praktisch untersucht. Rechenergebnisse für mehrere Testprobleme zeigten, dass der entwickelte Lösungsansatz für die

se Problemklasse höchst effizient ist. Während der klassische Ansatz, die Nicht-Linearitäten zu diskretisieren, ebenso wie die bekannten Algorithmen zur Lösung allgemeiner nicht-konvexer nicht-linearer Programme bereits bei kleinen Testproblemen scheiterten, ließen sich mit dem spezialisierten Branch-and-bound-Verfahren innerhalb weniger Minuten nahezu optimale Lösungen für alle Testprobleme berechnen.

### Publikationen

- [1] P. Bastian, M. Droske, Ch. Engwer, R. Klöfkorn, T. Neubauer, M. Ohlberger, and M. Rumpf, *Towards a unified framework for scientific computing*, Proc. of the 15th International Conference on Domain Decomposition Methods, 2005, pp. 167–174.
- [2] A. Schiela, *A continuity result for nemyckii operators and some applications in PDE constrained optimal control*, Report 06-41, ZIB, 2006.
- [3] A. Schiela, *The control reduced interior point method – a function space oriented algorithmic approach.*, Ph.D. thesis, Freie Universität Berlin, 2006.
- [4] A. Schiela, *Convergence of the control reduced interior point method for PDE constrained optimal control with state constraints*, Report 06-16, ZIB, 2006.
- [5] A. Schiela, *Barrier methods for optimal control problems with state constraints*, Report 07-07, ZIB, 2007.

#### 2.2.10 Logistik

Aufgrund des Wegfalls des Projektes *Online-Disposition von Fahrzeugen* und des Auslaufens des Graduiertenkollegs *Stochastische Modellierung und quantitative Analyse großer Systeme in den Ingenieurwissenschaften* haben wir die bisherigen Schwerpunkte *Online-Optimierung* und *Produktion und Logistik* im neuen Schwerpunkt *Logistik* zusammengefasst.

In diesem Schwerpunkt beschäftigen wir uns in zwei Projekten mit Grundlagen und allgemeinen Methoden für den Einsatz in der Logistik. Im MATHEON-Projekt *B14: Kombinatorische Aspekte in der Logistik* untersuchen wir kombinatorische (Teil-)Probleme, die typischerweise in logistischen Fragestellungen auftreten. Dieses Projekt ist Nachfolger des Projektes *C6: Stabilität, Sensitivität und Robustheit in kombinatorischer Online-Optimierung*, das mit Ende der ersten MATHEON-Förderperiode ebenfalls beendet wurde. Ergebnisse von C6 sind im Bericht zu B14 zu finden.

Häufig müssen logistische Entscheidungen *online* getroffen werden, das heißt, es können nur Informationen verwendet werden, die zu einem bestimmten Zeitpunkt bereits bekannt sind. Die Qualität der zu treffenden Entscheidungen hängt allerdings von der künftigen Entwicklung ab, über die man oft wenig aussagen kann. Wir untersuchen Grundlagen zur Bewertung von Online-Algorithmen im Projekt *Kombinatorische Online-Planung*, wobei wir gewisse Zufallsmodelle der Zukunft zugrunde legen.

Die in den Grundlagenprojekten bearbeiteten Themen sind durch Praxisprojekte motiviert, die wir in Kooperation mit Industriepartnern durchführen. So haben wir z. B. die *Auslastung von Laserquellen an Roboterschweißstationen* in automatisierten Fertigungsstraßen der Firma VW untersucht und dabei erhebliches Einsparungspotenzial aufgedeckt.

In realen Online-Entscheidungssituationen spielen häufig *Echtzeit-Anforderungen* eine Rolle. Gute Online-Algorithmen müssen nicht nur gute Entscheidungen treffen, sondern sie müssen innerhalb einer garantierten Antwortzeit eine gültige Lösung liefern. Dies ist z. B. bei der Steuerung von Aufzugssystemen der Fall, wie sie in der innerbetrieblichen Logistik eingesetzt werden. Diese sind Gegenstand des Projekts *Online-Steuerung von Multi-Server-Transportsystemen mit Reoptimierungsalgorithmen*, in dem fortgeschrittene mathematische Verfahren entwickelt wurden.

Im Berichtszeitraum haben wir uns außerdem mit Personenaufzügen befasst. Ziel des Projektes *Zeitoptimierung für Aufzug-Gruppensteuerungen* ist es, Online-Algorithmen zur Steuerung von Gruppen von Personenaufzügen für sogenannte *Zielrufsysteme* zu entwickeln, die mit extrem beschränkten Ressourcen auskommen müssen.

### **Kombinatorische Aspekte in der Logistik**

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

**Kooperationspartner:** Volkswagen AG, Kollmorgen Steuerungstechnik GmbH, DFG-Forschungszentrum MATHEON

**Förderung:** DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt B14

Viele logistische Systeme sind technologisch hoch entwickelt, ermöglichen einen schnellen Gütertransport und bieten einen hohen Grad an Flexibilität. Die Planungs- und Steuerungssoftware für solche Systeme entspricht jedoch nicht notwendigerweise den Erwartungen der Nutzer. Beispielsweise können Transportverzögerungen auftreten und wesentliche Unausgewogenheiten in Warteschlangen entstehen, obwohl die Kapazität des Systems ausreichend erscheint, um die Transportbedarfe zu bewältigen. Die hier auftretenden Steuerungsprobleme sind üblicherweise diskreter Natur. Sie können von traditioneller Art sein (offline), aber häufiger ergeben sich Online-Probleme, bei denen Entscheidungen getroffen werden müssen bevor alle Problemdata bekannt sind.

Ziel dieses Projektes ist es, kombinatorische Online- und Offline-Probleme zu untersuchen, die in einem breiten Feld von logistischen Anwendungen auftreten.

Im Berichtszeitraum haben wir uns mit zwei realen Problemen beschäftigt, der Steuerung von Schweißrobotern im Karosseriebau und der Steuerung auf Personenaufzugsgruppen. Für Details sei auf die Darstellungen in den Projekten *Auslastung von Laserquellen an Roboter-schweißstationen* und *Zeitoptimierung für Aufzug-Gruppensteuerungen* verwiesen.

Des Weiteren untersuchen wir gegenwärtig die Möglichkeit, Online-Algorithmen über eine Formulierung als Markov-Entscheidungs-Problem (MDP) zu evaluieren, wodurch insbesondere Wahrscheinlichkeitsverteilungen für zukünftige Ereignisse mit in die Planung einbezogen werden. Über eine Formulierung als lineares Programm lassen sich im Erwartungswert optimale Strategien prinzipiell berechnen. Aufgrund der sehr großen Zahl von Zuständen bei realistischen Problemen kann das zugehörige lineare Programm jedoch nicht direkt gelöst werden. In diesem Zusammenhang wurde im MATHEON-Vorläuferprojekt C6 *Stabilität, Sensitivität und Robustheit in kombinatorischer Online-Optimierung* ein neues, auf Spaltengenerierung basierendes Verfahren entwickelt und implementiert, das es ermöglicht, *in einem Zustand* die erwarteten optimalen Kosten oder die erwarteten Kosten einer einzelnen Entscheidung (Steuerung) zu approximieren. Damit erhalten wir eine Schranke für den relativen Fehler der Steuerung. Wir nennen dieses Verfahren *Lokale Politikevaluierung*. Auf theoretischer Seite konnte gezeigt werden, dass die Anzahl benötigter Variablen neben der angestrebten Appro-

ximationsgüte nur von der Anzahl zulässiger Steuerungen und möglicher Nachfolgezustände sowie dem Diskont-Faktor abhängt, nicht jedoch von der Gesamtzahl an Zuständen im MDP, vgl. [14].

Das Verfahren der lokalen Politikevaluierung wurde bereits erfolgreich für ein Terminvergabeproblem eingesetzt, vgl. [13]. Dieses abstrahierte Problem basiert auf der Einsatzplanung von Service-Technikern eines Kundendienstes (ehemaliges Projekt mit Hermes Technischer Kundendienst) und wurde im Projekt C6 bereits mittels kompetitiver Analyse untersucht, siehe [15]. Gegenwärtig untersuchen wir ein MDP-Modell für ein einfaches Aufzugssystems und hoffen, für bekannte Steuerungsalgorithmen Gütegarantien berechnen zu können.

Von der Evaluierung einzelner Entscheidungen durch lokale Politikevaluierung versprechen wir uns insbesondere, Situationen zu identifizieren, in denen sich ein gegebener Online-Algorithmus ungünstig verhält. Anhand dieser Informationen könnte man in einem nächsten Schritt versuchen, den Online-Algorithmus entsprechend zu verbessern.

### 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* [21], liefert in vielen relevanten Fällen sehr pessimistische Ergebnisse. Insbesondere tritt der Fall auf, dass offensichtlich unterschiedlich gute Online-Algorithmen gleich schlecht abschneiden [18].

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. Daher sind in der Literatur alternative Varianten eingeführt worden, von denen vor allem die *randomisierte kompetitive Analyse* [3] und die *smoothed kompetitive Analyse* [2] zu nennen sind. Beide benutzen Zufall, um bessere Analyseergebnisse zu ermöglichen.

Bei der randomisierten kompetitiven Analyse betrachtet man randomisierte Algorithmen, wobei die Randomisierung dazu führt, dass es keine *worst-case*-Eingabe mehr gibt. Die *smoothed kompetitive Analyse* andererseits ist eine Variante der *Average-case-Analyse*, bei der das Verhalten auf einer zufällig gestörten Eingabe analysiert wird. Dem liegt die Beobachtung zurunde, dass *worst-case*-Eingaben oft sehr singuläre spezielle Strukturen aufweisen, die praktisch so nicht auftreten.

In diesem Projekt geht es um die weitere Erforschung von alternativen Analysemethoden für kombinatorische Online-Probleme. Unsere Untersuchungen konzentrieren sich ebenfalls auf zufällige Eingaben. Für bestimmte Probleme kann das Verhalten von Online-Algorithmen wegen des kombinatorischen Charakters der Probleme als Markovkette modelliert werden. Durch Analyse dieser Markovkette sind dann Aussagen über die Online-Algorithmen ableitbar. Dieser Ansatz wurde bereits zur Analyse von Online-bin-packing benutzt [7, 17, 1], wo das asymptotische Verhalten der Online-Algorithmen betrachtet wurde.

Wir haben einen Markovketten-basierten Analyseansatz für das *Online-bin-coloring*-Problem entwickelt, das durch eine Kommissionierungsanwendung motiviert wurde. Es gehört zu den

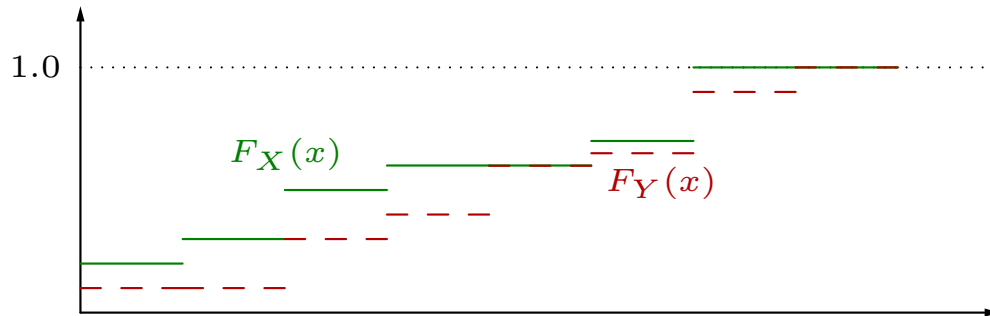


ABBILDUNG 2.41: Illustration der stochastischen Dominanz von Zufallsvariablen  $X$  und  $Y$ .  $X$  dominiert  $Y$  stochastisch, wenn seine Verteilungsfunktion  $F_X$  stets größer als die Verteilungsfunktion  $F_Y$  von  $Y$  ist.

Problemen, für die die kompetitive Analyse Aussagen liefert, die vom praktischen Standpunkt aus unbrauchbar sind. Ein trivialer, offensichtlich ungünstiger Algorithmus hat ein besseres Kompetitivitätsverhältnis als ein Greedy-Algorithmus, der die Ressourcen viel besser ausnutzt [18]. In Simulationen auf zufälligen Eingaben zeigt sich jedoch, dass der Greedy-Algorithmus deutlich besser abschneidet [16].

Unser Markovketten-Analyseansatz erlaubt es, die Entwicklung der Lösungsqualitätsverteilung in der Zeit zu beschreiben. Betrachtet man diese Verteilungen so zeigt sich, dass die Verteilung des Greedy-Algorithmus von den entsprechenden Verteilungen anderer Algorithmen zu jedem Zeitpunkt *stochastisch dominiert* wird (vgl. Abbildung 2.41). Dies erklärt, warum der Greedy-Algorithmus anderen Online-Algorithmen in Simulationen überlegen ist.

Um jetzt die stochastische Dominanz für die gesamte Entwicklung zu *beweisen*, kann man Resultate aus der Wahrscheinlichkeitstheorie [20, 6] heranziehen. Die verfügbaren Kriterien zum stochastischen Vergleich von Markovketten sind allerdings zu schwach, d. h. sie treffen auf die betrachteten Markovketten nicht zu. Es ist uns gelungen, eines dieser Kriterien zu verallgemeinern und mit Computerhilfe Beweise (Zertifikate) für den Vergleich einiger Markovketten zu bestimmen. Es ist offen, ob diese Zertifikate allgemein konstruiert werden können und sich damit stochastische Dominanz für eine größere Klasse von Algorithmen nachweisen lässt.

Ein interessanter Aspekt ist, dass unsere Ergebnisse nicht nur asymptotische Aussagen zulassen, sondern eben für alle Zeitpunkte der Entwicklung gelten. Die Aussagen können so interpretiert werden, dass das average-case-Kompetitivitätsverhältnis des Greedy-Algorithmus *zu jedem Zeitpunkt* besser als das der anderen untersuchten Algorithmen ist.

## Auslastung von Laserquellen an Roboterschweißstationen

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

**Kooperationspartner:** Volkswagen AG, Steineke GmbH

**Förderung:** Volkswagen AG

Laserschweißen hat sich während der letzten 10 Jahre zu einer Schlüsseltechnologie im modernen Karosseriebau entwickelt. In einer Schweißphase bearbeiten pro Schweißstation mehrere Schweißroboter (üblicherweise 2–6) gleichzeitig Schweißnähte an der Fahrzeugkarosserie. Während ein Roboter schweißt, muss er von einer festen externen Laserquelle gespeist werden. Während Roboter in dieser Beziehung nicht flexibel sind, kann jede Laserquelle mehrere (bis zu sechs) Roboter versorgen, aber zu jedem Zeitpunkt immer nur einen. Die 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 die Roboter die verbleibenden Quellen gemeinsam nutzen. Der Grund für diese spezielle Zielsetzung 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.

Bisher haben wir dieses Optimierungsproblem für den Fall untersucht, dass für jeden Roboter die Reihenfolge der Bearbeitung seiner Schweißnähte vorgegeben ist. In dieser Situation ist das Verlangsamten 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, welches die maximale Laufzeit eines Roboterschweißpfades ist. Falls es nur eine Laserquelle gibt, entspricht das zugehörige Optimierungsproblem einem speziellen Scheduling-Problem (*single-machine scheduling problem with minimum time lags*), vgl. [22, 23].

Wir haben für das betrachtete Schweißproblem eine Formulierung als gemischt-ganzzahliges lineares Programm entwickelt, welches sich für die untersuchten praktischen Fälle sehr schnell lösen lässt. Abbildung 2.42 zeigt ein Beispiel für die Optimierung von Roboterschweißpfaden. Bei einem Einsatz von nur zwei Laserquellen teilen sich in der Optimallösung die Roboter R1 und R2 eine Laserquelle. Für Details sei auf [11] verwiesen.

In einem nächsten Schritt versuchen wir nun, Optimierungsmodelle für die allgemeine Problemstellung zu finden. Das Ziel ist dabei insbesondere die Entwicklung eines gemischt-ganzzahligen linearen Programms, welches ohne spezielle Techniken wie Spaltengenerierung oder Schnittebenenverfahren gelöst werden kann. Es sieht so aus, als ob dafür vor allem zeitindizierte Scheduling-Formulierungen geeignet sind.

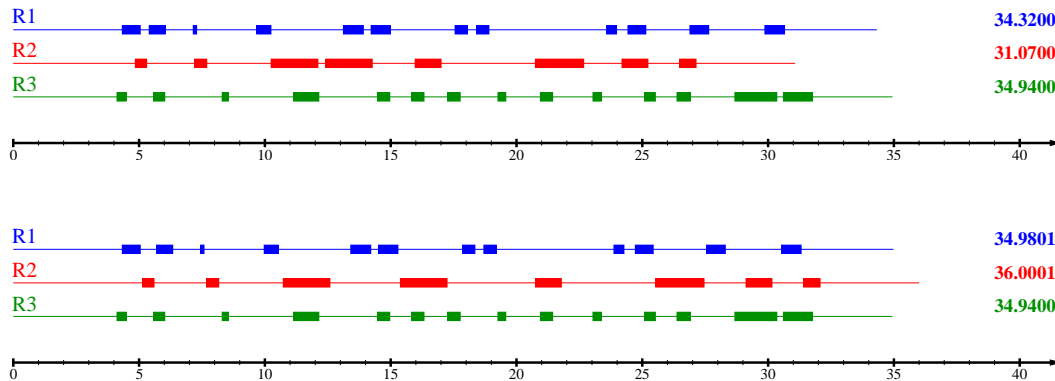


ABBILDUNG 2.42: Vorgegebene Roboterschweißpfade (oben) und optimierte Schweißpfade für zwei Laserquellen (unten). Die Blöcke repräsentieren die Schweißnähte und die Linien dazwischen das Verfahren der Roboter.

## Online-Steuerung von Multi-Server-Transportsystemen

**Bearbeitet von:** Philipp Friese

**Kooperationspartner:** Jörg Rambau, Universität Bayreuth; eCom Logistik Berlin; DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt B14

**Förderung:** DFG-Graduiertenkolleg 621 „Stochastische Modellierung und quantitative Analyse großer Systeme in den Ingenieurwissenschaften“ (MAGSI)

Beispiele für Multi-Server-Transportsysteme sind Flotten führerloser Transportfahrzeuge oder Aufzugsysteme in der innerbetrieblichen Logistik, z. B. die Güteraufzüge im Versandlager der Firma eCom Logistik (Herlitz PBS AG) in Falkensee nahe Berlin, die für den vertikalen Transport von Paletten innerhalb der acht Etagen des Lagers verantwortlich sind. Die Aufzüge dieses Transportsystems operieren mit *Kapazität 1* (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 FIFO verwendet, d. h. Aufträge werden in der Reihenfolge ihres Auftretens abgearbeitet. Jeder Steuerung ist dabei stets die Zieletage eines jeden Auftrags im Voraus bekannt (Steuerung mit Zielauswahl). Um Überlastungen in Spitzenzeiten zu vermeiden, werden die Aufzugsysteme meist überdimensioniert geplant. Durch Einsatz einer mathematisch optimierten Steuerung wird die Leistungsfähigkeit solcher Transportsysteme auf signifikante Weise beeinflusst (siehe auch [12]). Ein derart gesteuertes System kann bei gleichen Anforderungen in der Regel kleiner dimensioniert werden (vgl. Abbildung 2.43).

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 Aufzugsystemen 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-



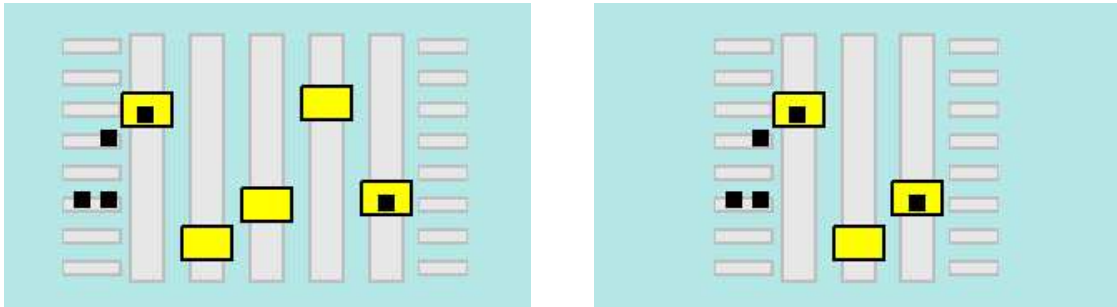


ABBILDUNG 2.43: Güteraufzugssysteme mit Einzelplatz-Aufzügen. Durch Verwendung einer mathematisch optimierten Steuerung (rechts) lassen sich Aufzüge gegenüber einer Standard-Steuerung (links) einsparen.

Optimierungsproblem mit den bis zu diesem Zeitpunkt bekannten Daten konstruiert und gelöst. Diese Lösung wird dann bis zur nächsten Änderung des Systemzustandes verwendet (vgl. Abbildung 2.44).

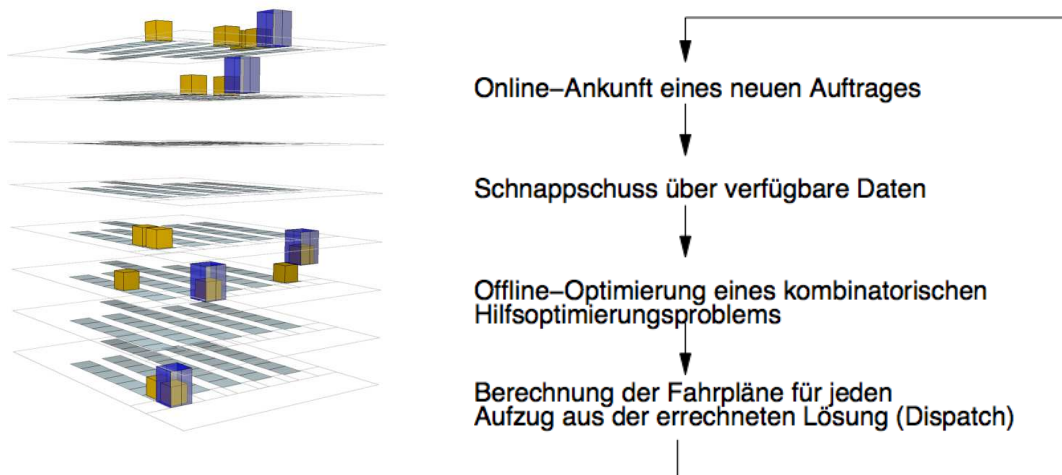


ABBILDUNG 2.44: Schematische Darstellung des Reoptimierungskonzepts. Links die Darstellung eines Schnappschusses.

Mittlerweile können wir idealisierte Palettenaufzugssysteme (siehe Abbildung 2.45) mit mehreren Aufzügen mit Hilfe eines integrierten Reoptimierungsalgorithmus in Echtzeit steuern [9]. Integriert bedeutet dabei, dass der Algorithmus die Zuordnung von Aufträgen zu Aufzügen und die Abarbeitungsreihenfolge der Aufträge durch einen Aufzug gleichzeitig betrachtet.

In ausgiebigen Simulationsstudien konnten wir experimentell nachweisen, dass durch den Einsatz von Reoptimierungsalgorithmen eine Leistungsverbesserung gegenüber Standard-Verfahren bei gleichbleibender Kapazität erreicht wird. Des Weiteren konnten wir zeigen, dass die Systeme dadurch ohne Leistungseinbußen kleiner dimensioniert werden können. Für eine ausführliche Zusammenstellung der gesammelten Resultate sei auf [10] verwiesen. In

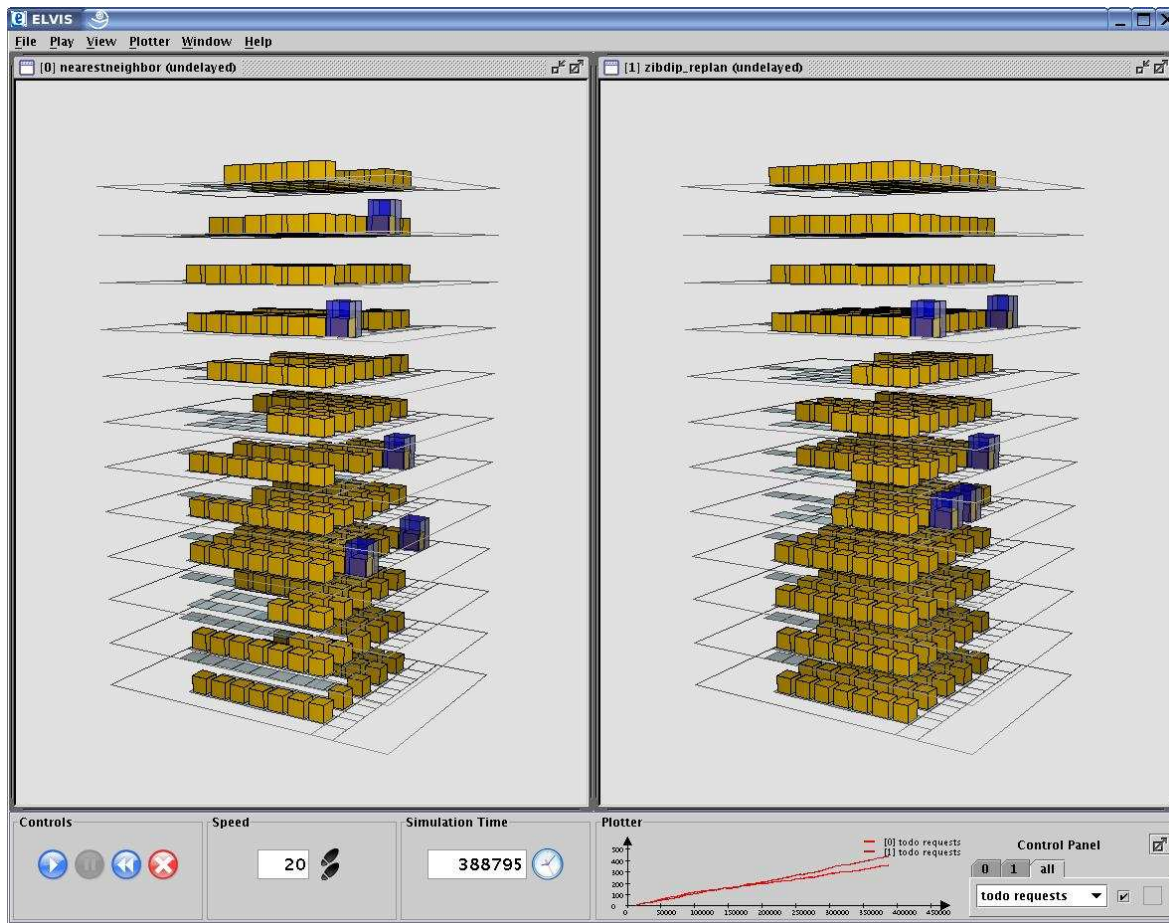


ABBILDUNG 2.45: Zwei Lastaufzugssysteme im Vergleich. Die Darstellung ist der am ZIB entwickelten Visualisierung ELVIS des Simulationssystems entnommen.

weiteren Untersuchungen, sowohl experimentell als auch theoretisch, konnten wir mittels mathematischer Evaluierungsmethoden Gütegarantien für Steuerungen berechnen (vgl. dazu [19]).

Das DFG-Graduiertenkolleg MAGSI ist im September 2006 ausgelaufen.

### Zeitoptimierung für Aufzug-Gruppensteuerungen

**Bearbeitet von:** Benjamin Hiller, Andreas Tuchscherer

**Kooperationspartner:** Kollmorgen Steuerungstechnik GmbH

In modernen Bürohochhäusern arbeiten Gruppen von Personenaufzügen zusammen, um eine effiziente Beförderung der Passagiere innerhalb des Gebäudes zu erreichen. Damit ein Aufzugssystem von den Passagieren als gut empfunden wird, ist es entscheidend, geringe Warte- und Reisezeiten zu realisieren.

Klassische Aufzugssysteme arbeiten mit Außen- und Innenrufen, das heißt, ein Fahrgast teilt zuerst auf der Startetage mit, ob er aufwärts oder abwärts fahren will. Erst nach Ankunft des Fahrstuhls wählt der Fahrgast die gewünschte Zieletage in der Aufzugskabine. In den letzten

Jahren sind verstärkt *Zielrufsteuerungen* entwickelt und eingesetzt worden. Dabei wählt ein Passagier bereits bei Anforderung des Aufzugs direkt die Zieletage und bekommt sofort einen Aufzug zugeteilt, der ihn befördern wird. In einem Zielrufsystem stehen der Steuerung daher zusätzliche Informationen zur Verfügung, was für den Einsatz von Optimierungsverfahren von Vorteil ist.

Die Firma Kollmorgen Steuerungstechnik GmbH hat bisher Aufzugssteuerungen für herkömmliche Systeme entwickelt und vertrieben und möchte nun auch Zielrufsteuerungen anbieten. Ziel dieses Projektes war es, einen geeigneten Steuerungsalgorithmus zu entwickeln, der durch die Firma Kollmorgen in ihren Aufzugssteuerungen implementiert werden kann.

Typische Anlagen bestehen aus bis zu vier Aufzügen, die bis zu 32 Etagen bedienen und jeweils 10–15 Personen aufnehmen können. Aus Kosten- und Wartbarkeitsgründen verwendet die Firma Kollmorgen in den Aufzugssteuerungen keine PC-Technik, sondern Embedded-Mikroprozessoren, die eine deutlich geringere Rechenleistung aufweisen. Auf diesen Prozessoren soll in höchstens 200 ms und unter Benutzung von höchstens 200 kB Speicher ein neuer Plan berechnet werden. Darüber hinaus muss die Steuerung dezentral erfolgen, um auch mit Ausfällen einzelner Aufzüge umgehen zu können.

Insgesamt sind zwei Entscheidungen zu treffen. Einerseits muss jedem Passagier ein Aufzug zugewiesen werden, andererseits muss für jeden Aufzug eine Abarbeitungsreihenfolge aller ihm zugewiesenen Passagiere festgelegt werden. Dabei können und sollen die Passagiere nicht unabhängig voneinander bedient werden, sondern das Halten zum Absetzen eines Passagiers kann durch Zustiegen eines anderen Passagiers weitere Halte erzwingen.

Da der zu entwickelnde Algorithmus mit extrem beschränkten Rechenressourcen zurechtkommen muss und von der Firma Kollmorgen selbst in vertretbarer Zeit implementiert werden soll, scheiden fortgeschrittene Methoden der Mathematischen Optimierung von vornherein als Lösungsansatz aus. Zur Lösung der Schnappschussprobleme haben wir daher eine Variante einer Best-Insertion-Heuristik vorgeschlagen, die eine Kostenfunktion zur Bewertung von Kandidatentouren für die Aufzüge benutzt. Die Kostenfunktion berücksichtigt sowohl die Wartezeiten als auch die Reisezeiten der Passagiere, deren relatives Gewicht über Parameter eingestellt werden kann. Im Gegensatz zu herkömmlichen Systemen können bei Zielrufsystemen die Reisezeiten recht genau vorhergesagt werden.

Die Herausforderung in diesem Projekt war die Entwicklung einer geeigneten Datenstruktur für die Aufzugstouren, die Einfügeoperationen mit Update der Kosten effizient unterstützt. Das Hauptproblem besteht darin, dass sich im Gegensatz zu vergleichbaren Heuristiken für das Traveling-Salesman-Problem die Struktur einer Tour durch Einfügen recht drastisch ändern kann.

Wir haben den entwickelten Algorithmus auf von der Firma Kollmorgen bereitgestellten Testdaten intensiv getestet. Es zeigte sich, dass er die Last gut über die einzelnen Aufzüge einer Gruppe verteilen kann und eine gute Performance für die Passagiere erzielt.

Die Firma Kollmorgen ist im Augenblick dabei, den Algorithmus zu reimplementieren, zu testen und in die Aufzugssteuerung eines Hochhauses in Venezuela zu integrieren.

## Publikationen

- [1] S. Albers und M. Mitzenmacher, *Average-case analyses of first fit and random fit bin packing*, Random Structures Algorithms **16** (2000), Nr. 3, 240–259.

- 
- [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*, Math. Oper. Res. **31** (2006), Nr. 1, 85–108.
- [3] S. Ben-David, A. Borodin, R. M. Karp, G. Tardos und A. Wigderson, *On the power of randomization in on-line algorithms*, Algorithmica **11** (1994), 2–14.
- [4] A. Borodin und R. El-Yaniv, *Online computation and competitive analysis*, Cambridge University Press, 1998.
- [5] A. Coja-Oghlan, S. O. Krumke und T. Nierhoff, *A heuristic for the stacker crane problem on trees which is almost surely exact*, Proceedings of the 14th Annual International Symposium on Algorithms and Computation, Lecture Notes in Computer Science, Bd. 2906, Springer, 2003, 605–614.
- [6] M. Doisy, *A coupling technique for stochastic comparison of functions of Markov processes*, Journal of Applied Mathematics & Decision Sciences **4** (2000), Nr. 1, 39–64.
- [7] J. E. G. Coffman, D. S. Johnson, P. W. Shor und R. R. Weber, *Markov Chains, computer proofs, and average-case analysis of best fit bin packing*, Proc. 25th Ann. ACM Symp. on Theory of Computing, 1993, 412–421.
- [8] A. Fiat und G. J. Woeginger (Hg.), *Online algorithms: The state of the art*, Lecture Notes in Computer Science, Bd. 1442, Springer, 1998.
- [9] P. Friese, *Echtzeitsteuerung von Multi-Server-Transportsystemen mit Reoptimierungsalgorithmen*, Diplomarbeit, TU Berlin, 2003.
- [10] P. Friese und J. Rambau, *Online-Optimization of Multi-Elevator Transport Systems with Reoptimization Algorithms based on Set-Partitioning Models*, ZIB-Report ZR 05-03, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, 2005, Proceedings of the Latin American Conference on Combinatorics, Graphs and Applications (LACGA 2004), to appear.
- [11] M. Grötschel, H. Hinrichs, K. Schröer und A. Tuchscherer, *Ein gemischt-ganzzahliges lineares Optimierungsmodell für ein Laserschweißproblem im Karosseriebau*, Zeitschrift für wissenschaftlichen Fabrikbetrieb (2006), Nr. 5, 260–264.
- [12] M. Grötschel, S. O. Krumke und J. Rambau (Hg.), *Online optimization of large scale systems*, Springer, Berlin Heidelberg New York, 2001.
- [13] S. Heinz, *Policies for online target date assignment problems: Competitive analysis versus expected performance*, Diplomarbeit, TU Berlin, 2005.
- [14] S. Heinz, V. Kaibel, M. Peinhardt, J. Rambau und A. Tuchscherer, *Lp-based local approximation for markov decision problems*, Report 06–20, ZIB, 2006.
- [15] 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, 230–243.

- [16] A. Höft, *Online-Optimierung einer halbautomatischen Glückwunschkartenkommisionierungsanlage*, Diplomarbeit, Technische Universität Berlin, 2001, in German.
- [17] C. Kenyon, Y. Rabani und A. Sinclair, *Biased random walks, Lyapunov functions, and stochastic analysis of best fit bin packing (preliminary version)*, SODA, 1996, 351–358.
- [18] S. O. Krumke, W. E. de Paepe, L. Stougie und J. Rambau, *Online bin coloring*, Proceedings of the 9th Annual European Symposium on Algorithms (F. M. auf der Heide, Hg.), Lecture Notes in Computer Science, Bd. 2161, 2001, 74–84.
- [19] S. O. Krumke, L. Laura, M. Lipmann, A. Marchetti-Spaccamela, W. de Paepe, D. Poengen und L. Stougie, *Non-abusiveness helps: An  $O(1)$ -competitive algorithm for minimizing the maximum flow time in the online traveling salesman problem*, Proceedings of the 5th International Workshop on Approximation Algorithms for Combinatorial Optimization, Lecture Notes in Computer Science, Bd. 2462, Springer, 2002, 200–214.
- [20] A. Müller und D. Stoyan, *Comparison models for stochastic models and risks*, John Wiley & Sons, 2002.
- [21] D. D. Sleator und R. E. Tarjan, *Amortized efficiency of list update and paging rules*, Comm. ACM **28** (1985), Nr. 2, 202–208.
- [22] E. D. Wikum, *One-machine generalized precedence constrained scheduling*, Dissertation, Georgia Institute of Technology, 1992.
- [23] E. D. Wikum, D. C. Llewellyn und G. L. Nemhauser, *One-machine generalized precedence constrained scheduling problems*, Operations Research Letters **16** (1994), 87–99.

### 2.2.11 Telekommunikation

Telekommunikation ist eine entscheidende Zukunftstechnologie, die immer anspruchsvollere Aufgaben erfüllt. Neue Anwendungen, Dienste und Online-Spiele erfordern hohe Datenraten. Gleichzeitig müssen die Netze robust geplant sein, denn einen Ausfall kann sich kein Anbieter leisten. Das ZIB hat über die Jahre enorme technische Erfahrung in diesem Bereich gesammelt und nutzt gleichzeitig die modernsten Methoden der Mathematik. Mit dieser einzigartigen Kombination unterstützen wir die Entwicklungen der modernen Telekommunikationsnetze. Hier werden alle relevanten Aspekte behandelt: von der Funkübertragung zwischen Handy und Sendemast bei UMTS zu betriebswirtschaftlichen Modellen für die neuerdings deregulierten Märkte, von der Optimierung der technischen Systeme einer Vermittlungsstelle bis hin zu den Hochgeschwindigkeitsnetzen, die enorme Datenmengen innerhalb eines Landes und zwischen Kontinenten übertragen.

Die mathematischen Methoden, die wir dafür einsetzen, sind äußerst vielfältig: je nach Anwendung und Problem kommen Spieltheorie, Graphenalgorithmen, ganzzahlige Optimierung oder stochastische Modelle zum Zuge. Auch die Grundlagenforschung wird nicht vernachlässigt, aber die praktische Anwendbarkeit der Verfahren und Ergebnisse verlieren wir dabei nie aus den Augen. Dass wir damit Erfolg haben, belegen die zahlreichen Industriekontakte und Projekte, die von verschiedenen Partnern finanziert werden.

Das ZIB ist aber auch weiterhin fest in die Gemeinschaft der Forschung integriert und kooperiert mit vielen Universitäten und Wissenschaftlern im In- und Ausland. Als besonders

erfreuliche neue Entwicklung ist in diesem Zusammenhang unser Engagement in der COST-Kooperation „GRAAL“ zu nennen.

### **Graphs and Algorithms in Communication Networks (GRAAL, COST 293)**

**Bearbeitet von:** Arie Koster (stellvertretender Vorsitzender), Hans-Florian Geerdes, Sebastian Orłowski

**Kooperationspartner:** École Polytechnique Paris, Frankreich; Politecnico di Milano, Italien; Linköpings Universität, Schweden; Eötvös Loránd University Budapest, Ungarn

**Förderung:** European Science Foundation, COST Office

Seit Oktober 2004 ist das ZIB beteiligt an der COST-Aktion 293 der European Science Foundation (ESF). Das Akronym COST steht für *Coopération européenne dans le domaine de la recherche scientifique et technique*; im Rahmen der COST-Programme fördert die ESF die Europäische Zusammenarbeit auf dem Gebiet der wissenschaftlichen und technischen Forschung. Im Bereich „Informations- und Telekommunikationswissenschaft“ beschäftigt sich die Aktion 293 mit Graphenmodellen und Algorithmen für Kommunikationsnetzwerke. In diesen Rahmen arbeiten Mathematiker, Informatiker und Ingenieure der Telekommunikationswissenschaften zusammen daran, interdisziplinäre Lösungen für bestehende und zukünftige Herausforderungen zu finden.

Die ESF fördert COST-Aktionen durch die Unterstützung von Arbeitskreis-Treffen der beteiligten Wissenschaftler, Fortbildungsangebote für Doktoranden und Post-Doktoranden sowie sogenannte „Short Term Scientific Missions“ (STSM, das heißt Kurzaufenthalte zu gezielten Forschungsthemen) zwischen den beteiligten Institutionen.

Im Berichtszeitraum wurden drei Arbeitstreffen in Budapest, Nottingham und Zürich organisiert. Zudem wurde in Zusammenarbeit mit ADONET (Algorithmic Discrete Optimization Network) eine *Spring-School* zum Thema „Combinatorial Optimization and Communication Networks“ in Budapest sowie, in Verbindung mit den 8. International Conference on Transparent Optical Networks (ICTON), ein Workshop zu den COST 293-Themen in Nottingham durchgeführt.

Weiter wurden zwei STSM mit Beteiligung des ZIB finanziert: ein ZIB-Mitarbeiter forschte zum Thema „Multi-Layer-Netze“ an der École Polytechnique in Paris (siehe Projekt *Matheon B3*), und ein Gast kam von der Eötvös Loránd Universität in Budapest ans ZIB, um das Thema „Demand-wise Shared Protection“ zu bearbeiten.

### **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 Kunden möglichst jederzeit und überall mobile Kommunikationsdienste in hoher Qualität nutzen können – und das zu einem fairen Preis. Eine wesentliche Grundlage hierfür ist, dass hohe *Netzabdeckung* mit ausreichender *Kapazität* auf Basis einer kostengünstigen Netzinfrastruktur realisiert werden kann. Weltweit setzen immer mehr Mobilfunkbetreiber auf UMTS (*Universal Mobile Telephony System*): UMTS-Mobiltelefone können große Datenmengen in kurzer

Zeit senden und empfangen, weil die Übertragung viel schneller stattfindet als mit herkömmlichen Mobilfunktechnologien wie GSM. Völlig neue mobile Dienste sind dadurch möglich, zum Beispiel schnelles Web-Surfen, Musikdownloads, oder interaktive Mehrbenutzerspiele.

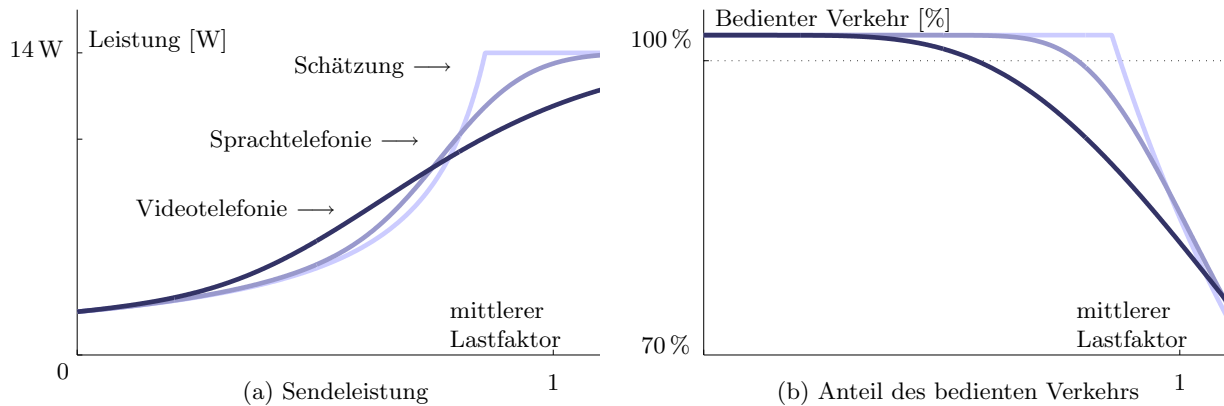


ABBILDUNG 2.46: Approximation der Auslastung einer UMTS-Zelle

Die Funknetzplanung ist im Fall von UMTS schwieriger als bei älteren Funkssystemen, da das Dienstangebot vielfältiger und die Technik komplexer ist. Die hohen Geschwindigkeiten werden bei UMTS unter anderem durch die neue Funktechnologie W-CDMA erreicht, bei der üblicherweise alle Basisstationen im selben Frequenzbereich senden. Dadurch stören sich die Signale von benachbarten Antennen – man spricht von Interferenz. Diese Interferenz muss durch gute Planung möglichst gering gehalten werden.

In diesem Projekt werden sowohl Modelle und Methoden zur effizienten Bewertung der Leistungsfähigkeit eines UMTS-Netzes als auch dessen Optimierung entwickelt.

Bei UMTS stellt bereits die Systemmodellierung eine Herausforderung dar, weil im Vergleich zu den Vorgängertechnologien Versorgungsreichweite und Auslastung der Zellen stark gekoppelt sind. Traditionell werden für die Ermittlung der Leistungsfähigkeit eines UMTS-Funknetzes daher aufwändige Simulationen eingesetzt. Für exakte Optimierungsmethoden fehlte allerdings bislang ein geschlossenes Systemmodell, und die langen Laufzeiten der Simulation behindern den Einsatz von heuristischen Suchmethoden. Eine umfassende Einführung in die Grundlagen von UMTS und aktuellen Methoden zur Optimierung von UMTS-Netzen ist Gegenstand des im Jahr 2006 erschienenen Buches [23]. Zu drei Kapiteln dieses Buches haben die Projektmitarbeiter wesentliche Beiträge geliefert.

In den vergangenen Jahren wurde ein kompaktes Systemmodell entwickelt, das auf *erwarteter Interferenzkopplung* basiert [13] und das eine schnelle und (für die Zwecke der Netzplanung hinreichend) gute Abschätzung der Auslastung der Zellen erlaubt [14]. Die Abschätzung ergibt sich als Lösung eines nichtlinearen Komplementaritätssystems [15]. Zusätzlich liefert dieses System eine Schätzung des Verkehrsvolumens, das im Fall von Überlast (Blockierung) durch die Zellen nicht bedient werden kann. Beispiele für die geschätzten Werte sind in Abbildung 2.46 illustriert. Die Blockierung ist aus praktischer Sicht ein wichtiges Qualitätsmaß, aber die so berechnete Abschätzung ist für praktische Zwecke von unzureichender Genauigkeit. Im Berichtszeitraum wurden daher verfeinerte Verfahren entwickelt, die nun schnell und mit guter Genauigkeit die Blockierungswahrscheinlichkeit je Zelle ermitteln [17].

Auf der Grundlage der neuen Systemmodelle und Schätzungen konnten erhebliche Fortschritte im Bereich der Optimierung gemacht werden. Dafür wird die zunächst nichtlineare Lastberechnung mit erwarteter Interferenzkopplung durch konvexe und lineare Funktionen angenähert. Diese Approximationen lassen sich als Optimierungsmodell formulieren, das in praktisch relevanten Größenordnungen gelöst werden kann. Die so berechneten Funknetze schaffen einen guten Kompromiss zwischen der Vermeidung von Interferenz zwischen den Zellen und der gleichmäßigen Verteilung der Nutzer auf verschiedene Zellen.

Wie einleitend dargestellt, handelt es sich bei UMTS um ein interferenzlimitiertes System. Obwohl einzigartig in der speziellen Ausprägung des Umgang mit Interferenz, lassen sich doch Erkenntnisse aus der Optimierung von UMTS-Netzen auf andere Typen von Funknetzen übertragen [12]. Im Berichtszeitraum wurden im Rahmen des internationalen Verbundes COST 293<sup>1</sup> die Möglichkeiten zur Optimierung des WLAN-Netzes im ersten und zweiten Obergeschoss des ZIB analysiert. Hierzu wurden die Gebäudedaten erhoben, Pfadverlustprädiktionen in Kooperation mit der TU Braunschweig ermittelt, mehrere alternative Optimierungsmodelle aufgestellt und entsprechende Optimierungsrechnungen durchgeführt [16]. Eine experimentelle Bewertung der (bislang theoretischen) Ergebnisse steht noch aus.

### Integrierte Planung von Multi-Layer-Netzen

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

**Kooperationspartner:** atesio GmbH, Berlin; Siemens Networks, München; T-Systems Enterprise Services GmbH, Berlin

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

Telekommunikationsnetze sind in Schichten (engl. *layer*) organisiert; dieses Prinzip ist in Abbildung 2.47 illustriert. Nutzerdaten wie Email, Telefon oder Video verpackt man in IP-Pakete; der IP-Verkehr wird dann wieder über ATM, SDH und schließlich optisch über WDM übertragen. Die Schichten basieren auf unterschiedlichen Technologien und sind jeweils für spezifische Aufgaben zuständig, wie beispielsweise Routingentscheidungen, Qualitätskontrolle oder Transport.

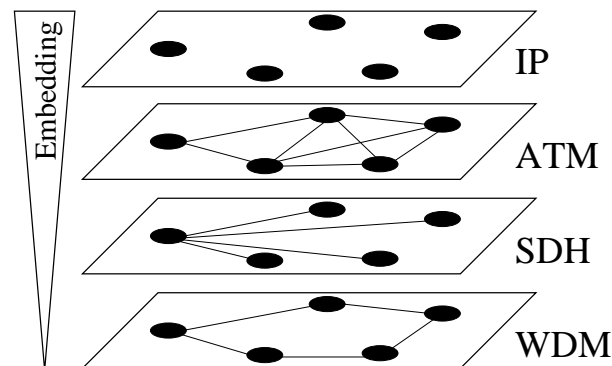


ABBILDUNG 2.47: Struktur eines Multi-Layer-Netzes

Bei der Planung eines solchen Netzes sind Entscheidungen zu treffen, die sich in hohem Maße gegenseitig beeinflussen. Dazu gehören Entscheidungen über Standorte und Verbindungen,

<sup>1</sup><http://www.cost293.org>



die Art und Kapazität der Verbindungen zwischen den Standorten, die Konfiguration der Hardware an den Standorten sowie das Routing aller Kommunikationsbedarfe unter Berücksichtigung von Ausfallsicherheit über mehrere Schichten hinweg.

Ziel des Projekts ist die Entwicklung von Modellen und Algorithmen zur *integrierten* Planung mehrerer Layer, um die bestehenden Abhängigkeiten angemessen zu berücksichtigen. Dabei verfolgen wir einen zweigleisigen Ansatz: einerseits erweitern wir bestehende Modelle und Algorithmen aus der Single-Layer-Planung auf konkrete, praxisnahe Multi-Layer-Planungsaufgaben, andererseits forschen wir an grundlegenden neuen algorithmischen Ansätzen für Relaxierungen, die in mehreren technologischen Zusammenhängen verwendet werden können.

Die Zusammenarbeit mit Pietro Belotti (ehemals DEI, Politecnico di Milano, Italien, jetzt Pittsburgh, USA) wurde im Rahmen eines dreiwöchentlichen Gastaufenthaltes an der École Polytechnique in Lozère bei Paris fortgesetzt. Hierbei wurde ein vereinfachtes Modell für die integrierte Planung von zwei Netzschichten untersucht, das die Grundlage vieler Multi-Layer-Planungsprobleme bildet. Die gemeinsame theoretische Arbeit an einem allgemeineren Lösungsansatz, bei dem die mathematische Formulierung im Laufe des Algorithmus sowohl um ganzzahlige Variablen als auch Ungleichungen erweitert wird, wurde fortgesetzt. Dieser mathematisch sehr komplexe Ansatz wird erst seit kurzer Zeit erfolgreich zur Lösung praktischer Probleme in anderen Bereichen der Optimierung eingesetzt und erfordert Spezialtechniken, die an das jeweilige Planungsproblem angepasst sind.

Gemeinsam mit dem Projekt *Multi-Layer-Transportnetze* wurden im Berichtszeitraum Primalheuristiken für ein konkretes IP/WDM-Planungsproblem mit vielen praktischen Nebenbedingungen entwickelt, die innerhalb eines gemischt-ganzzahligen Programmes wiederum eingeschränkte Teilprobleme optimal lösen. Dieser relativ neue Ansatz, der ursprünglich für allgemeine ganzzahlige lineare Programme entwickelt wurde und sich dort in den letzten Jahren bewährt hat, fand damit erstmals Verwendung bei der Planung von Telekommunikationsnetzen. Im Rahmen einer Studie wurden diese Primalheuristiken erfolgreich eingesetzt, um in kurzer Zeit gute Lösungen für Probleminstanzen praktisch relevanter Größe zu berechnen [24]. Dabei wurde auch berücksichtigt, dass in einem realen Multi-Layer-Netz sehr viele parallele logische Links zulässig sein können, was in der bisherigen Literatur oft zugunsten der Lösbarkeit vernachlässigt wurde. Gleichzeitig kann mit Hilfe der im Projekt *Multi-Layer-Transportnetze* entwickelten Schnittebenen die Qualität der berechneten Lösungen auf mathematisch fundierter Grundlage beurteilt werden.

### **Multi-Layer-Transportnetze**

**Bearbeitet von:** Arie Koster, Sebastian Orłowski, Christian Raack

**Kooperationspartner:** Siemens Networks, München

**Förderung:** Siemens Networks, München

Die Struktur von Telekommunikationsnetzen ändert sich momentan dramatisch. Immer mehr Anwendungen (E-mail, Video, Telefon und Mobilfunk usw.) werden gemeinsam über ein IP/MLPS-Netz geführt, das wiederum auf einem optischen Transportnetz aufsetzt.

Die Planung eines Zwei-Layer-Netzes umfasst u. a. die Planung einer Topologie für die IP-Netzschicht und die optische Netzschicht, die Dimensionierung von Hardware (Router, Multiplexer etc.) und Linkkapazitäten, sowie die Bestimmung eines Routings für gegebene Kommunikationsbedarfe. Auch Ausfallsicherheitsanforderungen müssen in der Planung berück-

sichtigt werden, um im Falle eines durchtrennten Kabels oder eines Hardware-Ausfalls den betroffenen Verkehr umrouten zu können.

Mangels besserer Planungsmethoden wurden bislang meistens die Routing- und die Transportschicht einzeln geplant, obwohl es starke Abhängigkeiten zwischen ihnen gibt. Die existierenden mathematischen Modelle für eine *integrierte Planung* beider Schichten sind mit konventionellen Ansätzen sehr schwer zu lösen.

Im Rahmen des einjährigen Projektes „Effiziente Berechnung kostengünstiger Lösungen für Multi-Layer-Transportnetze mit Hilfe spezieller Methoden der ganzzahligen Optimierung“ wurden für konkrete IP/DWDM-Planungsszenarien bewährte Algorithmen aus der Single-Layer-Netzplanung an eine integrierte Multi-Layer-Planung angepasst und erweitert. Untersucht wurden dabei unter anderem Schnittebenen, die nun bei Siemens Networks innerhalb eines Branch-and-cut-Algorithmus praktisch eingesetzt werden. Durch unsere Arbeiten konnten die Lösungszeiten für einige praktisch relevante Netzplanungsprobleme von einem Tag auf wenige Stunden reduziert werden.

### **Efficient Integrated Backbone (Eibone)**

**Bearbeitet von:** Arie Koster, Sebastian Orłowski, Christian Raack

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

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

Klassische Telekommunikationsdienste werden in Zukunft zunehmend eine gemeinsame Netzarchitektur nutzen. Schon heute dominieren ressourcen-intensive Echtzeitanwendungen, wie Voice over IP, Online-Rollenspiele oder Video-on-Demand den Internetverkehr. Im Mittelpunkt des bundesweiten BMBF-Vorhabens EIBONE steht die Entwicklung von Grundlagen für ein effizientes und zuverlässiges Kommunikationsnetz, mit dem auch die Bandbreiten- und Diensteanforderungen des 21. Jahrhunderts erfüllt werden können.

Die zu untersuchenden Kernnetze werden üblicherweise in mehreren Netzschichten organisiert. Bei der Planung und Dimensionierung solcher Multi-Layer-Netze müssen Beschränkungen der Hardware und der Technologien berücksichtigt werden, die verwendet werden sollen. Ziel ist ein robuster und zuverlässiger Netzbetrieb mit minimalen Investitions- und Betriebskosten unter optimaler Nutzung der verfügbaren Netzressourcen.

Das Ziel dieses Teilprojektes ist es, die theoretischen und algorithmischen Grundlagen zur experimentellen Untersuchung und Evaluierung von kostenoptimierten Architekturen für Multi-Layer-Netzwerke zu schaffen. Dazu sollen die modernen mathematischen Optimierungsmethoden des Operations Research, der Graphentheorie und der Polyedertheorie genutzt, spezialisiert und fortentwickelt werden.

Zur Beschreibung der technologischen Randbedingungen und zur Schaffung einer einheitlichen Datenbasis für alle Projektpartner arbeitet das ZIB in Kooperation mit atesio und den Systemherstellern an einer XML-Spezifikation für Multi-Layer-Netze. In einer ersten Version ermöglicht es diese bereits, Hardware an Netzknoten technologieübergreifend zu beschreiben. Basisdaten für Ethernet-, SDH- und WDM-Geräte liegen vor. Eine Erweiterung auf mögliche

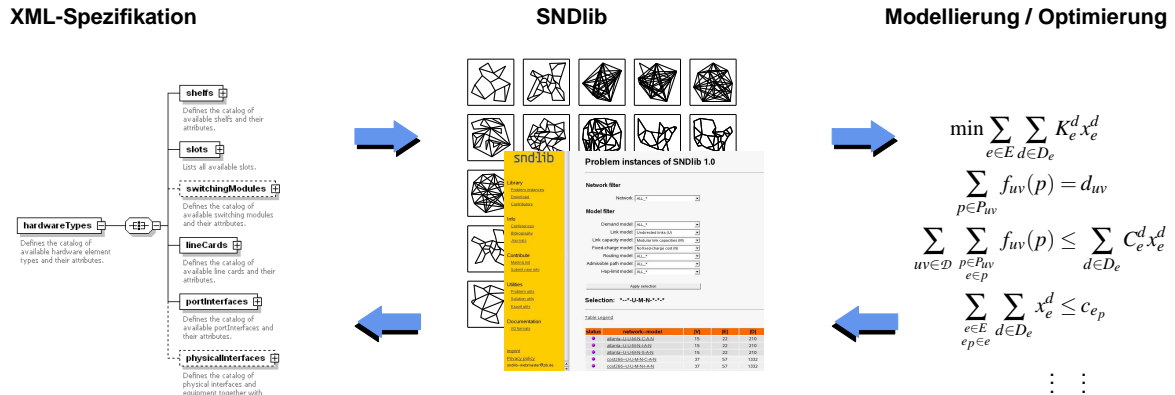


ABBILDUNG 2.48: Spezifikation und Optimierung

Kostenmodelle (CAPEX, OPEX) und verschiedene Bedarfsszenarien ist in Planung. Zusammen mit den Datensätzen aus der technologieunabhängigen „Survivable Network Design Data Library“ (*SNDlib*, vgl. Kapitel 6.3) wird die XML-Spezifikation als Grundlage für die Evaluierung verschiedener Multi-Layer-Architekturen dienen (siehe Abbildung 2.48).

Zum Vergleich alternativer Netzplanungsansätze ist es nötig, Aussagen über die Qualität von Referenzlösungen machen zu können. In diesem Zusammenhang wurden im Rahmen einer Diplomarbeit wichtige Klassen von Schnittebenen für Netzplanungsprobleme untersucht [27]. In einer Rechenstudie basierend auf Daten der *SNDlib* konnte die Effektivität dieser Ungleichungen innerhalb eines Branch-and-cut-Verfahrens nachgewiesen werden [26].

Bei den innerhalb von EIBONE betrachteten Multi-Layer-Netzen bildet ein optisches WDM-Netz die unterste technologische Schicht. In einer im Berichtszeitraum fertiggestellten Doktorarbeit [28] wurde die kostenoptimale Planung solcher optischen Glasfasernetze untersucht. Mit den entwickelten Methoden können, bei gegebenen Kommunikationsbedarfen, Lichtwege und Hardwarekomponenten kostenminimal konfiguriert werden. Bei der anschließenden Lösung des Wellenlängenzuordnungsproblems wird die Anzahl der benötigten Wellenlängenkonverter minimiert.

Ein neuartiges Konzept in der optischen Netzplanung ist die Berücksichtigung potentieller Probleme bei der Wellenlängenzuordnung bereits während der Berechnung des Routings. Durch zusätzliche Nebenbedingungen kann ein Großteil der möglichen Konflikte vermieden werden [20].

Ebenfalls im Berichtszeitraum wurde in Zusammenarbeit mit T-Systems das gemeinsam entwickelte Ausfallsicherheitskonzept *Demand-wise Shared Protection* (DSP) [22] eingehender untersucht und auf seine Praxistauglichkeit geprüft. In diesem Zusammenhang entstand eine Studie zur Verfügbarkeit von Verbindungen in optischen Netzen bei Anwendung unterschiedlicher Ausfallsicherheitskonzepte [19]. Zusätzlich konnte das Modell auf die Behandlung von Mehrfachausfällen verallgemeinert werden [21].

## 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 sowie 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. Im Berichtszeitraum wurde der DFN-Verein wie im Vorjahr bei der Modellierung und Lösung der praktischen Planungsprobleme beim Aufbau und Vertrieb des X-WiN unterstützt.

## 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; Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg; Universität Paderborn

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

Das politische Ziel der stärkeren Nutzung regenerativer Energiequellen erfordert eine grundlegende Umstrukturierung nationaler und internationaler Energieversorgungsnetze. Diese Infrastrukturen werden heutzutage überwiegend von wenigen großen Kraftwerken gespeist, die sich gut zentral steuern lassen. Künftig müssen jedoch auch zahlreiche kleinere und mittlere Erzeuger (Solaranlagen, Windparks etc.) integriert werden. Daraus resultieren stark dezentralisierte Versorgungsnetze, deren effektive und bedarfsgerechte Steuerung eine weitaus komplexere Aufgabe als für konventionelle Netze darstellt. Eine Grundvoraussetzung hierfür ist eine zuverlässige und wirtschaftliche Kommunikationsstruktur.

Das thematische Netzwerk „Optimierung des Einsatzes dezentraler Energieversorgungssysteme durch Einbindung moderner Kommunikationstechniken – Energie und Kommunikation“ befasst sich mit den neuen Fragestellungen, die bei Aufbau, Betrieb und Steuerung dezentraler Energieversorgungsnetze zu lösen sind. Dazu gehören zahlreiche informationstechnische Aspekte wie etwa eine geeignete Vernetzungshierarchie mit adäquater Informationsführung (Aggregation, Filterung etc.), die Ausarbeitung der notwendigen Übertragungsprotokolle sowie die Gestaltung der Schnittstellen zu den Anwendungen (Last- und Energiemanagement,

Anlagensteuerung, etc.). Hier bringt das ZIB seine langjährige Erfahrung bei der Planung und Optimierung von Telekommunikationsnetzen mit unterschiedlichen Technologien [6] ein. Zusammen mit den Experten der Energietechnik wurde die Planungsaufgabe detailliert beschrieben, und es wurden alle relevanten technischen und organisatorischen Bedingungen erfasst. Mithilfe der Modellierungssprache Zimpl (siehe Abschnitt 6.3) und den ebenfalls am ZIB entwickelten Lösungswerkzeugen Soplex (Abschnitt 6.3) und SCIP (Abschnitt 6.3) können solche Anwendungsprobleme bequem mathematisch modelliert und gelöst werden.

Neben der Erarbeitung eines plausiblen Netzszenarios für ein dezentrales Energieversorgungsnetz, das in Abbildung 2.49 abgebildet ist, wurde im Vorjahr bereits ein prototypisches mathematisches Modell [11] zur Optimierung der Kommunikationsstruktur für ein solches Szenario formuliert. Im Berichtszeitraum ist dieses Modell weiterentwickelt und präzisiert sowie für unterschiedliche Auswertungen eingesetzt worden [7]. So kann es etwa zur Bestimmung der kostengünstigsten Infrastruktur für die Vernetzung zu steuernder Standorte verwendet werden. Integriert ist auch die Auswahl der am besten geeigneten Technologien und Medien. Alternativ lässt sich mit dem Modell auch die Auslastung der Kommunikationsverbindungen evaluieren und für verschiedene Netzszenarien vergleichen. Solche Betrachtungen dienen insbesondere dem vorbeugenden Umgang mit Störfällen innerhalb des Netzes.

Darüber hinaus wurde in Zusammenarbeit mit den Partnern im Netzwerk „Energie und Kommunikation“ an der Empfehlung für einen einheitlichen Kommunikationsstandard in Energienetzen gearbeitet. Erst durch Festlegung solcher Standards kann eine effektive dezentrale Steuerung sowie ein reibungsloser Betrieb von unternehmens- und länderübergreifenden Energieversorgungsnetzen gewährleistet werden.

## Überlastkontrolle und Routing im Internet

**Bearbeitet von:** Tobias Harks

**Kooperationspartner:** University of California, Irvine, USA

**Förderung:** DFG-Graduiertenkolleg 621 „Stochastische Modellierung und quantitative Analyse großer Systeme in den Ingenieurwissenschaften“ (MAGSI)

Die Übertragung von digitalen Daten im Internet ist zu einem festen Bestandteil des modernen Alltags geworden. Um Daten von beliebigen Startknoten zu beliebigen Endknoten zu transferieren, müssen verschiedene autonome Netzanbieter diese Daten weiterleiten. Bisher basieren solche Durchleitungen auf dem *Best-effort*-Prinzip: Die Daten werden weitergeleitet, sobald dies möglich ist. In der Vergangenheit konnte jedoch beobachtet werden, dass dieses Prinzip zu Überlast und Datenstaus führen kann. Manche Internet-Anwendungen, wie z. B. Internet-Telefonie, erfordern jedoch feste Bandbreiten und Echtzeitgarantien. Damit solche Anwendungen funktionieren, müssen Internetanbieter entlang eines ausgewählten Weges kooperieren und entsprechende Ressourcen zur Verfügung stellen. Zusätzlich wird die Wegewahl dadurch erschwert, dass Datenanfragen *online* auftreten, also nicht immer antizipiert werden können.

Im Berichtszeitraum haben wir ein marktbasierendes Routing-Protokoll untersucht, das die Wegewahl und den Datentransfer zwischen Internetanbietern automatisiert. Mit Methoden der Online-Optimierung und Spieltheorie konnte gezeigt werden, dass die Effizienz dieses Protokolls nicht signifikant von einer sogenannten optimalen *Offline*-Lösung abweicht, bei der vollständiges Wissen über Datenanfragen vorausgesetzt wird.[18]. Diese theoretischen Ergebnisse wurden durch zahlreiche empirische Untersuchungen des Protokolls bestätigt.

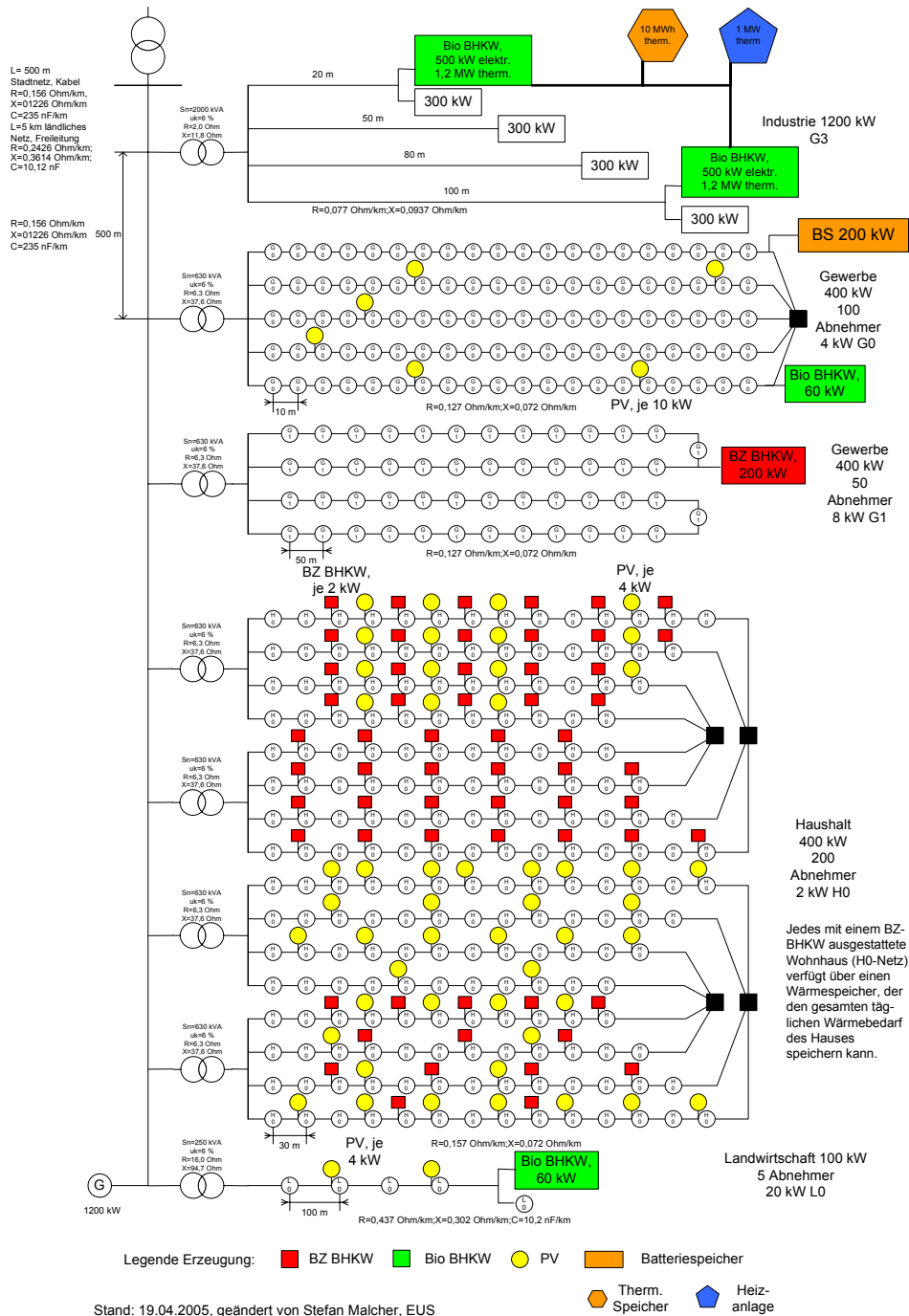


ABBILDUNG 2.49: Szenario eines dezentralen Versorgungsnetzes mit erneuerbaren Energien.

### 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 und aus einem Strom von Forderungen bestehen, im Echtzeitbetrieb parallel bearbeitet. Dafür werden ihnen unterschiedliche Systemressourcen zugewiesen. Um die Leistungsfähigkeit der Systeme zu erhöhen, kommt es verstärkt zum Einsatz von mehreren parallel arbeitenden Prozessoren (Multi-Prozessor-Systeme).

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, vgl. [9]. Falls die Forderungen der einzelnen Prozesse nicht parallel, sondern sequentiell bearbeitet werden müssen, führt dies dazu, dass für die Forderungen der verschiedenen Prozesse separate Warteschlangen aufgebaut werden.

In diesem Projekt wurden die Bedingungen untersucht, unter denen ein Multi-Prozessor-System mit mehreren Warteschlangen und Bedienpositionen (*Threads*) unter *Processor-Sharing* bei stationärem Input stabil ist. Ein wesentlicher Unterschied von Multi- gegenüber Einzel-Prozessor-Systemen besteht darin, dass Prozessoren leer laufen können, obwohl Arbeit im System vorhanden ist. Deshalb hängt die Stabilität derartiger Systeme bei gegebenen Lasten für die einzelnen Warteschlangen entscheidend von der Struktur des Ankunftsprozesses ab. Durch eine Analyse des besten und schlechtesten Falls in der Klasse aller stationären Ankunftsprozesse wurden notwendige sowie hinreichende Stabilitätsbedingungen hergeleitet, die sich – anders als bei Einzel-Prozessor-Systemen – teilweise deutlich voneinander unterscheiden, die aber innerhalb dieser Klasse scharf sind, vgl. [8].

Das Multi-Prozessor-System mit nur einer Warteschlange ist unter *Processor-Sharing* ein Spezialfall des verallgemeinerten *Processor-Sharings*, bei dem die Bedienraten für die einzelnen Forderungen im System zwar gleich sind, aber von der Anzahl der Forderungen im System beliebig abhängen können. Für das verallgemeinerte *Processor-Sharing* wurden stabile und effiziente Algorithmen zur Berechnung der Momente von Wartezeitverteilungen bei Poisson-Ankünften sowie exponentiellen und deterministischen Bedienzeiten entwickelt, vgl. [10] für den Fall exponentieller Bedienzeiten. Erstmals sind hiermit höhere Momente der Warte- oder Verweilzeitverteilung für Multi-Prozessor-Systeme unter *Processor-Sharing* auch außerhalb von Phasentyp-Modellen exakt berechenbar. Für allgemeine Bedienzeitverteilungen gelang es, durch eine Anpassung der ersten beiden Momente der Bedienzeitverteilung, eine gute Approximation für die Varianz der Wartezeitverteilung zu entwickeln.

**Publikationen**

- [1] H.-M. Adler, *X-WiN startbereit*, DFN-Mitteilungen **69** (2005), 7–9.
- [2] A. Bley, *Finding small administrative lengths for shortest path routing*, Proc. INOC 2005 (Lissabon, Portugal), Bd. 1, 2005.
- [3] A. Bley, *Inapproximability results for the inverse shortest paths problem with integer lengths and unique shortest paths*, Report 05-04, ZIB, 2005.
- [4] A. Bley, *On the approximability of the minimum congestion unsplittable shortest path routing problem*, Proc. IPCO 2005 (Berlin), 2005, 97–110.
- [5] A. Bley und M. Pattloch, *Modellierung und Optimierung der X-WiN Plattform*, DFN-Mitteilungen **67** (2005), 4–7.
- [6] A. Bley und A. Zymolka, *Planung kostenoptimaler Informations- und Kommunikations-Infrastrukturen*, Tagungsband „Achstes Kasseler Symposium Energie-Systemtechnik: Energie und Kommunikation“ (Kassel), 2003, 61–77.
- [7] A. Bley, F. Kupzog und A. Zymolka, *Auslegung heterogener Kommunikationsnetze nach Performance und Wirtschaftlichkeit*, Tagungsband „Elftes Kasseler Symposium Energie-Systemtechnik: Energie und Kommunikation“ (Kassel), 2006.
- [8] A. Brandt und M. Brandt, *On the stability of the multi-queue multi-server processor sharing with limited service*, Report 06-25, ZIB, 2006.
- [9] A. Brandt und M. Brandt, *A sample path relation for the sojourn times in G/G/1-PS systems and its applications*, Queueing Syst. **52** (2006), 281–286.
- [10] A. Brandt und M. Brandt, *Waiting times for M/M systems under generalized processor sharing*, Report 06-46, ZIB, 2006.
- [11] B. Buchholz, *Netzwerk Energie und Kommunikation – Kommunikation im Verteilnetz*, Tagungsband „Zehntes Kasseler Symposium Energie-Systemtechnik: Die Zukunft der elektrischen Verteilnetze“ (Kassel), 2005, 154–167.
- [12] A. Eisenblätter und H.-F. Geerdes, *Wireless network design: Solution-oriented modeling and mathematical optimization*, IEEE Wireless Communications **13** (2006), Nr. 6, 8–14, Sonderausgabe „3G/4G/WLAN/WMAN Planning and Optimization“.
- [13] 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.
- [14] 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. of VTC-2005 Spring (Stockholm, Schweden), IEEE, 2005.
- [15] 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.



- 
- [16] A. Eisenblätter, H.-F. Geerdes und I. Siomina, *Integrated access point placement and channel assignment for wireless LANs in an indoor office environment*, Proc. Wow-MoM'07 (Helsinki, Finnland), 2007, noch nicht erschienen.
- [17] H.-F. Geerdes und F. Ryll, *Efficient approximation of blocking rates in UMTS radio networks*, Proc. PGTS'06 (Breslau, Polen), 2006.
- [18] Tobias Harks, Stefan Heinz, and Marc E. Pfetsch, *Competitive online multicommodity routing*, Proc. Workshop on Approximation and Online Algorithms (WAOA) 2006 (Thomas Erlebach and Christos Kaklamani, eds.), LNCS, vol. 4368, Springer, Berlin Heidelberg, 2006, pp. 240–252.
- [19] R. Hülsermann, M. Jäger, A. M. C. A. Koster, S. Orlowski, R. Wessäly und A. Zymolka, *Availability and cost based evaluation of demand-wise shared protection*, Proceedings 7th ITG-Workshop on Photonic Networks (Leipzig, Germany), VDE Verlag GmbH, 2006, 161–168.
- [20] A. M. C. A. Koster und M. Scheffel, *A routing and network dimensioning strategy to reduce wavelength continuity conflicts in all-optical networks*, Optimization Online preprint 1526, Optimization Online, November 2006, akzeptiert bei der Konferenz INOC 2007.
- [21] A. M. C. A. Koster und A. Zymolka, *Demand-wise shared protection and multiple failures*, 2006, noch nicht erschienen, akzeptiert bei der Konferenz INOC 2007.
- [22] 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.
- [23] M. Nawrocki, H. Aghvami und M. Dohler (Hg.), *Understanding UMTS radio network modelling, planning and automated optimisation: Theory and practice*, Wiley, 2006.
- [24] S. Orlowski, A. M. C. A. Koster, C. Raack und R. Wessäly, *Two-layer network design by branch-and-cut featuring MIP-based heuristics*, Report 06-47, ZIB, 2006, Akzeptiert bei der Konferenz INOC 2007.
- [25] J. Pattloch, *Mehr Verfügbarkeit im X-WiN*, DFN-Mitteilungen **69** (2005), 4–6.
- [26] C. Raack, A. M. C. A. Koster, S. Orlowski und R. Wessäly, *Capacitated network design using general flow-cutset inequalities*, Optimization Online preprint 1525, Optimization Online, November 2006, akzeptiert bei der Konferenz INOC 2007.
- [27] C. Raack, *Employing Mixed-Integer Rounding in Telecommunication Network Design*, Diplomarbeit, TU Berlin, Dezember 2006.
- [28] A. Zymolka, *Survivable Optical Network Design by Mathematical Optimization*, Doktorarbeit, TU Berlin, Dezember 2006.

### 2.2.12 Verifikation

Sowohl die Komplexität von Hard- und Softwaresystemen als auch unsere Abhängigkeit von ihnen nimmt auf allen Ebenen beständig zu. Die Anzahl der Transistoren in integrierten Schaltkreisen bricht Jahr für Jahr neue Rekorde und die Anzahl der verbauten Mikroprozessoren steigt immer weiter an. Seien es Waschmaschinen, Autos oder Fabrikanlagen, ohne komplexe Hard- und Softwaresysteme geht nichts mehr. Andererseits steigt mit zunehmender Komplexität der Aufwand, die Korrektheit dieser Systeme zu testen. Die Simulation ist seit langem ein bewährtes Mittel zum Testen. Durch das Größenwachstum wird der Anteil der während der Tests simulierten Zustände eines Chips aber immer kleiner, und somit werden die Resultate immer unsicherer. Einen Ausweg bietet möglicherweise die formale Verifikation, die mathematisch die Richtigkeit eines Systems beweist. Die Probleme, die sich hierbei stellen, sind allerdings vielfältig und ebenfalls komplex. Insbesondere in diesem Gebiet ist es gleichermaßen schwierig wie notwendig, die Theorie mit der Praxis zusammenzuführen, um mit praktisch nutzbringenden Resultaten die Sicherheit unserer Systeme zu verbessern.

Im Rahmen dieses Schwerpunkts haben wir uns im Berichtszeitraum mit zwei speziellen praxisrelevanten Fragestellungen auseinandergesetzt, um zum einen die Verifikation von arithmetischen Schaltungen zu beschleunigen und zum anderen ein Maß für den Fortschritt des Verifikationsprozesses zu finden. Beide Probleme lassen sich in einen breiten mathematischen Kontext einbinden, der die Antworten auch für andere Fragestellungen interessant macht.

Wir hoffen diesen Bereich in der Zukunft durch weitere Projekte und Kooperationen z. B. mit den entsprechenden Gruppen an der TU und FU Berlin ausbauen zu können, zumal sich Fragen der Verifikation nicht nur bei integrierten Schaltkreisen, sondern auch bei Software und in der Bioinformatik in erheblichem Umfang stellen.

#### **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:** DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt D17

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 in die so genannte Register-Transfer-Ebene umgesetzt, 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.

Im Jahr 2005 wurde die vom ZIB bearbeitete Teilaufgabe des BMBF-Projektes „Valse-XT“ zur Entwicklung von Beweistechniken auf Register-Transfer-Ebene (RT-Ebene) erfolgreich abgeschlossen. Auf dieser Ebene sind die Register nicht vollständig in Bits aufgelöst, sondern werden als ganze Zahlen entsprechender Bitbreite behandelt. Dadurch können strukturelle Eigenschaften der Schaltung für den Beweis einer Eigenschaft besser ausgenutzt werden, wodurch es gelingt, einige Schaltungen mit für SAT-Löser schwierigen arithmetischen Operationen deutlich effizienter zu verifizieren.

Der Ansatz des ZIB ist es, das Verifikationsproblem auf Register-Transfer-Ebene als Constraint Integer Program (CIP) zu modellieren und mit einer Kombination von Techniken des Mixed Integer Programming (MIP) und des Constraint Programming (CP) zu lösen. Dazu wird das am ZIB entwickelte Framework SCIP [1] zur Lösung von CIPs eingesetzt.

Seit Juni 2006 wird diese Technik im Rahmen des MATHEON-Projektes D17 „Chip design verification with constraint integer programming“ weiterverfolgt. Im Berichtsjahr wurden die Verfahren zur Konfliktanalyse (siehe [2]) weiter verbessert, und ihr Einsatz innerhalb der Verifikations-Software wurde ausgebaut, insbesondere bei der Behandlung von Multiplikationen. Außerdem wurden zusätzliche Preprocessing- und Propagierungs-Techniken integriert.

Schaltung	#E	ungelöst		geom. Mittel		mod. geom.		arithm. Mittel	
		SAT	CIP	SAT	CIP	SAT	CIP	SAT	CIP
ALU	72	13	0	0,9 s	<b>0,3 s</b>	84,8 s	<b>8,1 s</b>	1301,5 s	<b>19,4 s</b>
biquad A	8	1	0	<b>2,1 s</b>	7,7 s	<b>81,5 s</b>	98,5 s	938,3 s	<b>390,4 s</b>
biquad B	9	1	0	2,3 s	<b>1,6 s</b>	67,9 s	<b>32,7 s</b>	824,1 s	<b>138,2 s</b>
biquad C	8	1	0	3,2 s	<b>2,7 s</b>	77,6 s	<b>41,5 s</b>	926,1 s	<b>131,8 s</b>
bitlvl mult	20	0	0	<b>4,1 s</b>	14,5 s	<b>87,7 s</b>	122,5 s	789,5 s	<b>565,3 s</b>
adder	32	0	0	3,1 s	<b>0,1 s</b>	35,8 s	<b>0,1 s</b>	328,1 s	<b>0,1 s</b>
multiply	32	28	0	2992,0 s	<b>0,9 s</b>	4009,5 s	<b>4,3 s</b>	6301,5 s	<b>4,9 s</b>

Tabelle 2.1: Verifikation gültiger Eigenschaften für verschiedene Schaltungen.

Tabelle 2.1 vergleicht den herkömmlichen SAT-Ansatz mit den neu entwickelten CIP-Techniken. Als SAT-Löser wurde MiniSat 2.0 verwendet, der einer der zur Zeit schnellsten Löser für SAT-Probleme ist.

Zu jeder Schaltung ist die Anzahl an zu prüfenden Eigenschaften (#E) angegeben, sowie die Anzahl an Eigenschaften, die mit dem jeweiligen Verfahren nicht in zwei Stunden verifiziert werden konnten. Außerdem sind verschiedene Mittelwerte der Laufzeiten angegeben, wobei nicht gelöste Eigenschaften mit 7.200 Sekunden gewertet wurden. Die Mittelwerte sind wie folgt definiert:

- geometrisches Mittel:  $\phi_g(t_1, \dots, t_n) = (\prod_{i=1}^n t_i)^{\frac{1}{n}}$
- modifiziertes geom. Mittel:  $\phi_{mg}(t_1, \dots, t_n) = (\prod_{i=1}^n (t_i + 60))^{\frac{1}{n}} - 60$
- arithmetisches Mittel:  $\phi_a(t_1, \dots, t_n) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n t_i$

Das geometrische Mittel wird vorwiegend von den einfachen Instanzen beeinflusst, während das arithmetische Mittel von den schwierigen Instanzen mit langer Laufzeit dominiert wird. Das modifizierte geometrische Mittel stellt einen Kompromiss zwischen beiden Maßen dar: es wird nicht von den schwierigen Instanzen dominiert, reduziert aber den Einfluss der sehr einfachen Instanzen.

Die Tabelle zeigt, dass mit CIP-Techniken alle betrachteten Eigenschaften in jeweils höchstens zwei Stunden verifiziert werden konnten. Dies gilt nicht für den herkömmlichen SAT-Ansatz. Insbesondere bei den Multiplikationsschaltkreisen *multiply* konnte mit SAT die Gültigkeit der Eigenschaften nur auf den kleinsten Schaltungen bewiesen werden.

Die Betrachtung der geometrischen Laufzeitmittelwerte zeigt, dass auf sehr einfachen Instanzen beide Techniken in etwa gleichwertig sind. Für schwieriger werdende Instanzen zeigen aber das modifizierte geometrische Mittel und insbesondere das arithmetische Mittel, dass CIP auf den betrachteten Schaltungen dem SAT-Verfahren überlegen ist.

### **Berechnung eines Vollständigkeitsmaßes für Eigenschaftsprüfungen in der Chipverifikation**

**Bearbeitet von:** Stefan Heinz, Thorsten Koch

**Kooperationspartner:** Jörg Bormann, OneSpin Solutions GmbH, München

**Förderung:** OneSpin Solutions GmbH, München

Die Chipverifikation beschäftigt sich unter anderem mit der Überprüfung, ob ein gegebener Mikrochip „korrekt“ arbeitet. Dabei heißt „korrekt“, dass jede mögliche Eingabe zu der zu erwarteten Ausgabe führt. Ein möglicher Algorithmus für die Überprüfung der Korrektheit eines Mikrochips ist, alle möglichen Eingabemuster zu simulieren und dabei zu überprüfen, ob die entsprechenden Ausgaben richtig sind. Dieser Algorithmus wird zur Zeit in der Industrie genutzt, um Chips lokal auf Korrektheit zu überprüfen. Jedoch ist dieser Algorithmus zu zeitaufwendig, um einen Chip auf globale Korrektheit zu testen.

In den letzten Jahren wurden verstärkt Eigenschaftsprüfer genutzt, um die Korrektheit von Chips zu testen. Diese überprüfen, ob alle möglichen Eingabemuster eine gewisse Eigenschaft erfüllen. Eine solche Eigenschaft ist in einer formalen Sprache beschrieben und stellt bestimmte Aspekte des Verhaltens eines Chips dar. Dieses Verfahren brachte einen großen Fortschritt gegenüber der Simulation. Es verifiziert jedoch einen Chip nur punktuell, so dass die globale Korrektheit offen bleibt.

Aus der Summe dieser partiellen Beweise kann man nun unter Umständen auf die Korrektheit des ganzen Chips schließen. Ist nur ein Teil der notwendigen Teilbeweise erbracht, stellt sich die Frage, wie weit man von einem vollständigen Beweis entfernt ist. Sei das Maß für diesen Fortschritt eine Zahl zwischen 0 und 1, so muss es notwendigerweise zwei Eigenschaften erfüllen: (i) das Maß darf genau dann und nur dann 1 sein, wenn die Korrektheit der Schaltung vollständig bewiesen ist. (ii) das Maß muss monoton sein, d. h. wenn man weitere Informationen hinzufügt, so darf das neue Maß nicht kleiner als das alte Maß sein. Um dieses Maß zu berechnen ist es nötig, alle Lösungen eines Constraint Program explizit zu zählen. Es ist bekannt, dass dieses Problem zur Klasse  $\#P$  (sharp  $P$ ) gehört. In diesem Projekt haben wir uns damit beschäftigt, zu analysieren, inwieweit es machbar ist, ein solches Maß für relevante Beispiele in einer vertretbaren Zeit zu berechnen. Zu diesem Zweck wurde das SCIP-Paket für diese Aufgabe erweitert. Wie erwartet, hat sich herausgestellt, dass das reine Enumerieren von Lösungen nicht zum Ziel führt. Durch intensive Forschung ist es uns schließlich gelungen,

das Zählen von Lösungen soweit zu beschleunigen, das relevante Beispiele berechnet werden konnten.

### 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.

#### 2.2.13 Verkehr

Neben den klassischen Aufgabenstellungen der operativen Planung, das heißt dem bestmöglichen Einsatz der Betriebsmittel, werden in der Verkehrsoptimierung in jüngster Zeit verstärkt auch Themen der Angebotsplanung untersucht. Im öffentlichen Nahverkehr versteht man darunter die Themen der Netz-, Linien-, Fahr- und Preisplanung, im Schienenverkehr kommt die Fahrtrassenplanung hinzu, während der Luftverkehr wiederum etwas anders organisiert ist.

All diesen Fragen gemeinsam ist eine hohe Komplexität: Unterschiedliche Ziele wie Kosten und Qualität sind gegeneinander abzuwägen, Angebot und Nachfrage beeinflussen einander, selbst die Bestimmung scheinbar einfacher Größen wie der Kosten oder der Qualität eines Netz- oder Linienplans ist eigentlich unmöglich ohne den genauen Fahrplan, der aber entweder erst später berechnet wird oder bei integrierter Betrachtung des Problems zu enorm schwierigen Modellen führt.

Trotz dieser Schwierigkeiten lohnt es sich, diese Probleme zu untersuchen. Ein Grund ist, dass der Einsatz von Optimierungsverfahren in der Angebotsplanung in den Kinderschuhen steckt, so dass es möglicherweise ein enormes Potential gibt. Ein zweiter Grund ist, dass Entwicklungen wie die Liberalisierung des öffentlichen Verkehrs oder technische Innovationen wie „Elektronic Ticketing“ dazu führen, dass aus den Anwendungen heraus ein Bedarf nach Optimierung entsteht.

Wir bearbeiten in diesem Schwerpunkt drei Projekte, die in diese Richtung zielen. Das Projekt *Angebotsplanung im Öffentlichen Nahverkehr* befasst sich mit der Entwicklung von Optimierungsverfahren zur Linien-, Preis- und integrierten Linien- und Fahrplanung. Die mathematischen Ansätze verbinden Elemente der stochastischen Optimierung zur Modellierung von Nachfrage, der diskreten und der nichtlinearen Optimierung. Das Projekt *Trassenbörse* bezieht Konkurrenz in den Bahnverkehr ein. Wir entwickeln dort leistungsfähige kombinatorische Verfahren zur Bestimmung einer erlösmaximalen konfliktfreien Trassenallokation in einem mesoskopischen Eisenbahnnetz. Im Projekt *Cost-sharing* werden spieltheoretische Ansätze verfolgt, um die Kosten einer gemeinsam genutzten Infrastruktur fair auf die Nutzer umzulegen.

Durch die nichtlinearen Elemente in den Modellen zur Angebotsplanung entstehen Anknüpfungspunkte zum Schwerpunkt *Nichtlineare Optimierung und optimale Steuerung*.

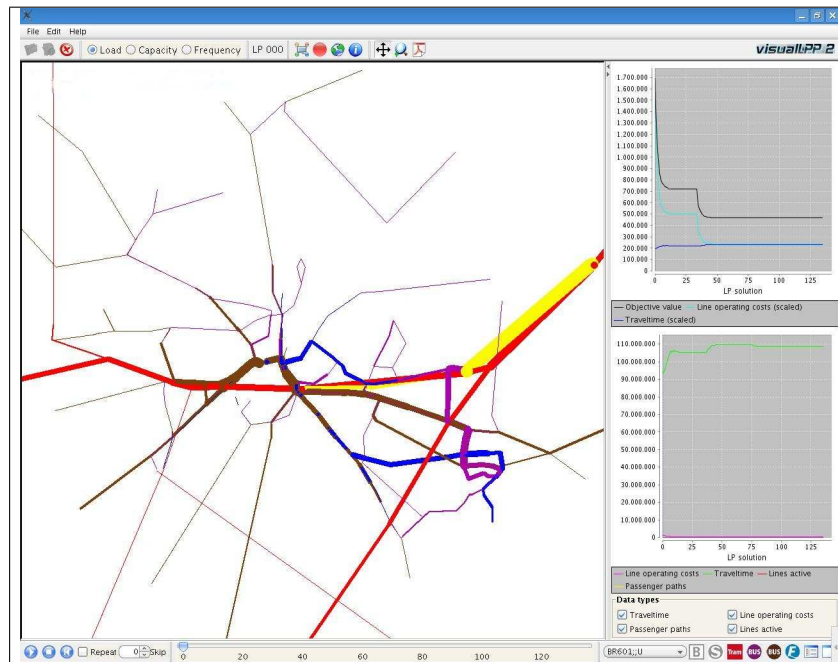


ABBILDUNG 2.50: Visualisierungstool für die Linienplanung.

## Angebotsplanung im Öffentlichen Nahverkehr

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

**Kooperationspartner:** Christian Liebchen, Rolf Möhring, Sebastian Stiller, TU Berlin; IVU Traffic Technologies AG, Berlin; ViP Verkehrsbetrieb Potsdam GmbH

**Förderung:** DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt B15

In der Angebotsplanung geht es darum, ein Öffentliches Nahverkehrssystem zu entwerfen, das gleichermaßen attraktiv für die Passagiere und kostengünstig für die Betreiber ist. Hierbei müssen strategische Planungsprozesse durchgeführt werden. Üblicherweise erfolgt nacheinander die Planung des Netzes, des Linienverlaufs, der Frequenzen der Linien und des Fahrplans; außerdem werden die Preise festgelegt.

Ziel dieses Projektes ist es, die Optimierungsverfahren zur Linien-, Fahr- und Preisplanung weiter zu entwickeln und zu einem integrierten Ansatz zu verschmelzen. Im Berichtszeitraum haben wir erste Modelle zur Integration von Fahrplanung und Linienplanung entwickelt, sowie die Untersuchung der Linien- und Preisplanung fortgesetzt.

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

Wir haben bereits in [2, 3] ein wegbasiertes Mehrgüterflussmodell für die Linienplanung entwickelt, das die Wege von Passagieren und Linien im Netz miteinander verknüpft. Mit kombinatorischen Optimierungsmethoden konnten wir die LP-Relaxierung des Linienplanungsproblems, die auf ein NP-schweres Längste-Wege-Problem führt, 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. Unsere Aktivitäten im letzten Jahr konzentrierten sich auf die Entwicklung von Primalheuristiken. Wir erhielten dadurch sehr gute Startlösungen für eine gemischt-ganzzahlige Version des Problems mit Fixkosten. Wir konnten unser Branch-and-cut-Verfahren außerdem durch neue Schnittungleichungen verbessern. Wir arbeiten nun daran, einen optimalen ganzzahligen Linienplan für Potsdam in vertretbarer Zeit zu berechnen.

Zur Visualisierung unserer Ergebnisse haben wir ein Tool entwickelt, mit dem man sich für jede Lösung die Kapazitäten und Frequenzen der Linien sowie den Passagierfluss auf allen Kanten ansehen kann, siehe Abbildung 2.50. Außerdem ist eine Animation des Lösungsverlaufs möglich.

In der *integrierten Fahr- und Linienplanung* geht es darum, einen Fahr- und Linienplan zu finden, der sowohl Passagier- als auch Unternehmensinteressen verbindet. Einerseits sollen die Kosten des Linienangebots minimiert werden. Andererseits sollen die Fahrzeiten der Passagiere inklusive Umsteige- und Wartezeiten, die sich aus einem Fahrplan ergeben, berücksichtigt werden. Wir haben einen integrierten Ansatz entwickelt, der auf ein nichtlineares Modell führt. Wir untersuchen zur Zeit Möglichkeiten, Verfahren zum Lösen bilinearer Probleme sowie Verfahren aus dem Bereich Bilevel Programming auf unser Modell anzuwenden.

Ziel der *Preisplanung* ist der Entwurf eines Preissystems mit verschiedenen Fahrkartentypen, so dass z. B. die Wirtschaftlichkeit eines Nahverkehrsunternehmens erhöht werden kann. 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 in den Vorjahren entwickeltes nichtlineares Modell zur Maximierung der Einnahmen [5, 4, 13] erweitert. In diesem Modell sind nun nicht mehr nur die Preise und die Nachfrage variabel, sondern auch die Frequenzen der Linien. Dadurch ist es möglich, Kosten, die durch das Betreiben der Linien entstehen, in das Modell einzubeziehen. Mit diesem Ansatz können wir einerseits Preise berechnen, die den Gewinn eines Nahverkehrsunternehmens maximieren; andererseits können wir die maximale Nachfrage bestimmen, mit der der Nahverkehr kein Verlustgeschäft ist. Weiterhin haben wir Subventionen in unser Modell integriert. Diese Subventionen können z. B. investiert werden, um die Nachfrage weiter zu erhöhen.

Durch die Anwendung von Standardsoftware haben wir mit diesen Modellen verschiedene Preissysteme für das Netz von Potsdam optimiert. Die Daten wurden von unseren Kooperationspartnern zur Verfügung gestellt.

### Trassenbörse

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

**Kooperationspartner:** Institut für Land- und Seeverkehr, Fachgebiet Schienenfahrwege und Bahnbetrieb (SFWBB), TU Berlin; 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 Wirtschaft und Technologie

Seit der Öffnung des Schienennetzes für Eisenbahnverkehrsunternehmen wird diskutiert, wie der Wettbewerb auf der Schiene effizient und diskriminierungsfrei zu organisieren ist: der Zugang zum Schienennetz, der Modus der Trassenvergabe, das Trassenpreissystem und der

Interessenausgleich im Fall konkurrierender Trassenwünsche. Ziel des Forschungsprojektes Trassenbörse ist die Entwicklung eines Instrumentariums für einen echten, wettbewerblichen Trassenmarkt – statt einer simplen Vergabe der Trassen untersuchen wir die visionäre Idee einer Trassenauktion.

An dem interdisziplinären Forschungsprojekt arbeiten wir mit Wissenschaftlern aus den Bereichen Schienenfahrwege und Bahnbetrieb, Wirtschafts- und Infrastrukturpolitik zusammen. Ziel des Projekts Trassenbörse ist die Entwicklung einer Marktordnung, die eine optimale Nutzung der Schieneninfrastruktur ermöglicht. Dabei geht es um die beste Nutzung oder Verwertung des Schienennetzes. Diese verlangt, dass sich die Trassenvergabe an der Zahlungsbereitschaft der einzelnen, konkurrierenden Eisenbahnverkehrsunternehmen ausrichtet.

Auktionen sollen sicherstellen, dass bei konkurrierenden Netzansprüchen (vorrangig auf Engpassstrecken in der Hauptverkehrszeit) diejenigen Nachfrager zum Zuge kommen, die die höchsten Zahlungsbereitschaften haben bzw. das höchste Gebot abgeben. Unsere Projektpartner vom WIP arbeiten daher vorrangig daran, ein geeignetes Design und Regelwerk für eine solch komplexe kombinatorische Auktion zu finden.

Der Detaillierungsgrad des Systems Schiene muss einerseits hoch sein, damit alle Zugtrassen, die verauktionsiert werden, auch tatsächlich konfliktfrei befahren werden können. Andererseits darf das mathematische Optimierungsmodul aber nicht durch womöglich redundante Informationen überlastet werden, sei es durch eine weichengenaue Darstellung aller Strecken oder durch eine exakte Abbildung der Fahrdynamiken aller vorstellbaren Züge. Unter Einbeziehung aller Feinheiten zu optimieren, würde sowohl an der Datenerhebung als auch an der aktuellen Rechenleistung scheitern, da die kombinatorische Komplexität des Problems zu hoch ist. Daher arbeiten unsere Projektpartner vom SFWBB und IVE an zwei unterschiedlichen Modellen: Zum einen an einer mikroskopischen Sichtweise zur gleis- und weichengenaue Simulation individueller Züge mit individuellen Fahrverhalten, die die Umsetzbarkeit des speziellen Zuges in der Realität gewährleistet; zum anderen an einer makroskopischen Modellierung, deren standardisierte Annahmen bzgl. der Zugeigenschaften und deren Fahrdynamiken eine Optimierung im streng mathematischen Sinn erst ermöglichen.

In unserem Projektteil zur mathematischen Optimierung ermitteln wir in jeder einzelnen Auktionsrunde aus der Vielzahl unterschiedlicher Gebote diejenige konfliktfreie Kombination, die den Erlös des Netzes maximiert. Damit wird erstmalig die Nutzung eines Schienennetzes einer simultanen Optimierung unterzogen. Dies steht im Gegensatz zur traditionellen Vorgehensweise, historisch gewachsene Fahrpläne stückweise weiter zu entwickeln.

Um dieses komplexe Optimierungsproblem zu bewältigen, haben wir in den Vorperioden ein ganzzahliges Optimierungsmodell (OPTRA) entwickelt. Das gesamte Zusammenspiel wurde in [1] veröffentlicht. Erweiterungen in Bezug auf Anschlussverbindungen und dazugehörige Auktionsexperimente auf realistischen Daten eines relevanten Teilnetzes der Deutschen Bahn werden in der Diplomarbeit [12] diskutiert. Im Laufe der aktuellen Projektphase II sind wir auf Problemeinsichten und Strukturen gestoßen, die zu neuen mathematischen Modellen führten. Diese beinhalten enorme Vorteile hinsichtlich der Lösbarkeit von großen Instanzen, da sie durch effiziente Spaltenerzeugungsverfahren gelöst werden können. Dem langfristigen Ziel, dem Lösen von realitätsnahen und großen Instanzen, sind wir mit der Entwicklung der Spezialsoftware TS-OPT einen Schritt näher gekommen. Kern dieses Optimierungsmoduls sind neben dem angesprochenen Spaltenerzeugungsverfahren zum Lösen der linearen Relaxierungen, speziell auf das Trassenallokationsproblem angepasste IP-Heuristiken zur Be-



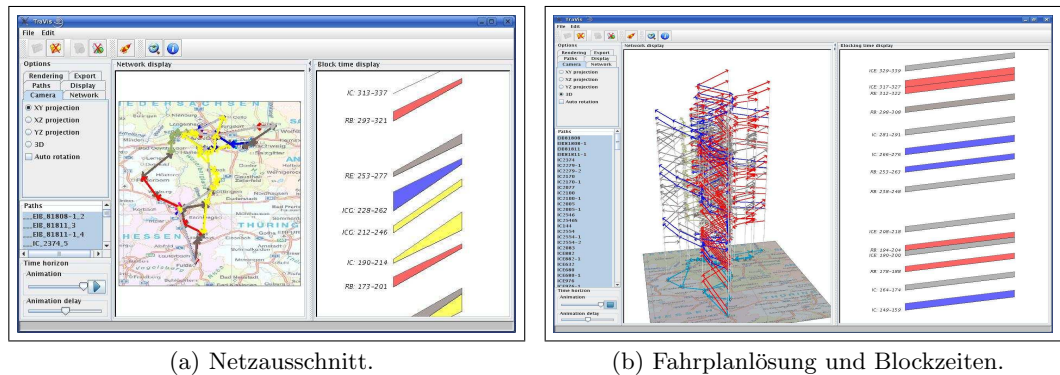


ABBILDUNG 2.51: Screenshots des Visualisierungstools TraVis.

schleunigung des Branch-and-bound-Verfahrens. Diese Software versetzt uns erstmals in die Lage, Instanzen mit mehreren hundert flexiblen und fixierten Zügen optimal zu lösen, siehe Abbildung 2.51 für eine Visualisierung.

### Cost-sharing

**Bearbeitet von:** Nam Dung Hoang

**Förderung:** ZIB (Konrad-Zuse-Stipendium)

Cost-sharing ist eine Art von Spiel, in dem Kosten unter unterschiedlichen Mitgliedern einer Organisation oder Kooperation aufgeteilt werden. Die Anforderungen bei einer solchen Kosten-Allokation sind Effizienz, Gerechtigkeit und Anreiz zur Zusammenarbeit. Zusammenarbeit kann die Kosten reduzieren; aber Zusammenarbeit kann nur entstehen, wenn alle Parteien sich einigen können, wie viel jeder bezahlen muss. Das ist die Fragestellung des Projekts Cost-sharing, nämlich, wie die gemeinsamen Kosten einer Kooperation fair auf die Mitglieder verteilt werden. Die kooperative Spieltheorie bietet die nötigen Werkzeuge zur Untersuchung dieser Frage. Dafür wurden einige Konzepte aus der kooperativen Spieltheorie betrachtet, wie zum Beispiel der Kern, der Kernel, der Nucleolus ([11],[17],[21]) oder der Shapley-Wert.

Das Cost-sharing-Problem ist weitverbreitet, sowohl in den öffentlichen Sektoren als auch innerhalb von privaten Unternehmen. Produktionsgesellschaften verteilen Gemeinkosten unter unterschiedlichen Abteilungen und Produkten. Luftfahrtbehörden legen Landegebühren für Flugzeuge abhängig von deren Größe fest ([10]). Eisenbahninfrastrukturunternehmen bestimmen Nutzungsgebühren von Trassen. Personenverkehrsunternehmen legen Fahrkartenpreise fest. Das Cost-sharing-Problem kommt auch bei freiwilliger Kooperation vor, zum Beispiel wenn man die Kosten im Transport ([6], [7]), oder die Bau- und Betriebskosten von Wasser-, Gas-, oder Telekommunikationsnetzen ([18], [22]) reduzieren will. Das sind nur einige von zahlreichen Anwendungen von Cost-sharing.

Trotz seiner großen Bedeutung gibt es bisher keine Arbeiten über die Lösung großer Cost-sharing-Probleme aus der Praxis. Ziel dieses Projekts ist die Durchführung einer solchen Untersuchung.

**Publikationen**

- [1] R. Borndörfer, M. Grötschel, S. Lukac, K. Mitusch, T. Schlechte, S. Schultz und A. Tanner, *An auctioning approach to railway slot allocation*, Competition and Regulation in Network Industries **1** (2006), Nr. 2, 163–196.
- [2] R. Borndörfer, M. Grötschel und M. Pfetsch, *Models for line planning in public transport*, Report 04–10, ZIB, 2004. Erscheint in Proc. of the 9th Int. Conf. on Computer-Aided Scheduling of Public Transport (2005).
- [3] R. Borndörfer, M. Grötschel und M. Pfetsch, *A column-generation approach to line planning in public transport*, Transp. Sci. **41** (2007), 123–132.
- [4] R. Borndörfer, M. Neumann und M. Pfetsch, *Optimal fares for public transport*, Operations Research Proceedings 2005 (H.-D. Haasis, H. Kopfer und J. Schönberger, Hg.), Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2006, 591–596.
- [5] R. Borndörfer, M. Neumann und M. Pfetsch, *Fare planning in public transport*, Report 05–20, ZIB, 2005.
- [6] S. Engevall, M. Göthe-Lundgren und P. Värbrand, *The traveling salesman game: An application of cost allocation in a gas and oil company*, Ann. Oper. Res., **82** (1998), 453–471.
- [7] V. Fragnelli, *Game theoretic analysis of transportation problems*, Proceedings of the 4th Twente Workshop on Cooperative Game Theory joint with 3rd Dutch-Russian Symposium, (2005), 27–38.
- [8] Å. Hallefjord, R. Helming und K. Jørnsten, *Computing the nucleolus when the characteristic function is given implicitly: A constraint generation approach*, International Journal of Game Theory, **24** (1995), 357–372.
- [9] E. Kohlberg, *On the nucleolus of a characteristic function game*, SIAM J. Appl. Math., **20** (1971), 62–66.
- [10] S. Littlechild und G. Thompson, *Aircraft landing fees: A game theory approach*, The Bell Journal of Economics and Management Science, **8** (1977), 186–204.
- [11] M. Maschler, B. Peleg und L. S. Shapley, *Geometric properties of the kernel, nucleolus, and related solution concepts*, Math. Oper. Res., **4** (1979), 303–338.
- [12] A. Mura, *Trassenauktionen im Schienenverkehr*, Diplomarbeit, TU Berlin, 2006.
- [13] M. Neumann, *Mathematische Preisplanung im ÖPNV*, Diplomarbeit, TU Berlin, 2005.
- [14] T. Parker, *Allocation of the Tennessee Valley Authority projects*, Transaction of the American Society of Civil Engineers, **108** (1943), 174–187.
- [15] J. A. M. Potters, *An axiomatization of the nucleolus*, International Journal of Game Theory, **19** (1991), 365–373.
- [16] A. Reuter, *Kombinatorische Auktionen und ihre Anwendungen im Schienenverkehr*, Diplomarbeit, TU Berlin, 2005.

- [17] D. Schmeidler, *The nucleolus of a characteristic function game*, SIAM J. Appl. Math., **17** (1969), 1163–1170.
- [18] W. W. Sharkey, *Network models in economics*, In M. O. Ball et al., editors, *Handbook in Operations Research and Management Science: Network Routing*, Bd. 8, Elsevier, Amsterdam, 1995, 713-765.
- [19] C. Snijders, *Axiomatization of the nucleolus*, Math. Oper. Res., **20** (1995), 189–196.
- [20] A. I. Sobolev, *The characterization of optimality principles in cooperative games by functional equations*, Mat. Metody soc. Nauk., **6** (1975), 94–151.
- [21] H. P. Young, *Cost allocation*, In R. J. Aumann and S. Hart, editors, *Handbook of Game Theory*, Bd. 2, North-Holland, Amsterdam, 1994, 1193-1235.
- [22] H. P. Young, N. Okada und T. Hashimoto, *Cost allocation in water resources development*, Water Resources Research, **18** (1982), 361–373.

#### 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 derzeit 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 [7, 20]. Sie bieten den Vorteil einer potentiell unbegrenzten Skalierbarkeit, d. h., es können ohne Leistungseinbuße beliebig viele Nutzer gleichzeitig bedient werden. Da jeder neu hinzukommende Knoten auch zugleich Dienstleistungen erbringt, besitzen Peer-to-Peer-Systeme eine höhere Ausfallsicherheit als traditionelle Grid-Systeme, was für den praktischen 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 NFS, ermöglicht unser ZIB-DMS den Datenzugriff über frei wählbare Attribut-Wertepaare: Der Nutzer spezifiziert die gewünschte Datei nicht über den Dateinamen und Speicherort, sondern über inhaltsbezogene Angaben (Attribute). Da einzelne Speicher in verteilten Systemen jederzeit ausfallen können, ist eine Replikation der Dateien hier besonders wichtig. Dafür entwickeln wir Methoden zur Datenplatzierung, Caching, Staging, Routing, Scheduling und Synchronisation.

Die praktische Eignung unserer Datenmanagement-Verfahren erproben wird unter anderem mit den datenintensiven Anwendungen der Nachwuchsforschergruppe *Alignment und Threading auf parallelen Systemen* des Berliner Centrums für Genombasierte Bioinformatik (BCB). Die in unserer BCB-Arbeitsgruppe entwickelten Threading-Algorithmen nutzen Work-Flow-Verfahren auf verteilten Rechen- und Speicherknoten und greifen dabei auf umfangreiche, verteilte Datenbestände zu.

Neben diesen Forschungsschwerpunkten haben wir im Berichtszeitraum die drei neuen EU-Projekte SELFMAN, XtremOS und MetaChem begonnen sowie die Arbeit an unseren fünf

D-Grid-Projekten fortgeführt. Die inhaltlichen Schwerpunkte dieser Projekte, die im Folgenden detailliert beschrieben sind, umfassen verschiedene Aspekte des Speicherns sehr großer Datenmengen in global verteilten Systemen.

### **XtreemOS – das Betriebssystem für das Grid**

**Bearbeitet von:** Felix Hupfeld, Björn Kolbeck, Alexander Reinefeld, Thorsten Schütt, Jan Stender

**Kooperationspartner:** INRIA/IRISA Frankreich; CCLRC Vereinigtes Königreich; CNR Italien; EADS Frankreich; EDF Frankreich; EDGE Frankreich; NEC Deutschland; SAP Deutschland; BSC Spanien; Universität Ulm; Vrije Unversiteit Amsterdam, Niederlande; XLAB Slowenien; T6, Italien, ICT China; Red Flag Software, China; Telefonica Spanien

**Förderung:** Europäische Union

Viele Firmen und Institutionen haben sich mittlerweile dazu entschlossen, ihre IT-Infrastruktur über firmeneigene Netzwerke oder das Internet miteinander zu vernetzen. Dazu werden die Installationen mit einer individuell angepassten Grid-Middleware erweitert, auf der die vorhandenen Anwendungen verteilt ablaufen. Dieser Prozess ist recht aufwendig, und es gehen dabei einige Vorteile des Grid Computing verloren. Im EU-Projekt XtreemOS gehen wir daher einen anderen Weg: Es soll ein verteiltes Grid-Betriebssystem entwickelt werden, das vollständig integrierte Grid-Installationen ermöglicht. Dazu haben sich 18 Partner für vier Jahre zu einem EU-Projekt zusammengefunden; darunter SAP, NEC, Mandriva Linux und Redflag Linux, der größte Linux-Distributor Chinas.

XtreemOS benutzt als Grundlage den am französischen INRIA entwickelten „Kerrighed“-Linux-Kernel. Dieser wird um integrierte Dienste erweitert, die eine globale Sicht auf die verfügbaren Ressourcen ermöglichen. Eine wichtige Komponente ist das verteilte Dateisystem XtreemFS, das unter unserer Leitung entworfen und entwickelt wird.

Für die Entwicklung des XtreemFS-Dateisystems haben wir uns für einen modernen objektbasierten Speicher-Ansatz entschieden, bei dem die Dateiinhalte von den Metadaten getrennt gespeichert werden. Die reinen Dateiinhalte, die so genannten „Objects“, werden auf „Object storage devices“ (OSDs) gespeichert, auf denen alle Lese- und Schreiboperationen ausgeführt werden. Metadaten werden in Metadatenservern gespeichert, auf die nur bei wenigen Operationen zugegriffen werden muss.

Objektbasierte Dateisysteme sind zwar bereits kommerziell erhältlich und werden auch schon in großen Installationen eingesetzt, sie sind allerdings auf zentrale IT-Infrastrukturen ausgelegt und daher nicht für den Einsatz im Grid geeignet. Mit XtreemFS wird der objektbasierte Ansatz dahingehend erweitert, dass ein föderiertes globales Dateisystem aus Einzelinstallationen bei den einzelnen Teilnehmern entsteht. Lokale Installationen können dem System jederzeit beitreten oder es verlassen. Einzelne Komponentenausfälle wirken sich nicht auf das Gesamtsystem aus.

Während die Föderation der Metadatenserver für die Ausfallsicherheit zwischen den einzelnen Installationen der Teilnehmer sorgt, können die Metadatenserver auch auf mehrere Rechner repliziert werden, um die lokale Verfügbarkeit zu erhöhen. Dies geschieht mit einem noch zu entwickelnden Replikationsprotokoll, das die hohen Geschwindigkeitsanforderungen der Dateisysteme erfüllt, gleichzeitig aber auch die langen Verzögerungen der Weitverkehrsnetzwerke zwischen den Installationen berücksichtigt.

Analog zur Verwaltung der Metadaten soll XtreamFS auch die Inhalte der Dateien auf mehrere OSDs replizieren und verteilen können, um die Dateiverfügbarkeit und Zugriffsgeschwindigkeit zu erhöhen. Wie in Abbildung 2.52 dargestellt, müssen die Schreibzugriffe durch die OSDs koordiniert werden, um die Konsistenz der Replikate auf den beteiligten OSDs zu garantieren. Je nach Zugriffsmuster wird hierfür jeder einzelne Zugriff koordiniert oder die Zuständigkeit für einzelne Abschnitte einer Datei unter den OSDs aufgeteilt. Es muss auch berücksichtigt werden, dass sich aktuelle Versionen der Daten bereits in Caches der Clients befinden können. Um unnötigen Aufwand zu vermeiden, können einzelne Replikate von der Koordinierung ausgeschlossen und später bei Bedarf aktualisiert werden. Zusätzlich soll das System in der Lage sein, regelmäßig wiederkehrende Zugriffsmuster der Applikationen zu klassifizieren und die Verteilung und Zugriffe der Dateien entsprechend zu optimieren.

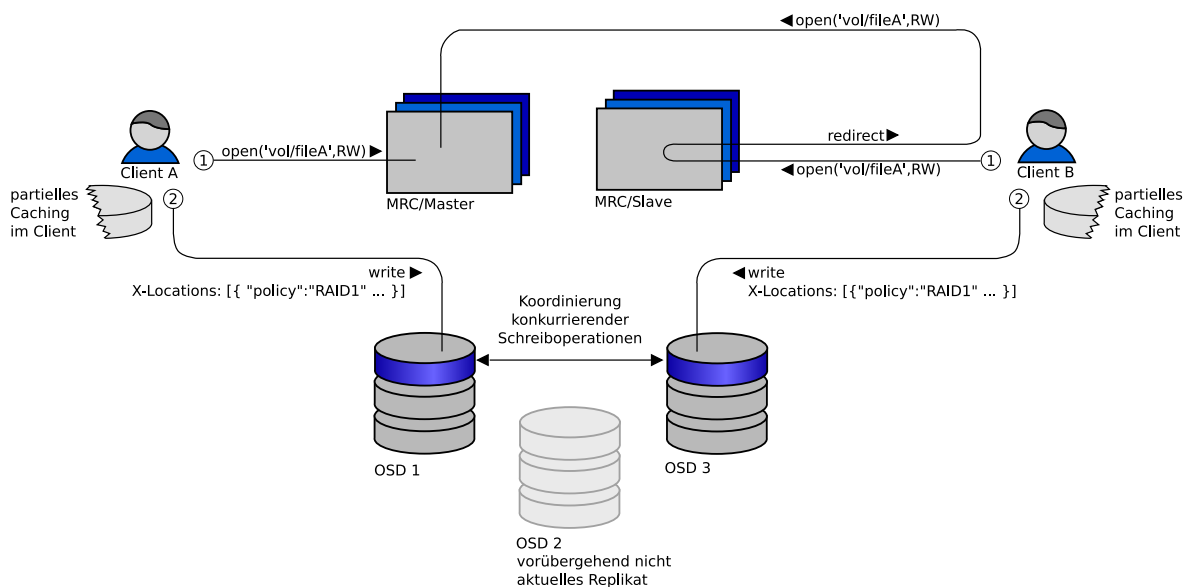


ABBILDUNG 2.52: Funktionsweise des verteilten Dateisystems *XtreamFS*.

Um auch in sehr großen Grid-Systemen schnelle Antwortzeiten zu erzielen, entwickeln wir in einem weiteren Arbeitspaket Infrastrukturdienste, auf denen andere, höhere Dienste aufsetzen. Neben einem Verzeichnisdienst und Diensten für hochverfügbare Server entwickeln wir in XtreamOS ein Publish-/Subscribe-Protokoll, das unser weiter unten beschriebenes Overlay-Netzwerkprotokoll Chord<sup>#</sup> nutzt, um die erforderliche Skalierbarkeit und Fehlertoleranz zu garantieren.

### SELFMAN – Grundlagenforschung zu selbstregulierenden verteilten Systemen

**Bearbeitet von:** Thorsten Schütt, Monika Moser, Artur Andrzejak, Alexander Reinefeld

**Kooperationspartner:** Université Catholique de Louvain, Belgien; Royal Institute of Technology, Schweden; INRIA, Frankreich; France Telecom, Frankreich; E-Plus, Deutschland; National University of Singapore, Singapur

**Förderung:** Europäische Union

Viele Geschäftsprozesse laufen heutzutage nicht mehr auf einzelnen firmeneigenen Servern, sondern nutzen verteilte Komponenten, die über Web- oder Grid-Services zu einer

Wertschöpfungskette gekoppelt sind. Solche firmenübergreifenden oder gar weltumspannenden Systeme sind derart komplex, dass sie ohne den Einbau lokaler Selbstregulierungsmechanismen kaum noch handhabbar oder wartbar sind.

In dem im Jahr 2006 neu begonnenen EU-Projekt SELFMAN betreiben wir Grundlagenforschung zur Selbstregulation in sehr großen verteilten Systemen. Der Projekttitel „SELFMAN“ steht für „Self Management for Large-Scale Distributed Systems based on Structured Overlay Networks and Components“. Modellhaft sollen Anwendungssysteme entwickelt werden, die in der Lage sind, ihre korrekte Funktionsweise autonom zu überwachen. Insbesondere sollen sich die Anwendungssysteme ohne menschliche Intervention an veränderte Umgebungsbedingungen anpassen. Die Selbstverwaltung betrifft die eigenständige Systemkonfiguration, Reparatur, Optimierung und den Schutz. Zur ihrer Realisierung werden strukturierte Overlay-Netzwerke eingesetzt, mit denen beliebig große Systeme aufgebaut und verwaltet werden können. Die dynamische Konfiguration wird durch den Einsatz von Komponentenmodellen erleichtert.

Aufbauend auf unserem Chord<sup>#</sup>-Overlay-Netzwerk und dem in Stockholm entwickelten DKS-System, sollen Konzepte zur Verbesserung der Verfügbarkeit, der Ausfallsicherheit und zur effizienten Kommunikation in verteilten Systemen ohne zentrale Kontrollinstanz entwickelt werden. Unsere Arbeitsgruppe arbeitet an Modellen für selbstverwaltende replizierte Speicherdienste mit Konsistenzgarantien, wobei die zugrunde liegenden Speicherknoten jederzeit ohne vorherige Ankündigung ausfallen dürfen. Dazu müssen neue verteilte Commit-Protokolle entwickelt werden, die einerseits die vom Nutzer geforderten Konsistenzeigenschaften des Systems einhalten und andererseits konkurrierende Speichertransaktionen möglichst effizient – das heißt, sowohl schnell als auch mit geringem Ressourcenverbrauch – bearbeiten.

### **CoreGrid-Forschungsnetzwerk**

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

**Kooperationspartner:** Forscher aus 41 europäischen Instituten

**Förderung:** Europäische Union

Das Projekt CoreGrid („European Research Network on Foundations, Software Infrastructures and Applications for Large-Scale Distributed, Grid and Peer-to-Peer Technologies“) unterstützt die wissenschaftliche Zusammenarbeit von 42 europäischen Universitäten und Forschungsinstituten. Als so genanntes *Network of Excellence* soll es die Qualität der Forschung im 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.

Unsere Arbeitsgruppe ist an den virtuellen Instituten „System Architecture“ und „Resource Management“ beteiligt. Das Institut „System Architecture“ (WP4) wurde von Artur Andrzejak seit der Gründung des Netzwerkes bis zum September 2006 geleitet. Die zentralen Themen dieses Institutes liegen in der Untersuchung von Skalierbarkeit, Adaptivität und Fehlertoleranz von Grid-Architekturen. Im Jahr 2006 haben wir das 3rd CoreGrid WP4-Meeting (17.01.2006) in Paris und das 4th CoreGrid WP4 Meeting (27.06.2006) in Krakau organisiert.

Darüber hinaus haben wir – zusammen mit dem Partner INRIA Paris – den *2nd CoreGrid Workshop on Grid and P2P Systems Architecture* organisiert. Dieser Workshop fand am 16.

und 17. Januar 2006 in Paris statt und hatte die Themen Fehlertoleranz und Peer-to-Peer-Systeme zum Schwerpunkt. Diese Themen wurden in 14 Vorträgen von Wissenschaftlern aus WP4 und anderen Instituten vorgestellt. Die ausgewählten Beiträge wurden nach einem umfassenden Auswahlverfahren für eine Sonderausgabe der Zeitschrift *Future Generation of Computer Systems* akzeptiert (Editoren: A. Andrzejak, A. Reinefeld).

Weitere Beiträge zur Leitung von CoreGrid umfassten die Teilnahme an mehreren Treffen des CoreGrid Executive Committee sowie die wissenschaftliche und administrative Leitung von WP4. Im Rahmen des Kooperationsausbaus profitierte das ZIB durch den mehrmonatigen Besuch einer Postdoktorandin des CoreGrid-Fellow-Programms. Ein weiterer CoreGrid-Fellow wird als Postdoc im Jahre 2007 neun Monate am ZIB verbringen.

### **GridCoord – Europaweite Initiative zur Förderung der Grid-Forschung**

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

**Kooperationspartner:** DIST, Italien; UP, Italien; HLRS, Deutschland; QUB, Irland; EPSRC, Vereinigtes Königreich; INRIA, Frankreich; UNSA, Frankreich; UvA, Niederlande; MTA SZTAKI, Ungarn; UPM, Spanien; VINNOVA, Schweden; PSNC, Polen; Johannes-Kepler-Universität Linz, Österreich

**Förderung:** Europäische Union

In Europa gibt es eine Vielzahl nationaler und europäischer Forschungsprogramme zur Entwicklung von Methoden, Technologien und Anwendungen für das Grid-Computing. Ein zentrales Ziel des GridCoord-Projektes („ERA Pilot on a Co-ordinated Europe-Wide Initiative in Grid Research“) liegt in der Stärkung der Kooperation zwischen den nationalen Förderinstitutionen und der Europäischen Union, um die Forschungsförderung besser miteinander abgleichen 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.

Im Berichtszeitraum haben wir ein Kompendium der Grid-Forschung im europäischen Raum erstellt und mehrere Workshops veranstaltet, die der Intensivierung des Dialogs zwischen Forschern und Wissenschaftspolitikern galten. Im Rahmen der österreichischen EU-Präsidenschaft haben wir in Linz einen Workshop über die europaweite Koordination der Grid-Forschung abgehalten, an dem hochrangige Vertreter aus Politik, Wissenschaft und Industrie teilnahmen. Die wichtigsten Ergebnisse des Workshops wurden in der „Grid R&D Road Map“ festgehalten, die von der EU im September 2006 herausgegeben wurde.

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

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

**Kooperationspartner:** Alfred-Wegener-Institut für Polar- und Meeresforschung Bremerhaven, Universität Dortmund; Max-Planck-Institut für Meteorologie; Universität zu Köln; Deutscher Wetterdienst; Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt; Potsdam-Institut für Klimafolgenforschung

**Förderung:** Bundesministerium für Bildung und Forschung

Im C3-Grid-Projekt wird eine hochproduktive, Grid-basierte Umgebung für die deutsche Erdsystemforschung geschaffen, die die effiziente verteilte Datenverarbeitung und den inter-

institutionellen Austausch hochvolumiger Modell- und Beobachtungsdaten erlaubt. Das kollaborative Gesamtsystem soll einen einheitlichen und transparenten Zugriff auf geographisch und institutionell verteilte Archive bieten und die Verarbeitung großer Datenmengen erleichtern.

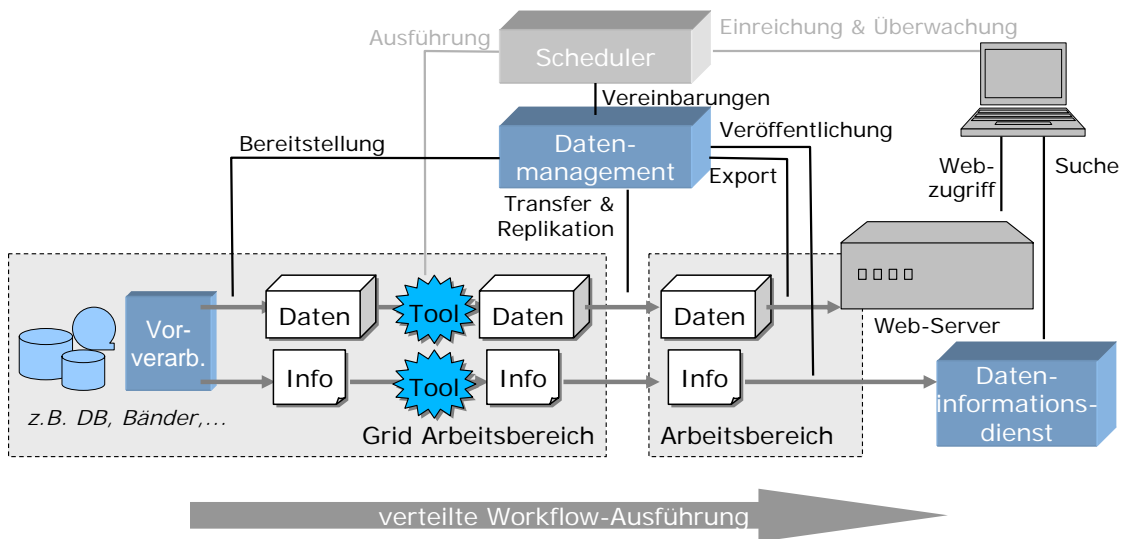


ABBILDUNG 2.53: Datenmanagement und Dateninformationsdienst in einem verteilten Workflow des C3-Grid-Projekts.

Für klimawissenschaftliche Analysen ist es häufig notwendig, hochvolumige Klimadaten zunächst an entfernten Standorten zu reduzieren, um sie dann zur Weiterverarbeitung an andere Standorte verschicken zu können. Der im ZIB entworfene Datenmanagementdienst enthält daher – im Gegensatz zu anderen Systemen – Komponenten zur eigenständigen, optimierten Planung zukünftiger Datentransfers (siehe Abbildung 2.53). In die Planung gehen Informationen über die Verfügbarkeit von Ressourcen und replizierten Daten ein, um die Transferzeiten und Volumina zu minimieren. Im Berichtsjahr wurden alle notwendigen Schnittstellen spezifiziert und prototypisch implementiert. Dies umfasst ein Protokoll zum Aushandeln und Anmelden der Datenbereitstellung sowie einen einheitlichen Zugriff auf Archivdaten. Er bietet die Möglichkeit, die Archivdaten bereits vor Ort zu reduzieren, ohne dass Wissen über die Art der Datenhaltung (Datenbanken, Festplatten, Bandlaufwerke) notwendig ist.

Eine weitere Besonderheit im C3-Grid-Projekt ist die umfassende Verwendung und Generierung von Datenbeschreibungen nach dem ISO 19115-Standard, die eine wissenschaftliche Verwertung erst ermöglichen. Die in der Arbeitsgruppe installierten und entwickelten In-



formationsdienste bieten eine effiziente Suche im Volltext und nach geographisch-zeitlicher Relevanz. Sie ermöglichen Klimaforschern den Zugriff sowohl auf Daten in Archiven als auch auf Zwischenprodukte von Grid-Anwendungen.

### **MediGrid – Ressourcenfusion für Medizin und Lebenswissenschaften**

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

**Kooperationspartner:** Universität Göttingen; Charité Universitätsmedizin Berlin; Fraunhofer-Gesellschaft; Universitätsklinikum Schleswig-Holstein; Universität Marburg; Universität Leipzig

**Förderung:** Bundesministerium für Bildung und Forschung

Das MediGrid-Projekt dient dem Aufbau einer produktiven Grid-Umgebung für stark heterogene biomedizinische Anwendungen. Die Nutzung von Grid-Technologien in diesem Bereich wird stellvertretend durch Anwendungen der Bioinformatik, der medizinischen Bildverarbeitung und der klinische Forschung gezeigt und vorangetrieben. Mit Hilfe existierender Systeme und projektspezifischer Anpassungen sollen dem Anwender möglichst komfortable Grid-Dienste zur Verfügung gestellt werden.

In unserem Arbeitspaket „Modul Ressourcenfusion“ wird die koordinierte Nutzung verteilter Rechen- und Speicherressourcen ermöglicht. Wir betreiben ein Testbed mit zwei verbreiteten Datenmanagementkomponenten, dem Storage Resource Broker (SRB) und dem Grid-Datenbanksystem OGSA-DAI, welches momentan Dateisystem- und Datenbankressourcen in Berlin, Dresden, Göttingen und Dortmund umfasst. Mit Hilfe globaler Dateinamen oder Suchanfragen über Metadaten können Anwendungen über verschiedene Interfaces auf ihre verteilten Daten zugreifen, ohne deren genauen Speicherort kennen zu müssen. Zum Schutz patientenbezogener Daten arbeiten wir an der Umsetzung der MediGrid Security-Policy mit Hilfe von Verschlüsselung, Authentifizierung und Rechtemanagement sowie der ausfallsicheren, zuverlässigen Speicherung von Daten. In Zusammenarbeit mit dem Workflowsystem sollen die Datentransferzeiten zur Optimierung der automatischen Ressourcenauswahl, zum Beispiel durch Monitoring-Informationen, berücksichtigt werden.

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

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

**Kooperationspartner:** Astrophysikalisches Institut Potsdam; MPI für Gravitationsphysik, Golm; MPI für Astrophysik, Garching; MPI für Extraterrestrische Physik, Garching; TU München; Zentrum für Astronomie der Universität Heidelberg

**Förderung:** Bundesministerium für Bildung und Forschung

Das Projekt AstroGrid-D ist ein Forschungsprojekt zur Unterstützung des verteilten wissenschaftlichen Arbeitens im D-Grid-Verbund. Ziel dieses Vorhabens ist die Schaffung einer Grid-basierten Infrastruktur für die deutsche astronomische und astrophysikalische Forschung, aufbauend auf dem Rechnerverbund der teilnehmenden Institute und Rechenzentren, um die existierenden Hardwareressourcen effektiver nutzen zu können.

Unsere Arbeitsgruppe ist an der Entwicklung der Kernkomponenten beteiligt: Verwaltung verteilter Dateien, Informationsdienst sowie Scheduling paralleler Simulationen. Der von uns entwickelte Informationsdienst „Stellaris“ dient der Speicherung und dem Wiederauffinden von Metadaten mit Hilfe einer flexiblen Anfragesprache. Die Architektur der verteilten Dateiverwaltung benutzt einen einheitlichen Namensraum für Dateien und erlaubt die Erstellung

von Replikaten. Da viele Anwendungen nur Ausschnitte aus hochvolumigen Dateien benötigen, stellt die Dateiverwaltung eine Schnittstelle für den entfernten, partiellen Zugriff auf Daten bereit. So werden nur diejenigen Daten über das Netzwerk transportiert, die auch verarbeitet werden. Für das Scheduling paralleler Simulationen haben wir Verfahren für die Platzierung von Reservierungen in Job-Schedules entwickelt. Das Scheduling paralleler Simulationen erfordert die Kombination mehrerer Reservierungen. Im Berichtszeitraum haben wir einen ersten Ansatz für die Modellierung der Auswahl der besten Kombination als Optimierungsproblem entwickelt.

In AstroGrid-D unterscheiden wir vier verschiedene Metadatentypen: (1) Informationen über Ressourcen, (2) den Zustand von Aktivitäten, (3) anwendungsspezifische Metadaten sowie (4) forschungsspezifische Metadaten. Der Informationsdienst ist so konstruiert, dass er alle Typen in einer Instanz speichern kann und typunabhängige Abfragen ermöglicht. Um die verschiedenen Typen mit einer einheitlichen Methode repräsentieren zu können, wird das „Resource Description Framework“ RDF benutzt. RDF-Metadaten werden durch SPARQL abgefragt. Sowohl RDF als auch SPARQL sind Empfehlungen für zukünftige Standards des World Wide Web Consortium (W3C). Der Informationsdienst stellt Funktionen für das Erzeugen (create), Aktualisieren (update), Löschen (delete), Lesen (retrieval) und Auffinden (query) von Metadaten bereit. Diese Schnittstelle nutzt existierende Werkzeuge und wird um Grid-fähige Authentifizierungs- und Autorisierungsverfahren ergänzt.

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

**Bearbeitet von:** Hinnerk Stüben

**Kooperationspartner:** DESY Hamburg und Zeuthen; GSI Darmstadt; LMU München; Universität Dortmund; TU Dresden; Universität Freiburg; Universität Siegen; Universität Wuppertal

**Förderung:** Bundesministerium für Bildung und Forschung

Das bisher im Rahmen des D-Grids aufgebaute HEP Community Grid im Bereich der Hochenergiephysik (HEP) wurde in Zusammenarbeit mit dem DESY Hamburg, dem NIC/DESY Zeuthen und dem Forschungszentrum Jülich weiter ausgebaut.

Metadatenkatalog, Filekatalog und Client-Software sind in Produktion und erlauben den transparenten Zugriff auf die Speicherressourcen des Grids ohne Kenntnis des physikalischen Speicherortes. Neben der Mitarbeit am Ausbau des Metadatenkataloges (vor allem im Bereich Test und Überwachung) liegt am ZIB die Verantwortung für die Entwicklung der Benutzerschnittstelle, die die Komplexität des Grids weitestgehend durch einfache, für diese Community maßgeschneiderte Kommandos verbirgt. Durch den engen Kontakt zur internationalen *Lattice-Data-Grid*-Gemeinschaft und Einhaltung der dort beschlossenen Standards wurde auch die internationale Interoperabilität zu anderen nationalen Grids vorbereitet, die 2007 erreicht werden soll.

### DGI: D-Grid-Integrationsprojekt

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

**Kooperationspartner:** Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes e. V. (DFN-Verein), Berlin; Forschungszentrum Karlsruhe; Forschungszentrum Jülich; Forschungszentrum L3S, Hannover; Regionales Rechenzentrum Niedersachsen, Hannover; Fraunhofer-Institut SCAI, Sankt Augustin; Fraunhofer-Institut SIT, Darmstadt; Paderborn Center for Parallel Computing, Paderborn

**Förderung:** Bundesministerium für Bildung und Forschung

Das D-Grid-Integrationsprojekt bildet das Bindeglied zwischen den einzelnen anwendungsorientierten D-Grid-Projekten, indem es eine robuste, flexible und nachhaltig nutzbare Grid-Infrastruktur schafft. Durch investive Mittel, die wir im Berichtszeitraum eingeworben haben, konnten am ZIB ein Rechencluster (180 CPUs) und ein umfangreiches Speichersystem (knapp 100 TByte) installiert werden, die in Kooperation mit anderen Standorten in Deutschland als verteilte Ressource den D-Grid-Anwendungen zur Verfügung stehen. Mit diesen Ressourcen wird erstmals in Deutschland eine einheitliche, gemeinsam nutzbare Rechenumgebung über sehr viele Standorte hinweg realisiert.

Für den Zugriff auf die an den verschiedenen Standorten gespeicherten Daten wird am ZIB der Storage Resource Broker (SRB) des San Diego Supercomputer Centers eingesetzt. Wir haben die Leistung des Systems, insbesondere im Hinblick auf den Einfluss von Latenzzeiten, die Verteilung auf mehrere Standorte und den allgemeinen Funktionsumfang in Bezug auf die Nutzeranforderungen des MediGrid-Projektes untersucht.

Mit „i Rule Oriented Data System“ (iRODS) entsteht derzeit eine interessante Erweiterung des SRB, die flexibel über Regeln konfiguriert und gesteuert werden kann. Wir erkunden bereits in der Betaphase, welche neuen Einsatzmöglichkeiten sich dadurch für die Anwendungen ergeben und evaluieren sie in der Praxis.

### Co-Reservierung von Ressourcen im Grid

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

**Kooperationspartner:** ID IMAG Grenoble, TU Berlin

**Förderung:** Bundesministerium für Bildung und Forschung, AstroGrid-D

Viele Anwendungen in Wissenschaft und Wirtschaft erfordern die Einhaltung von Dienstgütekriterien, die vorab zwischen den Dienstbringern und Nutzern vereinbart wurden. Da Anwendungen heutzutage oft mehrere geographisch verteilte Ressourcen nutzen, ist eine koordinierte Zuweisung der einzelnen Arbeitsschritte (Tasks/Jobs) zu Ressourcen notwendig. In diesem Projekt werden Verfahren für die Modellierung und Koordinierung solcher Zuweisungen auf der Basis von Vorausreservierungen entwickelt. Im ersten Schritt haben wir Verfahren für die Platzierung einzelner Reservierungen in Job Schedules untersucht. Für jeden Teil einer komplexen Anwendung ermitteln die Ressourcen selbständig, zu welchen Zeitpunkten welche Dienstgüteparameter reserviert werden können [19, 18]. Diese Informationen werden von einem zentralen Broker ausgewertet. Im Berichtszeitraum haben wir erste Verfahren für diese Auswertung entwickelt.

Der grundlegende Ansatz dieser Verfahren liegt darin, das Zuweisungsproblem auf ein Optimierungsproblem abzubilden. Je Anwendungsteil  $i$  wird das Problem mit drei Variablen  $R_i$ ,  $T_i$  und  $Q_i$  modelliert, wobei  $R_i$  für die zugewiesene Ressource,  $T_i$  für den Startzeitpunkt der Zuweisung und  $Q_i$  für die Dienstgüte (englisch: quality of service) stehen. Mit Hilfe von Neben-

bedingungen können sowohl die Nutzeranforderungen als auch die der Ressourcen-Provider modelliert werden, z. B.  $T_i \leq$  „31. Oktober 2006“ oder  $Q_i.bandwidth \geq$  „100Mbit/s“. Sollte es mehrere Zuweisungen geben, die alle Nebenbedingungen erfüllen, wird die beste gemäß einer Zielfunktion gewählt. Für experimentelle Untersuchungen haben wir unterschiedliche Darstellungen des Optimierungsproblems als *Binary Problem* und *Mixed Binary Integer Problem* erarbeitet. Die größte Herausforderung ergab sich dabei aus den Informationen über die Platzierungen von Reservierungen in Job Schedules. Zwar können diese mit Hilfe stückweise linearer Funktionen mathematisch einfach beschrieben werden, aber ihre Umsetzung in Sprachen, wie z. B. AMPL, ist zum Teil umständlich und die Lösung von entsprechenden Probleminstanzen zeitaufwendig. Daher werden wir im nächsten Schritt spezielle Verfahren für die Lösung von Optimierungsproblemen mit stückweise linearen Zielfunktionen untersuchen.

### Alignment und Threading auf massiv parallelen Rechnern

**Bearbeitet von:** Thomas Steinke, Patrick May, Christian Ehrlich, 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

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

Die Vorhersage der 3D-Struktur von Proteinen trägt zur Aufklärung ihrer Funktion in biologischen Systemen bei. Der Bedarf an derartigen Vorhersagen wird durch die in letzter Zeit verstärkt angewandten RNAi-Experimente unterstrichen. Als Teil des *Berliner Centriums für genombasierte Bioinformatik* (BCB) hat unsere Nachwuchsforschergruppe *Alignment und Threading auf massiv parallelen Rechnern* eine automatische Pipeline zur Proteinstrukturvorhersage implementiert [12].

Mit unserer jeweiligen Implementierung einer Strukturvorhersage-Pipeline haben wir uns am weltweiten *Critical Assessment of Techniques for Protein Structure Prediction* (CASP) beteiligt. Nach der ersten Teilnahme am CASP6 im Jahr 2004 haben wir auch im Jahr 2006 erneut am CASP7 teilgenommen. Die in diesem Wettbewerb erzielten Ergebnisse zeigen eine deutliche Leistungsverbesserung im Vergleich zu den in CASP6 erbrachten Leistungen. Unsere im internationalen Vergleich sehr kleine Arbeitsgruppe konnte sich unter ca. 300 Teilnehmern (Gruppen und Server) im oberen Drittel platzieren und sich damit gegenüber dem letzten Wettbewerb deutlich verbessern.

Durch eine weiterentwickelte Scoring-Funktion bei unserer Threading-Implementierung [13] und durch verbesserte Modellierungsstrategien zur Vorhersage von Loop-Bereichen und bei der abschließenden Strukturverfeinerung konnten wir für ein Target eine Platzierung unter den Top10 (Abbildung 2.54a) und für drei weitere Targets Platzierungen unter den Top20 aller Vorhersagemodelle der teilnehmenden Gruppen erzielen.

Die in Abbildung 2.54b gezeigte Target-Struktur haben wir zu circa 96 % korrekt vorhergesagt, wobei die mittlere quadratische Abweichung zur experimentellen Struktur nur 0.083 nm beträgt.

Die Strukturvorhersage-Pipeline ist als automatischer Workflow unter Verwendung von Web Services implementiert. Die Pipeline erlaubt sowohl eine Homologie-Modellierung als auch die Faltungserkennung (Threading). Die einzelnen Verarbeitungsschritte der Sequenzanalyse (Prä-Prozessing), der Strukturvorhersage mittels Homologie-Modellierung oder Threading und die abschließende Strukturverfeinerung (Post-Prozessing) werden mittels der Triana-

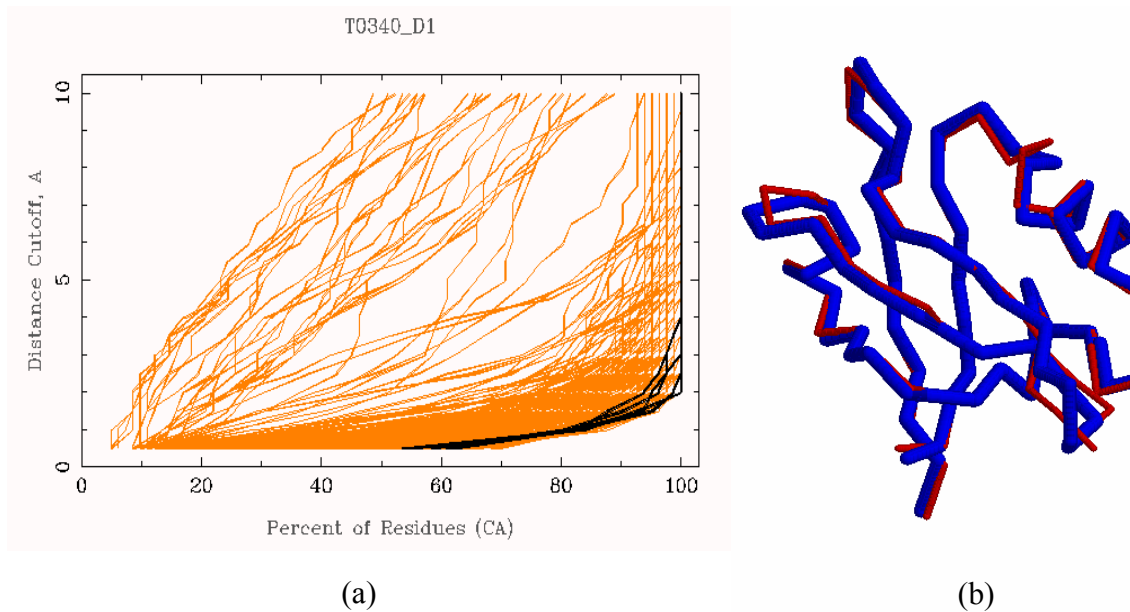


ABBILDUNG 2.54: (a) Ergebnisse aller Gruppen in CASP7 für Target T0340 (unsere Modelle schwarz); (b) Experimentelle Struktur (dickere Linie) und unsere Vorhersage (dünnere Linie) für das CASP7-Target T0340\_4.

Workflow-Engine gesteuert. Im Workflow werden sowohl Standardpakete (BLAST, PsiPred, Modeller) als auch Eigenentwicklungen (Theseus-Threader [13]) als Web Services benutzt. Der entwickelte Workflow ist in andere Workflow-Umgebungen übertragbar, z. B. in die MediGrid-Umgebung.

Im Rahmen von Kooperationen wurde die graphentheoretische Repräsentation von Proteintopologien weiterentwickelt (I. Koch, TFH Berlin) und an neuen Algorithmen zum Alignment von Sekundärstrukturelementen (E. W. Knapp, FUB) gearbeitet [10]. Der Einsatz von Hardwarebeschleunigern, hier FPGA, zur Beschleunigung der Suche nach miRNA-Vorstufen (siehe [11]) wurde in Zusammenarbeit mit der FUB (M. Bauer, G. Klau) untersucht (s. auch [21]).

### Protokolle und Algorithmen für strukturierte Overlay-Netzwerke

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

**Kooperationspartner:** SICS Stockholm

Strukturierte Overlay-Netzwerke haben sich in letzter Zeit zur wichtigen Grundlage für skalierbare verteilte Systeme entwickelt. Neben ihrer guten Skalierbarkeit zeichnen sie sich vor allem durch ihre Selbstorganisierungseigenschaften aus. Chord war eines der ersten Systeme in diesem Bereich, das eine verteilte Hash-Tabelle nutzt, um die Dateneinträge über alle verfügbaren Knoten möglichst gleichmäßig zu verteilen. Die Verwendung der Hash-Tabelle erlaubt allerdings nur einfache Suchanfragen ohne Bereichsangabe, was für viele Anwendungen nicht ausreichend ist.

In diesem Projekt analysieren und entwickeln wir Methoden, die komplexe Suchanfragen

unterstützen und zugleich die Daten gegen den Ausfall einzelner Rechner schützen. Auf der Grundlage von Chord haben wir das System Chord<sup>#</sup> entwickelt [20]. Es garantiert einen logarithmischen Routing-Aufwand bei der Bearbeitung von Suchanfragen, während Chord den logarithmischen Aufwand nur mit „hoher Wahrscheinlichkeit“ garantiert. In unseren Simulationen konnten wir zeigen, dass Chord<sup>#</sup> in manchen Fällen bis zu viermal schneller als Chord ist. Zusätzlich benötigt Chord<sup>#</sup> im Durchschnitt weniger Kommunikationsbandbreite zur Aufrechterhaltung der Systemintegrität. Auch in der Expressivität der Suchanfragen ist Chord<sup>#</sup> überlegen: Es unterstützt Bereichsabfragen, in denen Namen gefragt sind, die zwischen einer unteren und einer oberen Schranke liegen. Chord kann aufgrund des Hashings derartige Anfragen nicht bearbeiten.

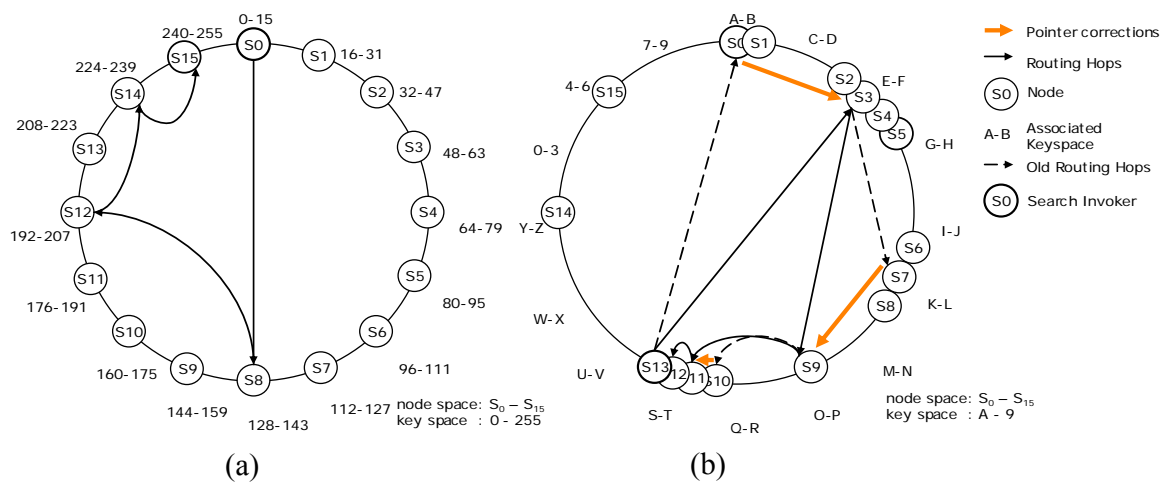


ABBILDUNG 2.55: Transformationsschnitte von Chord nach Chord<sup>#</sup>.

Abbildung 2.55 zeigt die Transformationsschnitte, die notwendig sind, um Chord<sup>#</sup> aus Chord abzuleiten. Wenn der originale Chord-Algorithmus ohne Hashing betrieben wird (Abbildung 2.55b), sind zwar Bereichsabfragen möglich, es kann dann aber zur Überlastung einzelner Knoten kommen, was die Suchleistung drastisch reduziert. Wird nun ein expliziter Lastausgleich eingeführt, sind die Knoten zwar nicht mehr überlastet, aber der Aufwand für Suchanfragen ist nicht mehr logarithmisch ( $O(\log N)$ ). Deshalb verwenden wir in Chord<sup>#</sup> angepasste Routingtabellen, die eine Suche mit logarithmischem Aufwand garantieren.

Im Berichtszeitraum haben wir Chord<sup>#</sup> um die Unterstützung *mehrdimensionaler* Daten erweitert, wobei der Aufwand für Suchanfragen weiterhin logarithmisch blieb. Insbesondere unterstützt Chord<sup>#</sup> nun beliebig geformte Bereichsabfragen, wie beispielsweise: „Zeige die Standorte aller Hotels, die östlich der Koordinaten 52°30'59" N, 13°22'40" O in einem Umkreis von 500 Metern liegen“. Chord<sup>#</sup> bietet somit eine optimale Grundlage zur Entwicklung effizienter geographischer Informationssysteme oder für Anwendungen in der Computergraphik.

Im Januar 2007 hat uns das Europäische Patentamt für das in Chord<sup>#</sup> verwendete Routing-Verfahren ein Patent erteilt. Die um multidimensionale Bereichsabfragen erweiterte Variante von Chord<sup>#</sup> haben wir im Berichtszeitraum zum Patentschutz eingereicht.

### **Das verteilte ZIB-DMS-Datenmanagementsystem**

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

Mit der stetig wachsenden Speicherkapazität von Festplatten wird das flexible Management von Daten zunehmend an Bedeutung gewinnen, um den Überblick über die Daten zu behalten und sie weiterhin effizient nutzen zu können. Im Zuge von immer schnelleren Netzwerken und fortschreitender Globalisierung steigt der Bedarf für ein verteiltes selbstorganisierendes Datenmanagementsystem, das Anwendern eine globale Sicht auf ihre verteilten Daten ermöglicht und transparent Datentransfers, Management von Replikaten und Datenorganisation unterstützt.

Unsere Forschungsprototyp ZIB-DMS („ZIB Distributed Data Management System“) realisiert ein solches System, an dem wir neue Lösungsmöglichkeiten in diesem Bereich untersuchen. Insbesondere die flexible, nutzergesteuerte Erfassung und Handhabung von Metadaten und deren verteilte Speicherung mit Hilfe eines P2P-Ansatzes hat sich als große Herausforderung erwiesen, an der wir im Berichtszeitraum arbeiteten. So haben wir beispielsweise Möglichkeiten zur Selbstoptimierung und Adaption in verteilten Systemen mittels Regelkreisen, Selbstüberwachung und Vorhersagemechanismen untersucht [1]. In verschiedenen Komponenten des ZIB-DMS eingesetzt, kann so die Adaptivität in einer dynamischen Umgebung ohne manuelle Eingriffe erhöht werden. Insbesondere bei Systemen wie dem ZIB-DMS, das als großes verteiltes System arbeitet, ist eine solche Selbstanpassung von großer Bedeutung, um den Betrieb des Systems möglichst einfach und den Verwaltungsaufwand möglichst gering zu halten.

Wir haben eine neue flexible Replikatplatzierung mit Caching-Algorithmen (LRU, LFU, GDSF) entwickelt und mit anderen Platzierungsstrategien verglichen [16]. Im Vergleich zu den Verfahren, die in Content-Delivery-Networks verwendet werden, erwiesen sich Caching-Strategien für die Anwendung im ZIB-DMS als am besten geeignet. Ein adaptives Verfahren, das neben der aktuell gewählten Strategie weitere Strategien im Hintergrund verfolgt (simuliert) und vergleicht, um anschließend ggf. auf die im aktuellen Nutzungsmuster beste Strategie umzuschalten, könnte die Leistung des Systems weiter steigern.

Durch unsere Forschungsaktivitäten rund um das ZIB-DMS sind weitere Forschungsthemen wie Transaktionen in Peer-to-Peer Systemen und Grid-Dateisysteme angestoßen worden, deren Ergebnisse nutzbringend in ZIB-DMS eingesetzt werden können, nun aber zunächst in eigenen Projekten (SELFMAN, XtreamOS) weiter verfolgt werden.

### **Modellierung und Vorhersage von Systemcharakteristiken zur automatischen Regulierung von Zuverlässigkeit und Performance**

**Bearbeitet von:** Artur Andrzejak, Mehmet Ceyran, Stefan Plantikow

**Kooperationspartner:** University of Coimbra, Portugal

Die Modellierung und Vorhersage von Charakteristiken von Systemen und Anwendungen ist ein wichtiges Werkzeug für die Selbstregulierung von Computersystemen (bekannt auch unter

dem Namen *Self-Management* oder *Autonomic Computing*) [1]. Zu den Beispielen der modellierten Charakteristika gehören: Verlauf der Nutzung von Rechen- und Speicherressourcen der einzelnen Server, Verlauf der Applikationsperformance (sowohl individuell als auch in Clustern), Verfügbarkeit der einzelnen Knoten eines Desktop-Pools über die Zeit. Die gewonnenen Modelle und Vorhersagen können unter anderem in folgenden Selbstregulierungsvorgängen verwendet werden:

- Maximierung der Zuverlässigkeit und Performance von Applikationen, die der sog. *Softwarealterung* unterliegen [4],
- Erhöhung der Zuverlässigkeit eines komplexen verteilten Systems durch proaktive Migration und Aufstockung der Ressourcen im Falle einer prognostizierten Fehlfunktion oder Teilausfalls,
- Erkennung von Systeminfektionen (intrusion detection) oder Teilausfällen durch den Vergleich von aufgestellten Modellen mit dem aktuellen Verhalten,
- Zuordnung (Scheduling) von Jobs und Daten an die Knoten eines volatilen Clusters (z. B. Desktop-Pools) um die Anzahl der Job-Migrationen und abgebrochener Jobs zu minimieren (hier wird die Verfügbarkeit einzelner Knoten über Zeit modelliert) [2, 6],
- Zuordnung von Jobs zu Servern im Szenario der gemeinsamen Nutzung von Ressourcen (resource sharing), um Service Level Agreements einzuhalten (durch Modellierung des Ressourcenbedarfs der Applikationen) [3].

Da die Zuverlässigkeit von Systemen mit jedem Jahr an Bedeutung gewinnt, hat sich der Schwerpunkt dieses Projektes im Laufe des Berichtszeitraums auf das erste der oben genannten Themen verlagert. In Zusammenarbeit mit der University of Coimbra haben wir Studien von Applikationen durchgeführt, die unter den Wirkungen der Softwarealterung (Software aging) leiden. Bei diesem Effekt führt eine Akkumulierung von Applikationsfehlern (Rundungsfehlern, Speicherverluste, nicht terminierte Threads) mit zunehmender Laufzeit zu einer Verminderung der Anwendungsleistung oder sogar zu einem vollständigen Versagen der Anwendung. Dieses Verhalten ist häufig bei rund um die Uhr laufenden Programmen wie Web Servern oder Web Service Servern zu beobachten. Dabei ist die Softwarealterung in diesen Bereichen besonders kritisch, weil eine zunehmende Zahl von Unternehmen Service Oriented Architectures (SOA) als das Rückgrat ihrer IT-Infrastrukturen wählen, was zu erhöhten Anforderungen an ihre Zuverlässigkeit und Leistung führt.

Basierend auf der Studie der Charakteristiken des *Apache Axis 1.3* und *1.4* Web Service Servers konnten wir neuartige Modelle für die Alterungseffekte finden [4]. Im Gegensatz zu den weit verbreiteten Markovketten-Ansätzen beschreiben unsere Modelle die Charakteristiken einer Anwendung auf deterministische Weise und unabhängig von der Verteilung der Anfragen. Dadurch kann man die Genauigkeit eines Modells erhöhen, es in einer kompakteren Form darstellen, sowie es universeller machen. Gleichzeitig führten wir einen statistischen Test ein, um die Güte des Modells und die Eignung des Alterungseffekts für deterministisches Modellieren zu verifizieren. Abbildung 2.56 zeigt die Abnahme des maximalen Durchsatzes von Apache Axis als eine Funktion der verarbeiteten Anfragen (links), sowie ein aus mehreren Läufen erstelltes Modell und seine Abweichungen (rechts).

Die Standardmaßnahme gegen Softwarealterung ist ein regelmäßiger Restart (Verjüngung) der Anwendungen (Software rejuvenation). Unsere Arbeit folgte dem neueren Ansatz, solche



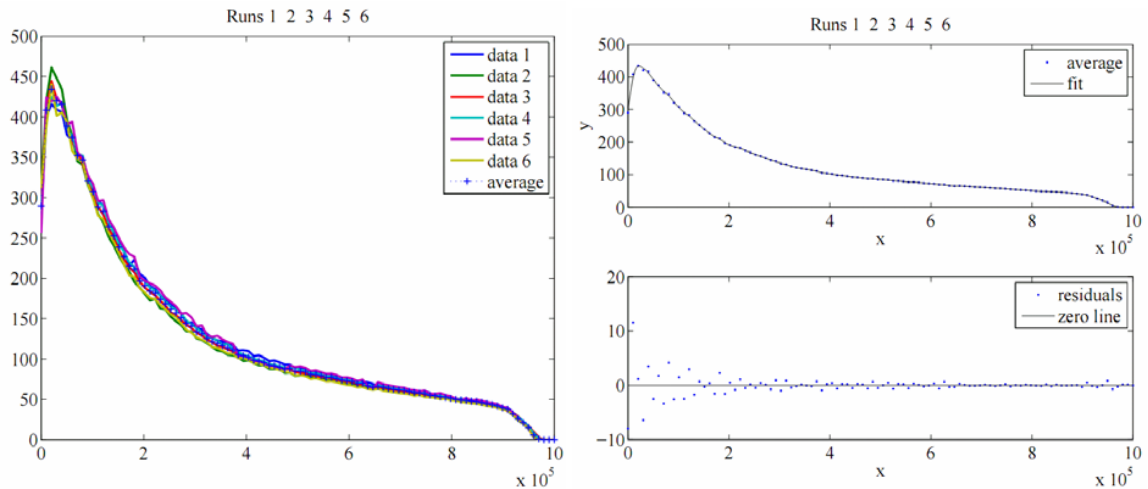


ABBILDUNG 2.56: Abnahme des maximalen Durchsatzes von Apache Axis als eine Funktion der verarbeiteten Anfragen (links) und das auf mehreren Läufen erstellte Modell und seine Abweichungen (rechts).

Restarts adaptiv zu erzeugen, um Ausfallzeiten zu verkleinern. Die oben erwähnten Modelle dienten hierbei als Basis für die Optimierung der Restartzeiten, um den durchschnittlichen Durchsatz eines Servers zu maximieren. Abbildung 2.57 (links) zeigt den durchschnittlichen Durchsatz in Abhängigkeit von dem Zeitpunkt (als Anzahl der geleisteten Anfragen) des Restarts – die Spitze entspricht dem Maximum.

Ein weiterer Einsatz der Modelle findet sich bei der Maximierung des minimalen Durchsatzes des Servers. Durch den Einsatz von virtuellen Maschinen und die Umleitung von Anfragen von einem „gealterten“ (virtualisierten) Server auf einen „frischen“ Server konnten wir erreichen, dass der mögliche Durchsatz von Apache Axis niemals unter einen Schwellenwert (SLA level) fällt und zugleich die Anwendung immer verfügbar bleibt – trotz der Alterung. Abbildung 2.57 (rechts) zeigt den durch solche Restarts und die Virtualisierung erreichten Durchsatz.

Ein weiterer Anwendungsbereich der Modellierungstechniken ist die Vorhersage von Verfügbarkeit der Knoten in einem Desktop Pool, also Ansammlungen von Desktop Computern, die in größeren Unternehmen oder Universitäten zusätzlich zu ihrer primären Aufgaben in einen virtuellen Rechenverbund oder Grid zusammengeschlossen wurden. Im Rahmen des Projektes wurden mehrere Studien an realen Daten durchgeführt. Bei einer der Studien haben wir untersucht, welche Verfahren die Vorhersagegenauigkeit erhöhen können, wenn nur geringe Datenmengen zum Training der Modelle vorliegen – zum Beispiel bei hoher Dynamik der Hardwareänderungen. Eine weitere Studie zielte darauf ab, das Checkpointing und die Migration von Jobs mit Hilfe der Vorhersagen der Verfügbarkeit effizienter zu gestalten.

Das im Laufe dieses Projektes aufgebaute Softwaresystem „OPENSERIES“ wurde weitgehend umgeschrieben, um Studien sowohl im Echtzeit- als auch im Batchbetrieb ohne Anpassungen des Codes durchführen zu können. Diese Eigenschaft ist einmalig unter solchen Frameworks und macht es (nun umbenannt in „STREAMMINER“) zu einem hervorragenden Instrument, um einerseits komplexe Zeitreihenmodelle ausführlich zu erkunden, aber auch diese ohne

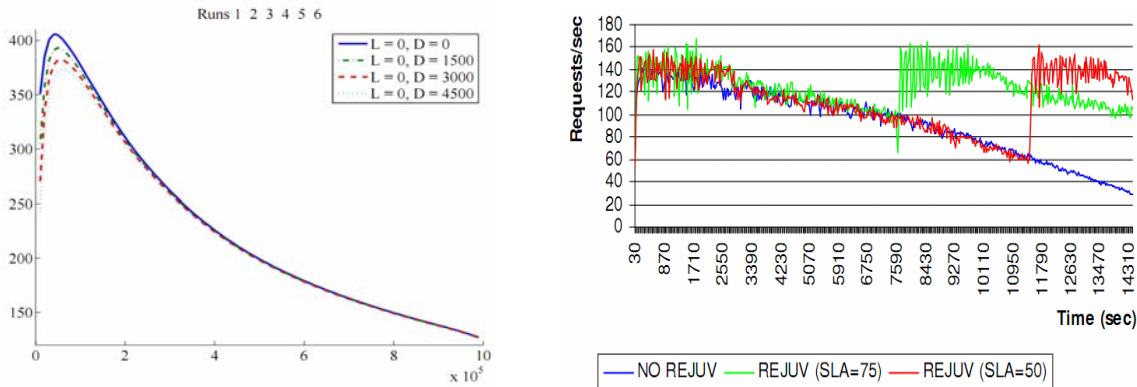


ABBILDUNG 2.57: Der durchschnittliche Durchsatz von Apache Axis in Abhängigkeit vom Restartzeitpunkt (links); Einhalten des Schwellenwertes des Durchsatzes durch Restarts in einer virtualisierten Umgebung.

Verzögerung und Zusatzaufwand in Echtzeit einzusetzen. Nach der Vervollständigung der Dokumentation und einer Testphase wird dieses Framework unter einer Public-Domain Lizenz der Öffentlichkeit zur Verfügung gestellt.

### I3HP – Hadron Physics

**Bearbeitet von:** Hinnerk Stüben, Stefan Wollny

**Kooperationspartner:** 48 europäische Institute, Koordination: Istituto Nazionale di Fisica Nucleare (INFN), Frascati, Italien

**Förderung:** Europäische Union

Im Rahmen der *Integrated Infrastructures Initiative Hadron Physics (I3HP)*, in der über 2000 europäische Wissenschaftler im Bereich der stark wechselwirkenden Materie forschen, stellt das ZIB Massenspeicherkapazität zur Verfügung, auf die über Grid-Technologien von überall in Europa aus zugegriffen werden kann [23]. So werden wertvolle Zwischenergebnisse aufwendiger Simulationen zur weiteren Analyse für jeden berechtigten Wissenschaftler mit einem einfachen Linux-PC und Internet-Anschluss verfügbar. Mehrere Terabyte an Nutzdaten wurden im Laufe des Jahres 2006 gespeichert, wobei Nutzung und Nutzerzahl stetig ansteigt. Neben der Basissoftware *dCache*<sup>2</sup> ermöglichen die am ZIB entwickelten Benutzerkommandos, die sog. *ltools*<sup>3</sup>, einen einfachen Zugriff auf die Daten, ohne dass sich der Benutzer mit der unterliegenden Grid-Technologie vertraut machen muss.

### Publikationen

[1] A. Andrzejak, A. Reinefeld, F. Schintke, T. Schütt: *On Adaptability in Grid Systems*, In: Future Generation Grids, V. Getov, D. Laforenza, A. Reinefeld (Eds.), pp. 29–46, Springer Science + Business Media Inc., Januar 2006.

[2] A. Andrzejak, P. Domingues, L. Moura Silva: *Predicting Machine Availabilities in*

<sup>2</sup><http://www.dcache.org>

<sup>3</sup><http://www.zib.de/i3hp/ltools>

- Desktop Pools*, 2006 IEEE/IFIP Network Operations & Management Symposium (NOMS 2006), Vancouver, Canada, April 2006.
- [3] A. Andrzejak, S. Graupner, S. Plantikow: *Predicting Resource Demand in Dynamic Utility Computing Environments*, International Conference on Autonomic and Autonomous Systems (ICAS'06), Santa Clara, USA, July 2006.
- [4] A. Andrzejak, L. Moura Silva: *Deterministic Models of Software Aging and Optimal Rejuvenation Schedules*, CoreGRID TR-0047, November, 2006.
- [5] T. Beitz, R. Laudien, H. G. Löhmannsröben, B. Kallies: *Ion mobility spectrometric investigation of aromatic cations in the gas phase*, J. Phys. Chem. A 110 (2006), 3514–3520.
- [6] P. Domingues, A. Andrzejak, L. Moura Silva: *Using Checkpointing to Enhance Turnaround Time on Institutional Desktop Grids*, 2nd IEEE International Conference on e-Science and Grid Computing (eScience 2006), Amsterdam, Netherlands, 2006.
- [7] V. Getov, D. Laforenza, A. Reinefeld (Hrsg.): *Future Generation Grids*, Springer-Verlag, ISBN: 0 387 27935-0, Januar 2006.
- [8] C. A. Herrmann, T. Langhammer: *Combining Partial Evaluation and Staged Interpretation in the Implementation of Domain-Specific Languages*, In Science of Computer Programming, Special Issue on the First MetaOCaml Workshop 2004, 62(1):47–65, September 2006.
- [9] F. Hupfeld, M. Gordon: *Using distributed consistent branching for efficient reconciliation of mobile workspaces*, 2nd International Conference on Collaborative Computing: Networking, Applications and Worksharing (IEEE CollaborateCom) Workshops, 2006.
- [10] B. Kolbeck, P. May, T. Schmidt-Goenner, T. Steinke, E. W. Knapp: *Connectivity independent protein fold detection: A hierarchical approach*, BMC Bioinformatics 2006, 7:510, Nov. 2006.
- [11] P. May, M. Bauer, C. Köberle, G.W. Klau: *A computational approach to microRNA detection*, ZIB-Report 06-44, Nov. 2006.
- [12] P. May, H. C. Ehrlich, T. Steinke: *ZIB Structure Prediction Pipeline: Composing a Complex Biological Workflow through Web Services*, In: W.E. Nagel, W.V. Walter, and W. Lehner (Eds.): Euro-Par 2006, Parallel Processing, 12th International Euro-Par Conference, 2006.
- [13] P. May, Th. Steinke: *THESEUS – Protein Structure Prediction at ZIB*, ZIB-Report 06-24, 2006.
- [14] R. Meier, M. Molinier, C. Anson, A. K. Powell, B. Kallies, R. v. Eldik: *Structure of sodium bis(N-methyl-iminodiacetato)iron(III): trans-meridional N-coordination in the solid state and in solution*, Dalton Trans. **46** (2006), 5506–5514.
- [15] M. Meyer, T. Steinke, J. Sühnel: *Density functional study of isoguanine tetrad and pentad sandwich complexes with alkali metal ions*, J. of Mol. Modeling, online first DOI 10.1007/s00894-006-0148-5, Springer, September 30, 2006.

- [16] M. Moser: *Platzierung von Replikaten in Verteilten Systemen*, Diplomarbeit, HU Berlin, Mai 2006.
- [17] K. Peter, P. Sobe: *Flexible Definition of Data and Redundancy Layout for Storage Systems*, Sixth European Dependable Computing Conference (EDCC-6), Proceedings Supplemental Volume, pp. 59/60, Coimbra, Portugal, October 2006.
- [18] T. Röblitz, K. Rzacca: *On the Placement of Reservations into Job Schedules*, In: W.E. Nagel, W.V. Walter, and W. Lehner (Eds.): Euro-Par 2006, Parallel Processing, 12th International Euro-Par Conference, pp. 198 - 210, August 2006.
- [19] T. Röblitz, F. Schintke, A. Reinefeld: *Resource Reservations with Fuzzy Requests*, Concurrency and Computation: Practice and Experience, 18(13):1681-1703, November 2006.
- [20] T. Schütt, F. Schintke, A. Reinefeld: *Structured Overlay without Consistent Hashing: Empirical Results*, Sixth Workshop on Global and Peer-to-Peer Computing (GP2PC'06), May 2006.
- [21] T. Steinke, A. Reinefeld, T. Schütt: *Experiences with High-Level Programming of FPGAs on Cray XD1*, CUG Proceedings 2006.
- [22] H. Stüben, *Mass storage capacity for computational hadron physics*, in: Hadron Physics, I. J.D. MacGregor und R. Kaiser (Hrsg.), Taylor & Francis.
- [23] H. Stüben, S. Wollny: *Using the Mass Storage System at ZIB within I3HP*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 153 (2006) 300–305.
- [24] D. Talia, P. Trunfio, J. Zeng, M. Höggqvist: *A DHT-based Peer-to-Peer Framework for Resource Discovery in Grids*, CoreGRID TR-0048, June, 2006.
- [25] D. Talia, P. Trunfio, J. Zeng, M. Höggqvist: *A Peer-to-Peer framework for resource discovery in large-scale Grids*, CoreGRID Integration Workshop, October, 2006.

### 2.3 Auszeichnungen und Rufe

#### Peter Deuffhard

- Internationaler Wissenschaftspreis des ICIAM „für originäre, tiefgreifende und unvergleichliche Verdienste in der angewandten Mathematik“

#### Martin Grötschel

- Alwin-Walther-Medaille, gemeinsam verliehen durch die TU Darmstadt, das Fraunhofer-Institut für Graphische Datenverarbeitung und das Zentrum für Graphische Datenverarbeitung e. V.
- Ehrendoktorwürde, verliehen durch die Universität Karlsruhe
- John von Neumann Theory Prize (gemeinsam mit László Lovász, Eötvös Loránd University, Budapest, Ungarn, und Alexander Schrijver, CWI, Amsterdam, Niederlande), verliehen durch INFORMS

**Volker Kaibel**

- Ruf auf eine W3-Professur für Mathematische Optimierung an der Fakultät für Mathematik der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg

**Marika Neumann**

- Diplomarbeitspreis 2006 der Deutschen Gesellschaft für Operations Research (GOR)

**Marc Steinbach**

- Ruf auf eine W2-Professur für Algorithmische Optimierung an der Fakultät für Mathematik und Physik der Leibniz-Universität Hannover



## Wissenschaftliche Dienstleistungen

### 3.1 Überblick

Das Jahr 2006 war für die Abteilung „Wissenschaftliche Informationssysteme“ ein Jahr des Wandels. Veränderungen in der Hochschulpolitik der Länder (Stichwort: Globalisierung der Haushalte der Hochschulen) führten zu strukturellen Änderungen mit Auswirkungen auch im Bereich der Bibliotheken und der Verbände, so auch für den am ZIB angesiedelten Kooperativen Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV). Der überlegene Erfolg des Internets und der Suchmaschine *Google* – jetzt auch im Bereich des wissenschaftlichen Publizierens (Stichworte: *Google Scholar* und *Google Book Search*) – stellte ferner das Math-Net-Projekt in seinem auf Suchmaschinen-Technologie zentrierten Anteil vor die Sinnfrage. Inzwischen wird deutlich, dass auch der Bereich der Museen, Archive und Bibliotheken in Deutschland von der „Google-Revolution“ erfasst wird, die bei den wissenschaftlichen Bibliotheken in Deutschland ein wesentlicher Auslöser für die dort anhaltenden Strukturdiskussionen ist.

Der zur Jahresmitte 2006 noch Erfolg versprechende Versuch, im Zusammenhang mit den geplanten e-Science-Aktivitäten des BMBF eine neue Grundlage für die Fortsetzung der auf *Open Access* ausgerichteten Initiative des ZIB im Bereich des wissenschaftlichen Publizierens zu gewinnen, scheiterte leider im Herbst des Jahres. Das BMBF schlug eine andere Förderstrategie ein. Die für das Wissensmanagement und e-Science zuständige Abteilung am BMBF wurde geschlossen.

Veränderungen sind in Zeiten des schnellen Wandels aber nicht grundsätzlich negativ zu sehen, im Gegenteil. Mit konservativen Worten ausgedrückt: „Nur derjenige, der zu Veränderungen bereit ist, wird die Substanz dessen erhalten können, was uns allen erhaltenswert und wichtig ist“.

*Kooperativer Bibliotheksverbund Berlin-Brandenburg (KOBV):* Das Jahr 2006 war für den KOBV ein außergewöhnliches Jahr. Unter dem Eindruck der fortschreitenden Globalisierung der Haushalte der Hochschulen, der dazu korrelierenden Verknappung der Mittel und der parallel verlaufenden „Zeitschriftenkrise“ der wissenschaftlichen Bibliotheken liefen in den deutschen Bibliotheksverbänden verschiedene Konzentrationsprozesse an. Auch im KOBV wurde intensiv über eine Änderung der Strategie und neue Kooperationsmöglichkeiten nachgedacht und diskutiert: zunächst in prominenten Bibliotheken, dann auf Länderebene, im Kuratorium des KOBV und in der KOBV-Zentrale, schließlich in allen Bibliotheken des KOBV. Das Kuratorium nahm in seiner Strategiegruppe, in der auch die Leitung des ZIB vertreten war, den initialen Druck, der von dem Hochschulbibliothekszentrum des Landes Nordrhein-Westfalen (*hbz*) ausging, auf und verwandelte ihn durch eine an alle Verbände gerichtete Einladung zu Kooperationsgesprächen in eine überregional geführte Diskussion.

Dieser Diskussionsprozess brachte dem KOBV das Ergebnis, in erster Linie eine strategische Allianz mit dem Bibliotheksverbund Bayern (BVB) anzustreben. Das Kuratorium hat in seiner Sitzung am 29.09.2006 auf der Grundlage von hier nicht im Einzelnen wiedergegeben Grundsätzen einstimmig beschlossen,

1. dass der KOBV mit dem BVB über eine enge Kooperation verhandelt, die auch den Kernbereich (Katalogisierung/zentrale Datenhaltung) einschließt.
2. dass der KOBV mit weiteren Verbänden in Teilbereichen kooperiert, insbesondere mit dem BSZ (z. B. in den Bereichen: virtuelle Auskunft, elektronische Semesterapparate, Weiterentwicklung von Nutch/Lucene).

Das Kuratorium hat ferner in diesem Zusammenhang eine Verhandlungsgruppe beauftragt, umgehend entsprechende Gespräche mit dem BVB aufzunehmen und bis zum Februar 2007 eine Kostenabschätzung vorzulegen. Der Hauptausschuss des KOBV hat die Gespräche der Verhandlungsgruppe durch vier Arbeitsgruppen begleitet und unterstützt, die er in seiner Sitzung am 19.10.2006 ins Leben gerufen hat und die ihre Ergebnisse inzwischen vorgelegt haben.

Das Kuratorium des KOBV hat mit dem genannten Beschluss den Willen zum Ausdruck gebracht, in Abkehr von seiner ursprünglich von der Politik vorgegebenen dezentralen Organisationsform einen Paradigmenwechsel in Richtung auf die zentrale Organisationsform des BVB zu vollziehen. Der BVB selbst hat in der Zwischenzeit öffentlich erklärt, eine Kooperation mit dem Hochschulbibliothekszentrum des Landes Nordrhein-Westfalen (*hbz*) und dem österreichischen Bibliotheksverbund anzustreben, die weit über das o. g. Ziel hinausgeht. Angestrebt wird ein gemeinsamer Zentralkatalog für bibliotheksinterne Aufgaben und ein Zugang für Nutzer auf Basis der Internet-Suchmaschine (FAST). Ob und mit welchem Aufwand die Ziele des KOBV-Kuratoriums auch im Rahmen einer erweiterten Kooperation erreichbar sind, bleibt derzeit noch offen.

*Math-Net und Math&Industry:* Das Math-Net-Projekt befindet sich heute in seinem zwölften Jahr. Ausgehend von ersten Aktivitäten in Deutschland gemeinsam mit der Deutschen Mathematiker-Vereinigung und den mathematischen Fachbereichen und Forschungsinstituten hat es seine Aktivitäten in Kooperation mit anderen Fachgesellschaften zunächst in den Wissenschaften zusammen mit der IuK-Initiative in Deutschland und dann in der Mathematik in den europäischen und in den internationalen Raum ausgedehnt, in den letzten Jahren im Kontext der *Open-Access-Initiative* der *International Mathematical Union* (IMU).

Auch wenn das Math-Net heute technisch von Suchmaschinen der Industrie und insbesondere von Google auf technischem Gebiet überholt wurde, ist es doch so, dass auch Google ohne Content und Server, die von anderer Seite bereitgestellt werden, inhaltsleer wäre. Wenn uns heute mit Google und den Internet-Suchmaschinen eine breite und hochgradig aktuelle Fülle wissenschaftlicher Informationen zur Verfügung steht, dann ist dieses nicht zuletzt auf Initiativen wie die des Math-Net zurückzuführen. Dieser Umstand wird gelegentlich übersehen. Die im Math-Net-Projekt engagierten Mitarbeiter begegnen des Öfteren dem Argument: „Aber es gibt doch Google“.

Zur Jahresmitte wurde beschlossen, das Math-Net-Projekt am ZIB einzustellen und nur noch die absolut notwendigen („betrieblichen“) Aktivitäten und Projektbestandteile fortzuführen, die im Rahmen des Math-Net entstanden sind. Hierzu gehören die Betreuung, Pflege und



Weiterführung der mathematischen Server:

- der elektronischen Bibliothek *eLib* (<http://elib.zib.de>) und
- des deutschen Spiegels der *netlib* (<http://elib.zib.de/netlib>),
- des zentralen Math-Net (<http://www.math-net.org>) mit
- den Math-Net Links (<http://www.math-net.de/links>),
- der IMU (<http://www.mathunion.org>) mit den Publikationen und
- des International Congress of Mathematicians 1998 (<http://www.mathunion.org/ICM98>),
- des Math&Industry-Projektes (<http://www.mathematik-21.de>) und
- der entsprechenden Werkzeugsammlung zur Erstellung von Webseiten.

*Computeralgebra:* Zu den Verpflichtungen aus vergangenen Projekten gehören auch die weitere Betreuung und der Vertrieb des Symbolmanipulationssystems REDUCE, das von einer relativ kleinen, aber exklusiven Gemeinde von Hochenergiephysikern genutzt wird, und die Pflege der Lisp-Variante *Portable Standard Lisp* als technische Basis für REDUCE. 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. Ein Schwerpunkt der Arbeiten im Berichtszeitraum war die Parallelisierung von Anwendungen aus der Computer Algebra.

Detailliertere Informationen dazu finden Sie im Abschnitt „Schwerpunkte“ dieses Kapitels sowie im Kapitel 6 „Software“ des Jahresberichtes.

*e-Science:* Ein letztes Wort zum Thema e-Science und Wissensvernetzung. Trotz der oben erwähnten Schließung des dafür zuständigen Referates im BMBF wurde der Versuch unternommen, die im Bereich von e-Science bereits geförderten Projekte zusammenzuführen und im Zuge eines der D-Grid-Initiative nachempfundenen Integrationsvorhabens *links4science* besser miteinander zu verknüpfen. Zu den Planungen des Integrationsprojekts hat das ZIB den Teil einer Wissensschicht zur Produktion und Publikation von Mathematik-Wissen in mathematisch orientierten Kollaborationen als eigenständiges Teilprojekt beigetragen. Das *links4science*-Vorhaben fand in seiner Gesamtheit zwar keine Akzeptanz beim BMBF, wohl aber der Gedanke, die aus den e-Science-Planungen verbleibende Wissensschicht in das D-Grid zu integrieren. Die Koordination dieser anders gearteten Aufgabe der Integration wurde der Staats- und Universitätsbibliothek Göttingen übertragen.

*Museumsprojekt:* Das Museumsprojekt ist älter als das ZIB. Aufgabe der Arbeitsgruppe ist die EDV-technische Unterstützung von Inventarisations- und Dokumentationsvorhaben in Museen. Zu den zentralen Aufgaben des Museumsprojektes gehört heute – in den Zeiten des Internets – die Vermittlung und Unterstützung international anerkannter Standards in der deutschen Museumswelt. Hierfür arbeitet das Museumsprojekt in erster Linie mit dem Institut für Museumsforschung der Staatlichen Museen zu Berlin – Stiftung Preußischer Kul-

turbesitz (IfM) zusammen und wirkte im Berichtszeitraum in der Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund und im *International Committee for Documentation of the International Council of Museums* (CIDOC) an der Entwicklung des *Conceptual Reference Models* (CRM), einer Domain Ontologie für Museen, sowie korrespondierenden Standards und Vokabularen aktiv mit.

Das Museumsprojekt betreut (seit 1996) die im Internet zugängliche Objektdatenbank des Deutschen Historischen Museums, eines der umfangreichsten Angebote dieser Art in Deutschland. Basissoftware für alle Projekte der Arbeitsgruppe ist das von der britischen *Museum Documentation Association* (MDA) speziell für den Einsatz der Inventarisierung und Dokumentation in Museen entwickelte Datenbanksystem GOS.

## 3.2 Schwerpunkte

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

**Bearbeitet von:** Hildegard Franck, Martin Grötschel, Jörn Hasenclever (bis 30.09.2006) Lavinia Hodoroaba (bis 30.04.2006), Andres Imhof, Uta Kaminsky, Renate Kraft, Monika Kuberek, Katja Kummer, Monika Lill, Stefan Lohrum, Joachim Lügger, Raluca Radu, Beate Rusch, Sybille Volz (seit 01.10.2006)

**Kooperationspartner:** Bibliotheken aus der Region Berlin-Brandenburg, Friedrich-Althoff-Konsortium e.V. (FAK)

**Förderung:** Senatsverwaltung für Bildung, Wissenschaft und Forschung (vormals Wissenschaft, Forschung und Kultur) des Landes Berlin, Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kultur des Landes Brandenburg, Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF)

*Management Summary:*<sup>1</sup> Das Jahr 2006 war wesentlich bestimmt von der Strategiediskussion im KOBV und der Prüfung von Kooperationsmöglichkeiten mit den anderen Verbänden. Diese hatten insofern direkten Einfluss auf die Arbeit der KOBV-Zentrale, als insbesondere Arbeiten im Zusammenhang mit Katalogisierung/Datenhaltung seit Sommer 2006 zurückhaltend angegangen und seit der Aufnahme der Gespräche hinsichtlich einer strategischen Allianz (inkl. der Kernbereiche Erwerbung/Katalogisierung/Datenhaltung) mit dem BVB im September zunächst zurückgestellt wurden. Eine weitere Neuausrichtung in diesem Bereich hat sich 2006 durch die Ergebnisse der von der AG Verbundsysteme eingesetzten AG Neukatalogisierung ergeben, die im 4. Quartal vorgelegt wurden und verbundübergreifende kooperative Verfahren zur Neukatalogisierung sowie automatisierte Verfahren zur Datenanreicherung der Kataloge vorsehen. Ebenso ist der künftige Einsatz von Suchmaschinentechologie im KOBV in Zusammenhang mit der Kooperation mit BSZ und Hebis zur Weiterentwicklung und gemeinsamen Pflege von Nutch/Lucene zu sehen, die im kommenden Jahr intensiviert angegangen werden soll, um die Entwicklungsarbeiten auf eine gemeinsame Plattform zu stellen. Nicht zuletzt sind durch die Treffen der AG Strategie und die Gespräche mit den Verbänden sowie deren Vor- und Nachbereitung und die Erstellung von Strategie- und Auswertungspapieren in nicht vorhersehbarem Maße Personalkapazitäten der KOBV-Zentrale gebunden worden. Auch an den vier im Oktober eingesetzten Arbeitsgruppen des Hauptausschusses, die die Verhandlungsgruppe auf der Arbeitsebene unterstützen sollen,

<sup>1</sup>Der nachfolgende Text zum Pkt. 4.2.1 ist mit dem *Management Summary* des „Jahresberichts“ an das KOBV-Kuratorium, dem „Arbeitsplan der KOBV-Zentrale für 2006 – Erfüllungsstand im November 2006“ identisch. Nähere Ausführungen zu den hier zitierten Arbeitsbereichen 1–13 finden sich in diesem Bericht.

ist die KOBV-Zentrale inhaltlich und koordinierend beteiligt: AG 1 zum Komplex „Erwerbung/Katalogisierung/Datenhaltung“, AG 2 zum Komplex „ASP für Sisis-Systeme“, AG 3 zum Komplex „Kataloganreicherung“ und AG 4 zum Komplex „Basisdienste“, der insgesamt von der KOBV-Zentrale zu bearbeiten ist.

*Erfüllungsstand der im Arbeitsplan 2006 der KOBV-Zentrale aufgeführten Arbeiten:* Die Konsolidierung der Online-Fernleihe (*Arbeitsbereich 1*), ein vordringliches Betriebsprojekt der KOBV-Zentrale für das laufende Jahr, konnte 2006 abgeschlossen werden. Mit der Einrichtung der AG Fernleihe, die sich in regelmäßigen Abständen trifft, sind auch Regelverfahren für die Weiterentwicklung der Online-Fernleihe – in enger Zusammenarbeit von KOBV-Zentrale und Bibliotheken – etabliert worden. Im Betriebsbereich der KOBV-Zentrale lag der Schwerpunkt im Jahre 2006 in der Optimierung und Verbesserung der Katalogdaten der Bibliotheken (*Arbeitsbereich 2*), um den Nutzern mehr und bessere Sucheinstiege zu bieten. Die KOBV-Zentrale hat die von den Bibliotheken gewünschten Datenselektionen und -lieferungen zur lokalen Kataloganreicherung mit Sacherschließungs- und Normdaten durchgeführt. Eine Neuausrichtung hinsichtlich der Arbeiten hat sich im Laufe des Jahres insofern ergeben, als die von der AG der Verbundsysteme eingesetzte AG Neukatalogisierung, in der auch die KOBV-Zentrale mitarbeitet, im 4. Quartal 2006 ihre Ergebnisse vorgelegt hat. Die von der AG entwickelten Verfahren, die auch eine automatische Datenanreicherung vorsehen, sollen bis Mitte 2007 umgesetzt werden. Der gesamte Komplex ist zudem im Zusammenhang mit der anvisierten strategischen Allianz mit dem BVB zu sehen, die auch den Kernbereich (Erwerbung/Katalogisierung/ Datenhaltung) mit einschließt. In diesem Rahmen befasst sich seit Oktober die vom Hauptausschuss eingesetzte AG 1 mit dem Themenkomplex.

Ebenso ist das Thema „Kataloganreicherung“ mit weitergehenden Informationen (Scans) wie Inhaltsverzeichnissen, Abstracts usw. im Zusammenhang mit den Gesprächen mit dem BVB zu sehen und wird im Rahmen der AG 3 bearbeitet. Für diese Thematik hat die AG der Verbundsysteme 2006 ebenfalls eine AG eingesetzt, die Verfahren entwickeln soll, damit ein Scan künftig in Deutschland und Österreich möglichst nur einmal erstellt wird und nachgenutzt werden kann. Auch in dieser überregionalen AG Kataloganreicherung arbeitet die KOBV-Zentrale mit.

Mit dem Komplex „Verbesserung des Retrievals“ (*Arbeitsbereich 3*) durch Einsatz von Suchmaschinentechnologie war ein Teil des Entwicklungsbereiches der KOBV-Zentrale schwerpunktmäßig befasst: Auf der Basis von Nutch/Lucene wurde ein Prototyp für die Suche mittels Suchmaschinentechnologie realisiert und im Oktober für das Testen durch die Bibliotheken freigegeben. Zur Verbesserung der Navigation wurde ein Konzept für ein *Faceted Browsing* entwickelt. Unabdingbare Voraussetzung, um ein *Faceted Browsing* im KOBV zu realisieren, ist allerdings die Anreicherung der Kataloge mit Sacherschließungsdaten. Der Einsatz von Nutch/Lucene ist insgesamt im Zusammenhang mit der Kooperation mit BSZ und Hebis zu sehen und im kommenden Jahr gemeinsam mit den Kooperationspartnern anzugehen. Dies trifft auch auf den Arbeitsbereich 4 zu, nachdem Ende 2006/Anfang 2007 die Umstellung des Volltextservers auf Lucene erfolgt ist.

Der im Jahre 2005 aufgebaute und seit September 2005 im Routinebetrieb laufende Volltextserver (*Arbeitsbereich 4*) wurde im Jahre 2006 weiter ausgebaut, sowohl die Komponente „Opus-Dokumentenserver“ als auch die Komponente „Zeitschriftenartikelserver“. Als ein Erfolg hat sich 2006 insbesondere der 2005 eingerichtete ASP-Dienst „Opus- und Archivierungsdienste“ herauskristallisiert, in dessen Rahmen die KOBV-Zentrale ein Konsortialmodell zum Betreiben lokaler Publikationsserver (inklusive Repository zur Archivierung

der elektronischen Dokumente) anbietet. Hier ist vor allem der flächendeckende Einsatz im Land Brandenburg zu erwähnen, den die KOBV-Zentrale auf der Basis eines Vertrages mit dem Hochschulverbund Multimedia Brandenburg (HVMB) realisiert hat. Bis auf zwei Einrichtungen, deren Teilnahme erst für 2007 vorgesehen ist, hat die KOBV-Zentrale 2006 alle Hochschulbibliotheken des Landes Brandenburg sowie die SLB Potsdam mit lokalen Publikationsservern ausgestattet. Weitere Berliner Einrichtungen wie die ZLB, die FHW und die FHTW sind 2006 dazu gekommen, so dass – mit den im Jahre 2005 in Betrieb genommenen Instanzen von TU Berlin, UdK und UB Potsdam – Ende 2006 bereits 13 Einrichtungen den ASP-Dienst der KOBV-Zentrale nutzen. Der Zeitschriftenartikelservers, der 2005 mit den Archivdaten von Kluwer und Springer in Betrieb genommen wurde, wurde um die Archivdaten von Elsevier erweitert.

Beim Volltextserver, in dem Zeitschriftenartikel und die e-Dokumente der lokalen Publikationsserver durchsuchbar sind, hat die KOBV-Zentrale 2005 erstmals Suchmaschinentechologie (Open Source-Software Swish-e) produktiv eingesetzt. 2006 wurde der Volltextserver auf die leistungsfähigere Software Lucene umgestellt und sämtliche Indices mit Lucene neu aufgebaut, so dass der Volltextserver Ende 2006/ Anfang 2007 auf Lucene umgestellt werden kann. Die weitere Entwicklung ist, wie bereits im Arbeitsbereich 3 erwähnt, im Zusammenhang mit der Kooperation mit BSZ und Hebis zur Weiterentwicklung von Nutch/Lucene gemeinsam mit den Kooperationspartnern anzugehen.

Die Evaluierung von Systemen zur Speicherung und zum Nachweis von Multimedia-Dokumenten brachte mangels Nachfrage in den Bibliotheken kein Ergebnis. Diese Thematik soll ggf. im Zusammenhang mit den Kooperationsgesprächen, insbesondere mit dem BVB, nochmals aufgenommen werden. Für den von der DFG zur Überarbeitung zurückgewiesenen DFG-Antrag zum Projekt „Virtueller Dokumentenspeicher des KOBV (VDS des KOBV)“ (*Arbeitsbereich 5*) sollte im Jahre 2006 der Status geklärt werden. Mangels Erfolgsaussichten (der KOBV-Antrag wurde im Sommer 2004 zurückgewiesen) und vor dem Hintergrund grundsätzlich geänderter Rahmenbedingungen (die ursprünglich beantragte Entwicklung eines Prototypen – den KOBV-Volltextserver – hat die KOBV-Zentrale aus eigenen Mitteln realisiert; prototypische Entwicklungen werden zudem aufgrund geänderter Förderrichtlinien nicht mehr von der DFG gefördert) wird eine Überarbeitung des Antrages und erneute Einreichung – auch angesichts des hohen Aufwandes – nicht weiter verfolgt.

Das KOBV-Konsortialportal (*Arbeitsbereich 6*) wurde 2006 durch Einbindung weiterer Bibliotheken ausgebaut und die Zielsetzung, Synergien im Rahmen der konsortialen Zusammenarbeit künftig stärker auszunutzen, durch Etablierung einer Arbeitsgruppe angegangen. Hervorzuheben ist, dass die KOBV-Zentrale Mitte 2006 mit dem hbz einen Vertrag zur Nutzung des ASP-Dienstes SFX durch die nordrhein-westfälischen Bibliotheken abgeschlossen hat. Im Rahmen dieser Kooperation wurden bislang sechs SFX-Instanzen für nordrhein-westfälische Bibliotheken eingerichtet.

Im Frühjahr hat die KOBV-Zentrale das Konzept des KOBV-Portals (*Arbeitsbereich 7*) grundlegend umgestellt – vor dem Hintergrund, dass das Verhältnis von nicht durchsuchbaren LinkTo-Ressourcen zu durchsuchbaren Ressourcen mit 1.231 zu 158 (bzw. 9:1) denkbar ungünstig für die Nutzerrecherche ist. Der Schritt bedeutet auch eine Abkehr vom ursprünglichen Ziel des KOBV-Portals, alle Ressourcen in der Region nachzuweisen, das – angesichts der Tatsache, dass lediglich sieben Bibliotheken ihre Ressourcen im KOBV-Portal nachgewiesen haben – nicht erreicht wurde.

Nach dem neuen Konzept, dem der Hauptausschuss zugestimmt hat, wird künftig auf die Nachweisfunktion verzichtet und die veralteten Ressource-Beschreibungen der Bibliotheken werden aus dem Portal herausgenommen. Die durch die Fachredaktion eingebrachten lizenzfreien LinkTo-Ressourcen werden de-aktiviert und ggf. nach und nach – nach erneuter fachlicher Sichtung – durchsuchbar gemacht.

Für die in das KOBV-Portal integrierten Internet-Angebote „KOBV-Suchmaschine“ und „KOBV-Index“ (*Arbeitsbereiche 8 und 9*) hat die KOBV-Zentrale vor dem Hintergrund der Kooperationsgespräche die für 2006 geplanten Erweiterungen, wie beispielsweise das Hosting lokaler Bibliothekssysteme, zurückgestellt. Aus dem gleichen Grund wurden von den Bibliotheken die Vorbereitungen zur Einspielung ihrer Daten in den KOBV-Index nur zurückhaltend betrieben. Im Bereich des Hosting Service (*Arbeitsbereich 10*) ist hervorzuheben, dass der im KOBV betriebene Verbundkatalog Film <http://www.filmportal.de> als die Suchkomponente im „offiziellen“ deutschen Filmportal des Deutschen Filminstituts genutzt wird. Sowohl den VK Film als auch den VK Judaica hat die KOBV-Zentrale 2006 durch die Integration weiterer Bibliotheken ausgebaut.

Beim KOBV-Bibliothekenführer (*Arbeitsbereich 11*) hat die KOBV-Zentrale die für 2006 geplante Neukonzeption verwirklicht, die eine arbeitssparende Nachnutzung und Pflege der Bibliotheksdaten erlaubt. Dazu wurde ein Datenaustausch mit lokalen Anwendungen (bislang für Aleph) entwickelt, so dass die Bibliotheksdaten nun auch lokal gepflegt werden können und in einem automatisierten Verfahren – ohne nochmalige manuelle Eingabe – im Bibliothekenführer aktualisiert werden.

Im Bereich „Pflege der zentralen Software“ (*Arbeitsbereich 12*) konnten zu Beginn des Jahres 2006 die beiden umfangreichen und arbeitsintensiven Migrationen – der Portalsoftware auf MetaLib 3 und des KOBV-Index auf die neue Software Union Catalog – abgeschlossen werden. Auch die Migration von Opus Version 2 auf Opus Version 3 wurde bis Ende November erfolgreich abgeschlossen. Im Berichtsjahr 2006 wurden zum zweiten Mal die Erhebungen zur Balanced Scorecard durchgeführt.

### 3.2.2 Math-Net und Math&Industry

**Bearbeitet von:** Wolfgang Dalitz, Martin Grötschel, Robert Roggenbuck, Wolfram Sperber (bis 30.09.2006)

**Kooperationspartner:** Committee on Electronic Information and Communication (CEIC) der International Mathematical Union (IMU), Fachgruppe „Information und Kommunikation“ der Deutschen Mathematiker-Vereinigung (DMV) und der Österreichischen Mathematischen Gesellschaft (ÖMG)

**Förderung:** Institut für Wissenschaftliche Information Osnabrück, BMBF

*Math-Net:* Die Fachgruppe Information und Kommunikation der DMV und ÖMG veranstaltete auf der DMV-Jahrestagung 2006 in Bonn wieder ein 2-tägiges Minisymposium mit dem Schwerpunkt „Mathematik und Anwendungen für das Internet“. Insbesondere Themen im Bereich der Digitalen Bibliothek, Suchmaschinentechnologien und Expertendatenbanken sind weiterhin die besonderen Vertiefungsgebiete der Fachgruppe.

*Math&Industry:* Die Arbeiten am Informationsportal für das BMBF-Mathematikprogramm<sup>2</sup> wurden weitergeführt. Das Portal „Math&Industry“ bietet sowohl einen Überblick über das

---

<sup>2</sup><http://www.mathematik-21.de/>

Mathematikprogramm insgesamt als auch spezifische Information über die einzelnen Projekte. Dazu werden im Rahmen der Projekte eigene Webseiten erstellt, die sowohl das Projekt selbst als auch die erzielten Ergebnisse und die am Projekt beteiligten Personen und Institutionen umfassen.

Insbesondere soll das Anwendungspotenzial der in den Projekten entwickelten Methoden und Verfahren in den Web-Präsentationen zum Ausdruck kommen. Die Klassifikation der Projekte nach mathematischer Herkunft und Anwendungsgebiet ermöglicht eine an den Bedürfnissen der Benutzer ausgerichtete Navigation über die Informationen des Portals. Mit Techniken des Semantic Web werden verschiedene Informationen aus den Webseiten der Projekte extrahiert und zu neuen Informationsdiensten zusammengefasst. Zusätzlich stehen im Portal Informationen über das Mathematikprogramm selbst bereit.

Auf dem Portal stehen inzwischen Informationen über alle vier bisherigen Förderperioden mit mehr als 200 Projekten der angewandten Mathematik zur Verfügung.

Die Schwerpunkte der Arbeiten im Berichtszeitraum waren:

- Abschluss der Entwicklungsarbeiten an und Freigabe der Expertendatenbank

Das im letzten Zwischenbericht dargestellte dynamische Konzept der Expertendatenbank, das nur ein einstufiges Schema für die Expertisegebiete fest vorgibt, wurde als neuer Dienst in das Math&Industry-Portal integriert. Die Komponente des WebSite-Makers, mit der die Web-Präsentation einer Person erzeugt wird, wurde entsprechend angepasst. Die Expertendatenbank und die Erstellungswerkzeuge wurden auf dem Statusseminar des BMBF-Mathematikprogramms in Jülich vorgestellt.

- Verallgemeinerung der Ansätze und Methoden für andere Forschungsprogramme

Ein wesentliches Ziel innerhalb des Projektes war die Übertragung der in Math&Industry entwickelten Konzepte, Methoden und Werkzeuge auf andere Forschungsprogramme. Ein erstes konkretes Projekt, das im letzten Jahr realisiert wurde, ist die Weiterentwicklung bzw. Anpassung des Konzepts auf das Förderprogramm „Netzwerke Grundlagenforschung erneuerbare Energien und rationelle Energieanwendung (NGEE)“<sup>3</sup>. Die Änderungen konzentrierten sich insbesondere auf:

- Organisationsstrukturen

Die Projekte sind ihrerseits in Verbänden organisiert, die auch eigene Informationen haben, z. B. Beschreibung des inhaltlichen Profils eines Verbundes. Diese zusätzliche Struktur muss im Portal abgebildet werden.

- Navigationsstrukturen im Portal

Das Portal bietet sowohl einen Zugang zu den Informationen der Projekte als auch zu den projektübergreifenden Informationen. Innerhalb der (strukturierten) Webseiten der Projekte ist eine weitere Navigation möglich. Die Navigation innerhalb des Portal wurde erweitert.

- Layout des Portals

Das Layout des Portals (Navigationsleisten, Logo, Farbgestaltung, Fonts, Schriftgrößen) soll den Vorgaben des BMBF entsprechen. Die hierfür eingesetzte iframe-Technologie bietet zudem den Vorteil, dass das bestehende Layout der Web-Präsentation des Portals in einfacher Weise aktualisiert werden kann.

<sup>3</sup><http://www.ngee.de/>

- Layout der Webseiten der Projekte  
Layout und inhaltliche Strukturierung wurden im WebSiteMaker getrennt. Damit ist – im Rahmen der Vorgaben des BMBF – eine individuelle Gestaltung der Webseiten der Projekte möglich. Dazu war eine Überarbeitung des entsprechenden Erstellungswerkzeugs, des WebSiteMakers, Voraussetzung.
- Strukturierung der Webseiten der Projekte  
Die inhaltliche Strukturierung der Webseiten der Projekte, also die Aufteilung in Gruppen und Untergruppen sowie deren Benennung, wurde den Anforderungen des Programms angepasst.

Die Technologien für den Aufbau eines Portals und die Erzeugung der Webseiten der Projekte können mit der entwickelten Technologie relativ problemlos auch auf andere Forschungsprogramme übertragen werden.

- Weitere Arbeiten am WebSiteMaker

Im WebSiteMaker hat man jetzt die Möglichkeit, Textpassagen mit Glossareinträgen automatisch zu verlinken. Die verlinkten Begriffe zeigen die Beschreibung aus dem Glossar, sobald sich der Mauszeiger über dem Link befindet. Bei der Durchführung der Verlinkung findet ein Abgleich der Glossareinträge mit den Webseiten statt. Genauer gesagt werden hierbei nur bestimmte Teile der Webseiten auf das Vorhandensein der Glossareinträge überprüft. Das soll verhindern, dass unsinnige Verknüpfungen, etwa zwischen Eigennamen oder Titel und Glossareintrag erzeugt werden. Um die Trefferwahrscheinlichkeit bei der Suche nach den Glossar Begriffen innerhalb der Texte zu erhöhen, wird vor der Verlinkung eine Stammformreduktion durchgeführt, die Flexionsendungen und andere Suffixe entfernt.

Der hierbei verwendete Stemming-Algorithmus von Martin Porter<sup>4</sup> befriedigt jedoch nicht in allen Fällen. Vor allem der Umgang mit Phrasen statt einzelner Begriffe bereitet Schwierigkeiten, die noch einer weiteren Bearbeitung bedürfen.

### 3.2.3 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

<sup>4</sup><http://www.tartarus.org/~martin/PorterStemmer/def.txt>

ZIB. Neben regelmäßigen persönlichen Kontakten der Entwickler bei Besuchen und Tagungen wird die Kommunikation in diesem Projekt primär über das Web abgewickelt (gemeinsame Quelldatenbank mit kontinuierlichem weltweitem Update). Im Berichtszeitraum wurde die Version REDUCE 3.8 weiterhin verbessert und noch vorhandene Fehler wurden beseitigt.

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. Eine Version für Macintosh-Rechner mit Intel-Prozessoren steht nun ebenfalls zur Verfügung.

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. Des Weiteren arbeitet er an einer Implementierung der Faugère'schen Algorithmen zur Berechnung von Gröbnerbasen. 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. An der TU Berlin wurde eine wissenschaftliche Mitarbeiterin eingestellt, um in Zusammenarbeit mit den Mitarbeitern des ZIB die Software weiterzuentwickeln.

Die Zusammenarbeit mit dem ZIB-Fellow Thomas Wolf auf dem Gebiet der *parallelen Computeralgebra* wurde fortgesetzt. Eine wesentliche Erweiterung der Möglichkeiten zum parallelen Rechnen ist durch den Zugang zu den Rechnern des SHARCNET gegeben. Dieses Netzwerk von Hochleistungsrechnern ist im Osten Kanadas angesiedelt und steht der Brock University offen. Thomas Wolf ist der lokale Koordinator für das SHARCNET an der Brock University. Für die Cluster im SHARCNET hat Thomas Wolf eine experimentelle parallele Version seiner Software CRACK erstellt. Bei einem einmonatigen Aufenthalt von Winfried Neun an der Brock University wurde an der Verbesserung und Erweiterung der parallelen Version von CRACK gearbeitet. Nach langer Pause wird die parallele Computeralgebra auch in der Computeralgebragemeinde wieder mehr wahrgenommen. Es gibt erneut spezielle Konferenzen und Workshops zu diesem Thema. Das mag mit den neuerdings zur Verfügung stehenden Parallelrechnern auf dem Schreibtisch (Multicore PCs) zusammenhängen.

Die *Präsentation des Systems REDUCE im World Wide Web* (WWW) ist an vielen Server-systemen 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. 7.700 Euro erzielt. Einen nicht unerheblichen Anteil daran hat die auf Betreiben des ZIB eingerichtete Einstiegs-version, die bei einem Preis von 99 US\$ auch Privatpersonen und Interessenten aus devisenschwachen Ländern einen Zugang ermöglicht. Die 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.

### 3.2.4 Informationstechnische Werkzeuge für Museen

**Bearbeitet von:** Carlos Saro, Regine Stein, Ronni Grapenthin, Andrej Wunrau (bis 30.09.2006)

**Kooperationspartner:** Institut für Museumsforschung 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, Erinnerungsstätte Notaufnahmelager Marienfelde

**Förderung:** Institut für Wissenschaftliche Information Osnabrück, BMBF

Aufgabe der Arbeitsgruppe ist einerseits die EDV-technische Unterstützung von Inventarisations- und Dokumentationsvorhaben in Museen sowie andererseits die Vermittlung und Verbreitung international anerkannter Standards in die deutsche Museumswelt. 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 14 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 und untersucht (Metadaten-)Formate auf ihre Anwendbarkeit für die Bedürfnisse der unterschiedlichen Sammlungen. Grundlage dafür ist das von der CIDOC entwickelte objektorientierte „Conceptual Reference Model“ (CRM, <http://cidoc.ics.forth.gr>), welches sich als „domain ontology“ (im informationstechnischen Sinn) versteht und 2006 als ISO-Standard ISO 21127:2006 publiziert wurde.

Das ZIB war maßgeblich an der Gründung der Initiative „museumsvokabular.de“ beteiligt, die im Mai 2006 mit ihrer Online-Plattform ans Netz ging und auf ein breites Interesse über die Fachgruppe Dokumentation hinaus stößt (siehe URL: <http://www.museumsvokabular.de>). Ziel der Initiative ist die Bereitstellung, Weiterentwicklung und Angleichung von in der Museumsdokumentation verwendetem kontrolliertem Vokabular in einem gemeinsamen Portal.

Zur Vereinfachung des Software-unabhängigen Einsatzes von Thesauri, Systematiken u. ä. wurde vom ZIB insbesondere die Entwicklung eines auf offenen Standards basierenden WEB-Services vorgeschlagen (SKOS – Simple Knowledge Organisation System zur Datenstrukturierung, SOAP als Kommunikationsprotokoll, XML als allgemeines Datenaustauschformat). Der

Service ermöglicht den Zugriff auf von unterschiedlichen Einrichtungen und mit verschiedenen DBMS bereitgestellte Vokabulare. Nachdem vom ZIB ein Prototyp auf einem Workshop vorgestellt und eine Schnittstellendefinition vorgeschlagen wurde, findet derzeit die Abstimmung mit anderen Software-Herstellern statt.

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 Museumsforschung 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 Museum im Wasserwerk Friedrichshagen (seit 1998) und dem Stadtgeschichtlichen Museum Leipzig (seit 2001) sowie mit einigen anderen Museen. Die Arbeitsgruppe finanziert sich damit weitestgehend aus Drittmitteln.

Basissoftware für alle Projekte ist das von der britischen *Museum Documentation Association* (MDA) speziell für den Einsatz zur Inventarisierung und Dokumentation in Museen entwickelte Datenbanksystem GOS. Es ermöglicht die Verarbeitung komplexer Informationsstrukturen und erlaubt dadurch die Beschreibung auch komplizierter Objektzusammenhänge ohne Informationsverlust. Das Programm wird bereits seit 1981 vom ZIB weiterentwickelt und kostenlos an interessierte Museen weitergegeben.

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, ...). Ebenso können die Daten auf unterschiedlichen Medien (Papier, CD, Internet) zur Verfügung gestellt werden, selbstverständlich hat dabei die Publikation von Sammlungsbeständen im Internet besondere Bedeutung. Mit der bereits seit 1996 im Internet zugänglichen Objektdatenbank des Deutschen Historischen Museums (<http://www.dhm.de/datenbank>) zeichnet das ZIB für die technische Betreuung dieses nach wie vor umfangreichsten Angebots dieser Art in Deutschland verantwortlich.

## Supercomputing und Netze

### 4.1 Supercomputing 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 Der Hochleistungsrechner HLRN-I

Gemäß dem Verwaltungsabkommen der Bundesländer 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 Bundesländer teilten sich die Investitionskosten in Höhe von ca. 20 Mio. Euro, während die Sitzländer Berlin und Niedersachsen zusätzlich die laufenden Kosten (Wartung, Strom, Klima, usw.) tragen und das erforderliche Personal bereitstellen.

Der HLRN-Supercomputer (der „Gesamtkomplex“, vgl. Abbildung 4.1) besteht aus den beiden Teilsystemen („Teilkomplexen“) in Berlin und Hannover sowie der dedizierten Datenverbindung („HLRN-Link“). Er bietet mit seinen insgesamt 1024 Power4-Prozessoren eine Spitzenleistung von 5,3 TFlop/s.

Die folgenden Angaben beziehen sich auf das Berliner Landeshochleistungsrechnersystem:

- 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) bestehend aus zwei unabhängigen Netzwerkebenen mit folgenden Leistungsmerkmalen: Maximale Anwendungsbandbreite zwischen zwei Knoten: ca. 1.000 MByte/s, Latenzzeit für den Transfer zwischen zwei Knoten:  $< 5 \mu\text{s}$ .
- Periphere Server: 11 IBM pSeries 655 mit je 4 Prozessoren Power4 (Taktrate 1,3 GHz, 8 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 Vor- und Nachbereitung der Jobs („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.

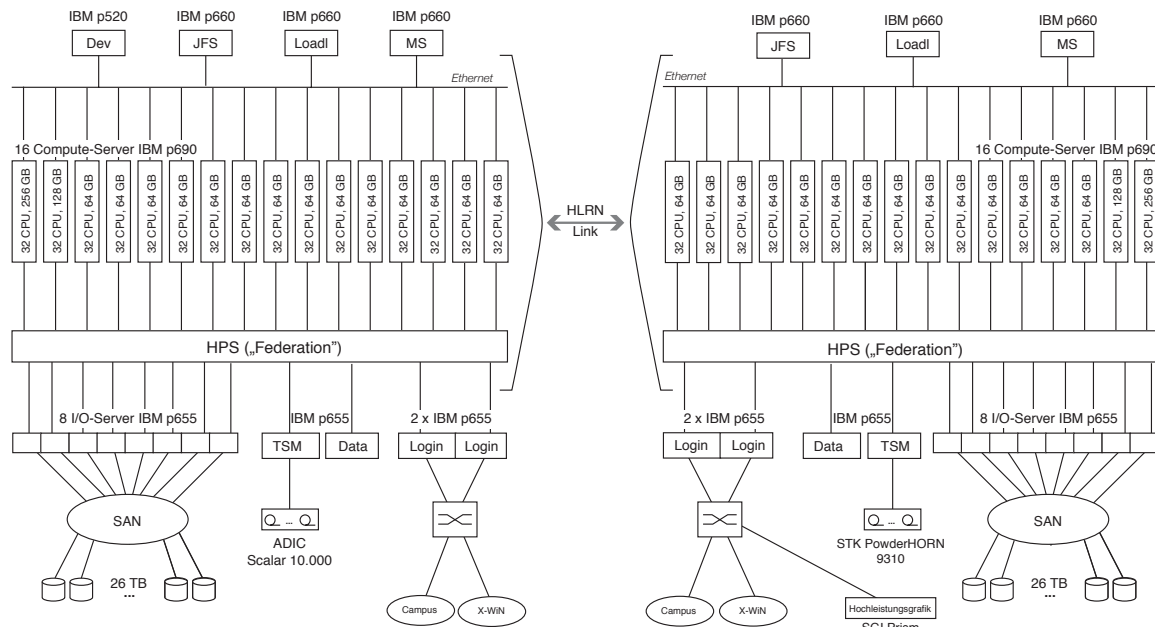


ABBILDUNG 4.1: Gesamtkomplex HLRN-System

- Magnetbandarchivsystem: SUN StorageTek (STK) 9310 ACS mit 17 Magnetbandgeräten vom Typ 9940 B mit einer Datenübertragungsrate von je 30 MByte/s und einer Kapazität von 11.000 Stellplätzen für Magnetbandkassetten; derzeit sind für das HLRN-System neun Magnetbandgeräte mit 1650 Magnetbändern mit je 200 GByte Kapazität (d. h. insgesamt über 400 TByte) reserviert.

Als Verbindung der beiden ca. 300 km voneinander entfernten Teilkomplexe dient ein vom DFN-Verein angemieteter WDM<sup>1</sup>-Kanal des X-WiN-Wissenschaftsnetzes in 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. Ein wesentlicher Vorteil dieser neuen seit Anfang 2006 eingesetzten Verbindung gegenüber der bis Ende 2005 eingesetzten 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`, die über Gigabit-Ethernet-Verbindungen mit den lokalen Netzen von ZIB bzw. RRZN und damit über das X-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.

<sup>1</sup>Wavelength-Division-Multiplexing, Wellenlängen-Multiplexing

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, wie auch schon in den Vorjahren, die Bereitstellung eines stabilen Betriebes, nachdem im Jahr 2004 alle wesentlichen technischen Aufrüstungen durchgeführt wurden. Das System hat seine Kapazitätsgrenze erreicht: Im Jahr 2006 wurden, wie auch schon im Vorjahr, 230.000 NPL<sup>2</sup> an die vom Wissenschaftlichen Ausschuss genehmigten Großprojekte abgegeben.

Das HLRN-System wird von den Wissenschaftlern in Norddeutschland sehr gut genutzt, es ist stets voll ausgelastet und die Nachfrage übersteigt deutlich die zur Verfügung stehende Kapazität. Das ganze Jahr hinweg liegt ständig eine große Last von Aufträgen in der Warteschlange: Abbildung 4.2 zeigt die Wartezeiten in der Input-Queue für die einzelnen Jobklassen nach dem Betriebsmittelverbrauch über das Jahr 2006. Die Wartezeiten lagen insbesondere im 1. Halbjahr zeitweise über 168 h (1 Woche), lediglich während der Ferienmonate August und 1. Hälfte September gab es einen Einbruch in der Abgabe von Aufträgen, so dass nur in dieser Zeit die Wartezeiten in der Regel unter 24 h lagen.

Die Mehrzahl der bearbeiteten Aufträge fordern eine Laufzeit zwischen 24 und 48 h an; näheres kann der Abbildung 4.3 entnommen 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/>).

<sup>2</sup>NPL – Norddeutsche Parallelrechner-Leistungseinheit = 32 Prozessoren je Stunde Kalenderzeit.

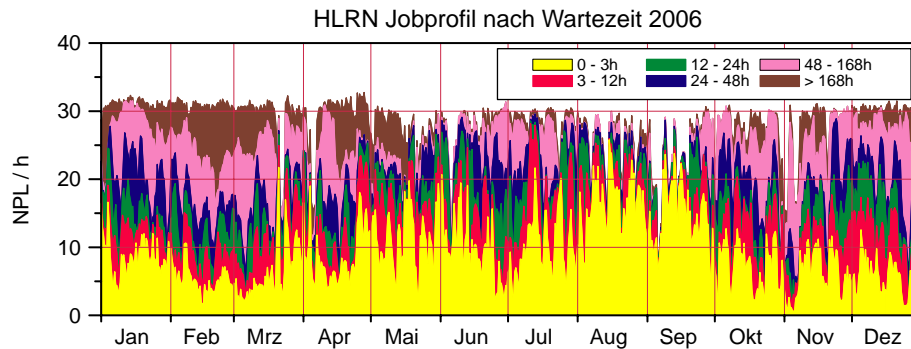


ABBILDUNG 4.2: Wartezeiten bis zum Beginn der Jobausführung

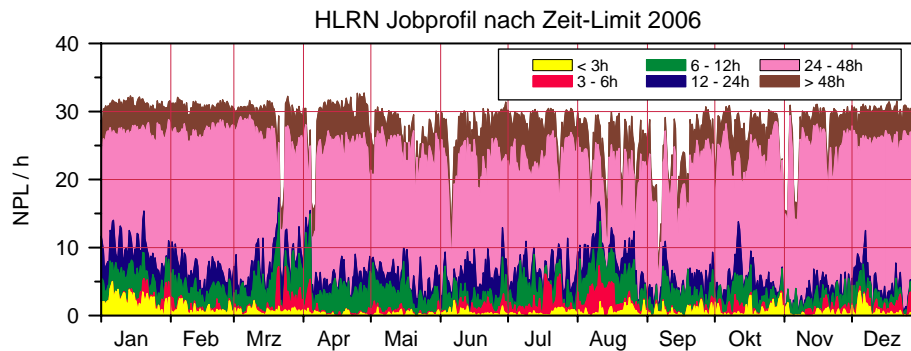


ABBILDUNG 4.3: Nutzung nach der angeforderten Ausführungszeit

Während des Berichtszeitraums haben Mitarbeiter des ZIB in Berlin wieder einen gut besuchten Ausbildungskurs „Parallele Programmierung mit MPI und OpenMP“ durchgeführt. 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 (voraussichtlich bis Mitte 2008) beibehalten.

### Software-Ausstattung

Einen Überblick über die Software-Ausstattung des Hochleistungsrechners verschafft die Tabelle 4.1.

#### 4.1.2 Nachfolgebeschaffung HLRN-II

Supercomputer der höchsten Leistungsklasse gelten bereits nach wenigen Jahren Betriebszeit als veraltet und können sowohl aus Leistungs- als auch Kapazitätsgründen nicht mehr im ursprünglich vorgesehenen Sinne für anspruchsvolle wissenschaftliche Anwendungen eingesetzt werden. Die zuständigen Gremien des HLRN-Verbunds – der Verwaltungsrat und die Technische Kommission – haben sich daher bereits sehr frühzeitig verständigt, den vorhandenen HLRN-I-Rechner durch ein leistungsfähigeres System (HLRN-II) zu ersetzen. Die Anträge

Betriebssystem	AIX 5.2
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
Ingenieurwissen-schaften	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

zur Beschaffung des Nachfolgesystems wurden in den Jahren 2005 bzw. Anfang 2006 vom Wissenschaftsrat und der Deutschen Forschungsgemeinschaft positiv bewertet.

Nachdem sich die Beschaffung wegen der durch die Föderalismusreform zunächst unklaren Finanzlage um nahezu ein Jahr verzögert hat, konnte das Ausschreibungsverfahren Anfang 2007 beginnen. Die Beschaffung wird im Rahmen eines Verhandlungsverfahrens mit vorgeschalteter öffentlicher Bekanntmachung gemäß VOL/A durchgeführt. Aufgrund der einzuhaltenden Fristen und Zeiträume für die europaweite Bekanntmachung, Angebotsabgabe, Auswahl und Verhandlungen, ist mit dem Betriebsbeginn des neuen HLRN-II-Systems erst Anfang 2008 zu rechnen.

Die Zielvorstellung ist ein System mit einer etwa zehn- bis zwanzigfach höheren Rechenleistung (in zwei Ausbaustufen) und entsprechender Hauptspeicher- und Plattenspeicherkapazität. Das bewährte Konzept der symmetrisch ausgestatteten Standorte am ZIB/Berlin und RRZN/Hannover soll beibehalten werden.

### 4.1.3 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

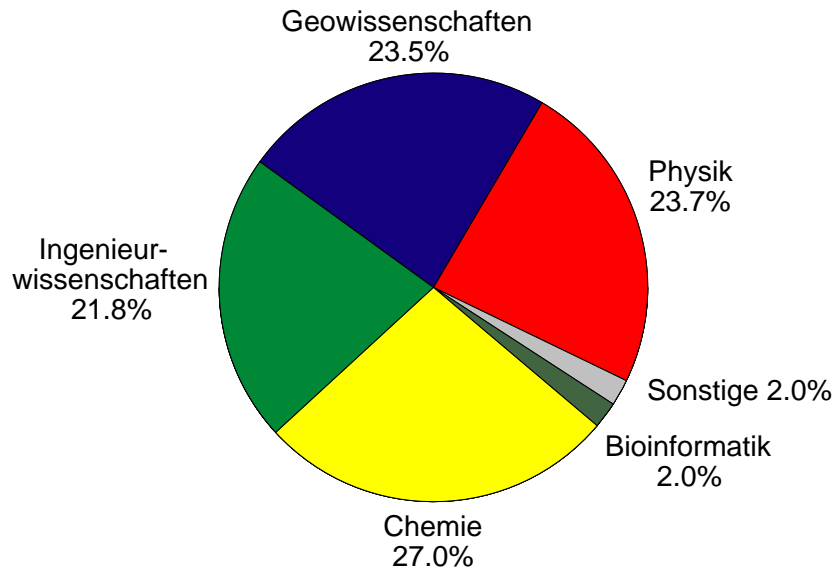


ABBILDUNG 4.4: Nutzung des HLRN-Systems im Jahr 2006 nach Fachgebieten

Das HLRN-System wurde im Berichtszeitraum von 76 Großprojekten insbesondere aus den Fachgebieten Ingenieurwissenschaften, Physik, Chemie sowie Geowissenschaften (insbesondere Meeres- und Umweltforschung) genutzt. Die Anteile der Fachgebiete an der insgesamt abgegebenen Leistung sind in Abbildung 4.4 aufgeführt. Im Berichtszeitraum neu hinzugekommen sind Projekte, die dem Fachgebiet Bioinformatik zuzurechnen sind. In der Erprobungs- und Vorbereitungsphase befinden sich auch Projekte aus bisher nicht vertretenen Fachgebieten wie Elektrotechnik, Humanmedizin und Wirtschaftsinformatik. Der Gesamtbedarf übersteigt die vorhandene Rechenkapazität um ein Vielfaches. Das Antragsvolumen beträgt regelmäßig das Dreifache der verfügbaren Kapazität.

Die folgenden zehn größten Projekte haben auf dem HLRN-Rechner in den Quartalen 1/2006 bis 4/2006 insgesamt ca. 91.000 NPL<sup>3</sup> in Anspruch genommen; das sind ca. 39 % der gesamten im betreffenden Zeitraum verbrauchten Rechenkapazität:

- Chemie: *Globale Geometrieoptimierung atomarer und molekularer Cluster*, Christian-Albrechts-Universität Kiel, 11032 NPL.
- Chemie: *Structure and properties of silica supported vanadia catalysts*, Humboldt-Universität zu Berlin, 10257 NPL.
- Chemie: *Modelling relevant systems in heterogeneous catalysis: Metal and oxide aggregates on oxide supports*, Humboldt-Universität zu Berlin, 9760 NPL.
- Geowissenschaften: *Simulation of Past, Present, and Future Climates*, Universität Kiel, 9042 NPL.
- Geowissenschaften: *Auswertung von Spurengasmessungen des Satelliteninstrumentes SCIAMACHY*, Universität Bremen, 8836 NPL.

<sup>3</sup>NPL – Norddeutsche Parallelrechner Leistungseinheit = 32 Prozessoren je Stunde Kalenderzeit.



- Physik: *Simulation von Stern- und Planetenatmosphären mit PHOENIX*, Universität Hamburg, 8813 NPL.
- Technische Wissenschaften: *Axiale Öldurchflussmengen durch Wälzlager verschiedener Bauformen*, Technische Universität Clausthal, 8442 NPL.
- Chemie: *Theoretische Untersuchungen zur Struktur, Energetik und Dynamik heterogener Katalyseprozesse an Zeolithsystemen*, Humboldt-Universität zu Berlin, 8429 NPL.
- Technische Wissenschaften: *Strömungssimulation um ein generisches Kraftfahrzeugmodell mit aktiver Beeinflussung des Ablösegebietes*, Technische Universität Berlin, 8218 NPL.
- Geowissenschaften: *Entwicklung und Validierung von Footprintmodellen für homogenes und inhomogenes Gelände mit Hilfe von hochauflösenden Grobstruktursimulationen*, Universität Hannover, 8061 NPL.

Im Folgenden werden die oben aufgeführten Großprojekte vorgestellt. Die Kurzbeschreibungen sind von den jeweiligen Projektbearbeitern verfasst worden.

### **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.

Optimierungsrechnungen wurden bis zu einer Clustergröße von  $n=105$  Molekülen durchgeführt und Stabilitätstests an Ausschnitten von kubischem und hexagonalem Eis bis zu einer Größe der Ausschnitte von 130 Molekülen ausgedehnt. Die Resultate zeigen, daß Eiskerne innerhalb einer amorphen Außenschicht (siehe Abbildung 4.5) im Größenbereich  $n=70-130$  stabil bleiben. Dabei nimmt die Ausdehnung des Eiskerns mit der Anzahl der Moleküle zu. Im Vergleich mit Clustern aus unvoreingenommener Optimierung entsprechen diese Strukturen energetisch tief liegenden lokalen Minima und können vermutlich sogar mit den globalen Minimalstrukturen konkurrieren.

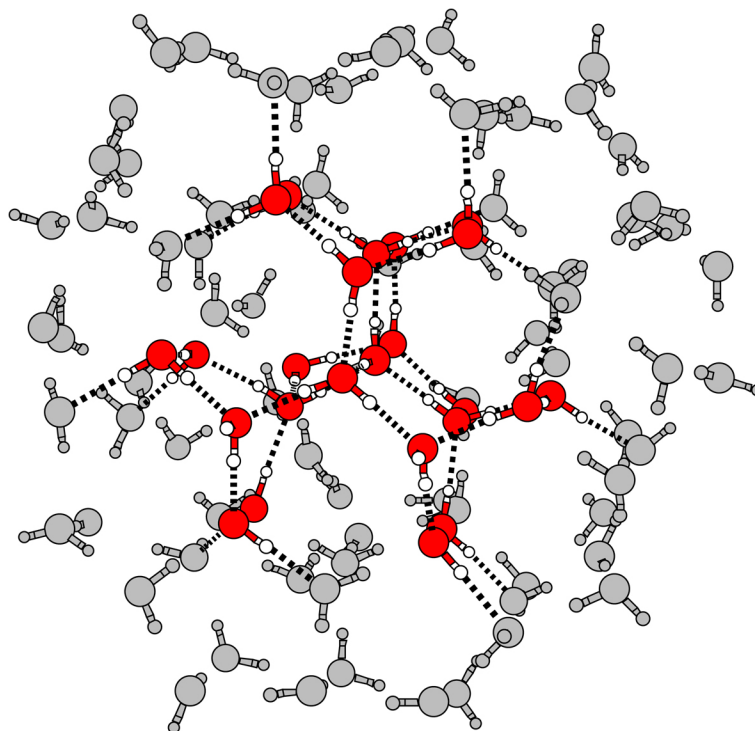


ABBILDUNG 4.5: Schnittbild eines Clusters aus 120 Wassermolekülen mit kristallinem Kern und amorpher Außenhülle.

## Structure and properties of silica supported vanadia catalysts

**Verantwortliche Wissenschaftler:** M. Sierka, HU Berlin

Preparation of well-defined oxide nanostructures, such as thin films and clusters, on metal substrates under controlled conditions is very important for an understanding of fundamental aspects of metal/oxide interaction.

These materials find applications in advanced technologies and as model systems for heterogeneous catalysis. Silica ( $\text{SiO}_2$ ) remains one of the most widely used oxides in catalysis and advanced materials. Successful preparation of a crystalline silica film on a Mo(112) substrate under UHV conditions was reported first by Schroeder et al.<sup>4</sup>. However, despite extensive experimental and theoretical studies the detailed atomic structure of the film remained unknown until recently.

Combining density functional calculations performed at HLRN and new high-quality experimental data we have demonstrated that the film consists of a monolayer of a two-dimensional (2D) network of corner sharing  $[\text{SiO}_4]$  tetrahedra<sup>5</sup>. Recently, formation of silica structures with even more reduced dimensionality (1D) on the Mo(112) surface has been observed at low Si coverage<sup>6</sup>. DFT calculations have shown that these 1D stripes consist of paired rows

<sup>4</sup>T. Schroeder, M. Adelt, B. Richter, M. Naschitzki, M. Bäumer, H.-J. Freund, Surf. Rev. Lett. 7 (2000) 7.

<sup>5</sup>J. Weissenrieder, S. Kaya, J.-L. Lu, H.-J. Gao, S. Shaikhutdinov, H.-J. Freund, M. Sierka, T. K. Todorova, J. Sauer, Phys. Rev. Lett., 95 (2005) 076103.

<sup>6</sup>J.-L. Lu, S. Kaya, J. Weissenrieder, T. K. Todorova, M. Sierka, J. Sauer, H.-J. Gao, S. Shaikhutdinov,

of corner sharing  $[\text{SiO}_4]$  tetrahedra chemisorbed on the metal substrate. At increasing Si coverage, islands of the 2D film and stripes are found to coexist.

Figure 4.6 shows the calculated phase diagram that compiles the most favorable 1D and 2D crystalline silica structures at a given set of silicon and oxygen chemical potentials. At elevated oxygen pressures the calculations predict formation of a new, previously not considered structure of the 2D silica film, the existence of which has been confirmed by infrared reflection spectroscopy and X-ray photoelectron spectroscopy<sup>7</sup>.

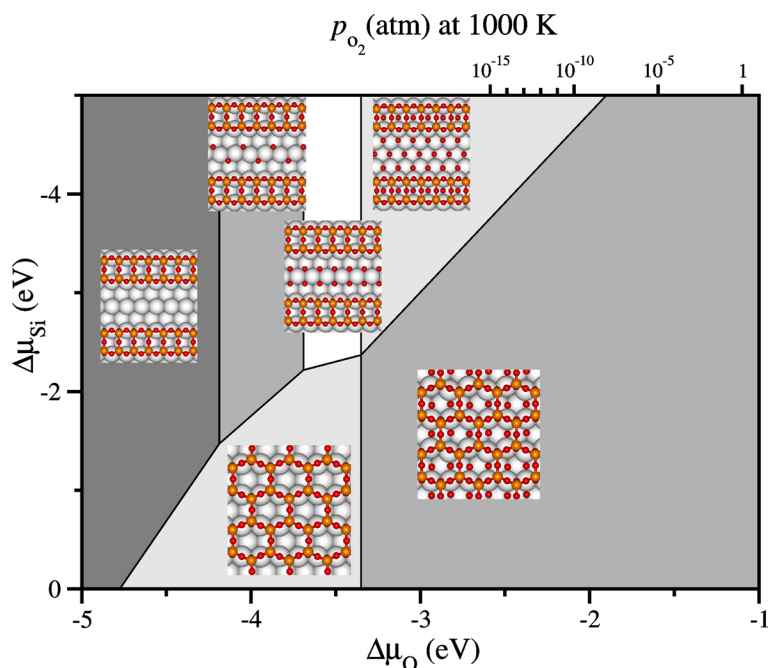


ABBILDUNG 4.6: (Color online) Calculated phase diagram of the  $(\text{SiO}_2)/\text{Mo}(112)$  system for different values of silicon ( $\Delta\mu_{\text{Si}}$ ) and oxygen ( $\Delta\mu_{\text{O}}$ ) chemical potentials.  $\Delta\mu_{\text{O}}$  has been translated into a pressure scale at 1000 K. Si, O, and Mo are represented as orange, red, and grey spheres, respectively.

### Modelling relevant systems in heterogeneous catalysis: Metal and oxide aggregates on oxide supports

**Verantwortliche Wissenschaftler:** M. V. Ganduglia-Pirovano, HU Berlin

As the material and pressure gaps between real catalysis and traditional surface science are narrowing, experiments and modelling that straddle both sides of the gap appear essential for the understanding of heterogeneous catalysis and the rational design of catalysts. Producing well defined model systems that reproduce practical supported oxide catalysts, such as vanadia, is challenging because of the complexity of the real systems (e.g. possible multiple oxidation states, variable local coordination, etc). Moreover, the catalytic performance in oxidation catalysis that is related to the surface reducibility, depends on the specific support.

H.-J. Freund, Surf. Sci. Lett., 600 (2006) L164.

<sup>7</sup>M. Sierka, T.K. Todorova, S. Kaya, D. Stacchiola, J. Weissenrieder, J.-L. Lu, H.-J. Gao, S. Shaikhutdinov, H.-J. Freund, Chem. Phys. Lett., 424 (2006) 115.

We combine quantum mechanical calculations with statistical thermodynamics to identify the stable model supported catalysts under relevant conditions (varying temperature, oxygen and water partial pressure and vanadium activity, see. Fig. 4.7). Calculations are performed using the VASP simulation package. The simulation of core-level shifts, vibrational spectra and scanning tunnelling spectroscopy images allow the interpretation of experimental data, and the validation of the 'in-situ' theoretical modelling. Our ultimate goal is the determination of the detailed reaction paths connecting reactants and products of elementary reaction steps of important reactions, and the elucidation of the effect of the support.

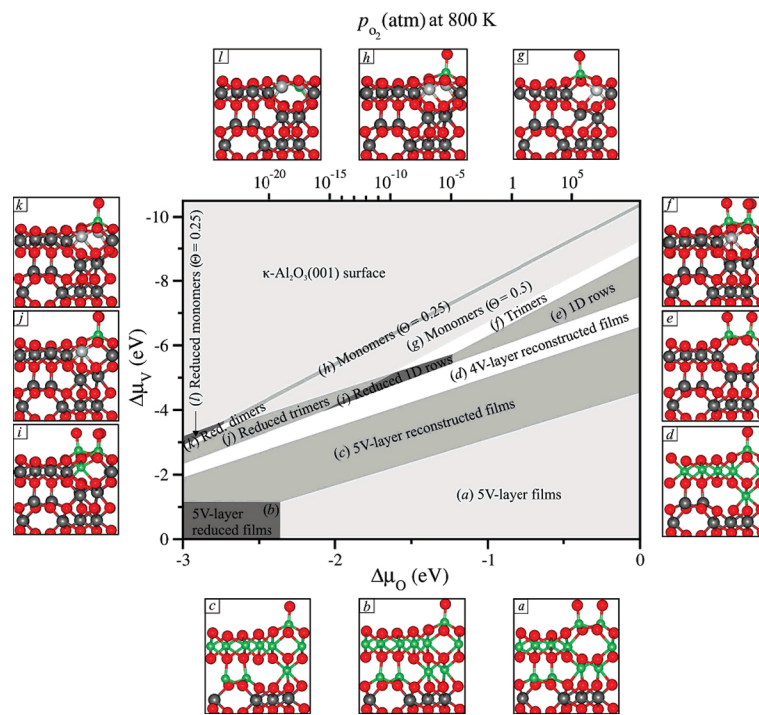


ABBILDUNG 4.7: Phase diagram as a function of the  $\Delta\mu_{\text{O}}$  and  $\Delta\mu_{\text{V}}$  chemical potentials for vanadia aggregates supported on the  $\kappa\text{-Al}_2\text{O}_3(001)$  surface.  $\Delta\mu_{\text{O}}$  is translated into a pressure scale at  $T = 800$  K.

### 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 4.8).

ENSEMBLES (EU): Among its goals is the development of a multi-model prediction system for seasonal to decadal time scales. Our participation involves the performance of decadal

retrospective forecasts and to study the predictability on decadal timescales in the North-Atlantic-European sector.

**MOTIF (EU):** This project proposes a coordinated approach to use past states of the climate system as a demanding test of the capabilities and reliability of the latest generation of coupled ocean-atmosphere-vegetation general circulation models. Estimates of the climate at 6 ka and 21 ka using the ECHAM5/MPI-OM1 model coupled to a vegetation model will be produced.

**DYNAMITE (EU):** This project is on understanding the dynamics of the coupled climate system. Under this project we will perform atmospheric timeslice experiments at high (T106) resolution for present and future climate conditions.

**SFB-460:** Investigation of mechanisms of natural variability in the North-Atlantic-European sector with uncoupled and coupled simulations.

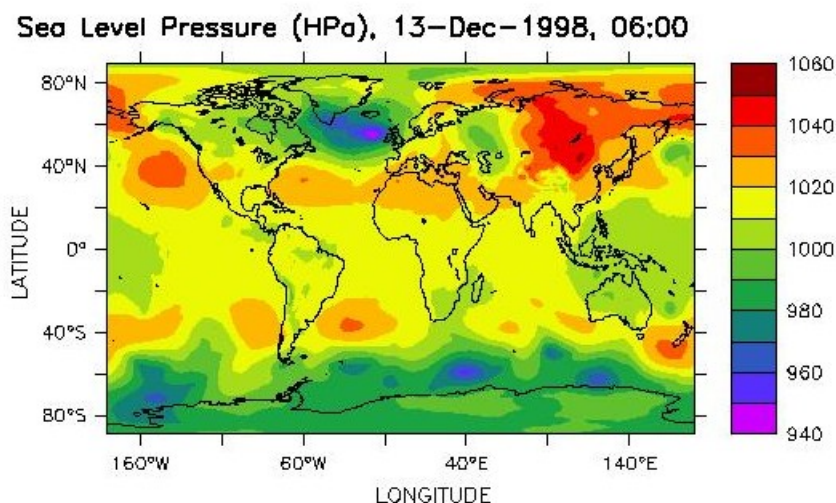


ABBILDUNG 4.8: Sea level pressure anomalies for a day in boreal winter 1998, with a strong low pressure system developing in the Atlantic.

### 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>8</sup>), welches weltweit erstmals weltraumgestützt die Erdatmosphäre abwechselnd in Limb- und in Nadir-Geometrie abtastet<sup>9</sup>. Diese technische Besonderheit wurde mit dem Ziel implementiert, die Höhenauflösung und Verteilung verschiedener Spurengase zu bestimmen (auch in der Troposphäre), welche für eine ganze Reihe wissenschaftlicher Fragestellungen von besonderer Bedeutung

<sup>8</sup><http://www.sciamachy.de>

<sup>9</sup> <http://www.iup.physik.uni-bremen.de/sciamachy/publication.html>

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.

Bis bis zum heutigen Zeitpunkt sind noch keine offiziellen Profilprodukte von den Agenturen freigegeben worden. Es wird nicht erwartet, da diese im gegenwärtigen Projektzeitraum freigegeben 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.

### **Simulation von Stern- und Planetenatmosphären mit PHOENIX**

**Verantwortlicher Wissenschaftler:** Peter Hauschildt, Hamburger Sternwarte

Wir berechnen hoch detaillierte Modelle von Stern- und Planetenatmosphären mit unseren State-of-the-art-Programmpaket PHOENIX. Unsere Modelle von extrasolaren Gasplaneten (EGP) sind weltweit führend und beinhalten nicht nur die Effekte von Staubbildung und Millionen von Moleküllinien auf die Struktur der Planetenatmosphäre sondern auch Effekte wie externe Beleuchtung durch den Elternstern des Planeten. Mit diesen Modellen können wir sowohl beobachtete Spektren analysieren als auch Vorhersagen machen, die z. B. zu verbesserten Beobachtungs- und Detektionsstrategien für EGP führen. Des Weiteren wollen wir unsere Modelle von Sternatmosphären, die für praktisch alle vorkommenden Sterntypen gültig sind, weiter verbessern und ausbauen. Dabei werden sowohl detaillierte Analysen also auch Modellgitter verwendet. Zur Zeit berechnen wir z. B. Modellgitter zur Unterstützung des Instrumentendesigns des GAIA-Satelliten, einer ESA-Mission die ca. 2010 gestartet werden soll.

Weiterhin haben wir neue Algorithmen zur Lösung von 3D-Strahlungstransport-Problemen entwickelt und implementiert. Dabei handelt es sich um ein 6D-Problem (drei Raumdimensionen, zwei Richtungsdimensionen, eine Energiedimension) das extrem hohe Hauptspeicher- und Rechenzeit-Anforderungen hat. Wir haben ein hochgradig parallelisiertes Framework entwickelt, das auf dem HLRN-System mit mindestens 128 CPUs läuft. Es ist geplant, dieses Framework im PHOENIX einzubinden.

Das PHOENIX-Team hat sein Hauptquartier in Hamburg und besteht zusätzlich aus internationalen Mitarbeitern in Frankreich (Lyon) und den USA (Oklahoma, Harvard, Arizona). Das Programmpaket besteht aus ca. 950.000 Zeilen Code (Fortran 95, C++ und C) ist voll parallelisiert (MPI) und läuft auf IBM-pSeries-Maschinen sehr effizient.

### **Axiale Öldurchflussmengen durch Wälzlager verschiedener Bauformen**

**Verantwortliche Wissenschaftler:** H. Schwarze, Technische Universität Clausthal

Der Ölversorgung von Wälzlagern kommt eine besondere Bedeutung zu. Sie ist einerseits wichtig für eine ausreichende Kühlung des Wälzlagers, sorgt andererseits aber auch für die Abfuhr von Verschleiß- und Fremdpartikeln. Eine Überversorgung mit Schmierstoff führt zu hohen Reibverlusten, eine Unterversorgung hingegen zu erhöhten Temperaturen und somit erhöhtem Verschleiß im Lager. Aus diesem Grund ist es günstig, Wälzlager nur mit so viel Öl zu versorgen, dass sie gerade die für den momentanen Betriebszustand ausreichende Menge erhalten.

Werden z. B. zwei Lager in einer Kombination hintereinander auf einer Welle angeordnet, erfolgt die Ölversorgung häufig von einer Öltasche aus. Das zuerst versorgte Lager bestimmt den Ölvolumenstrom für das zweite Lager. Bei einer mittig zwischen den Lagern angeordneten Öltasche kann es, bedingt durch eine von der Lagerbauform abhängige, ungleiche Aufteilung der Durchflussmengen, zu einer Mangelversorgung an einem der Lager kommen.

Ziel des vorliegenden Projektes ist eine umfassende simulationstechnische Beschreibung der strömungsmechanischen Eigenschaften von Wälzlagern bestimmter Bauformen. Auf theoretischer Grundlage sollen Berechnungsmethoden für den axialen Öldurchfluss durch unterschiedliche Wälzlager entwickelt werden. Dabei sollen Einflussfaktoren wie Geometrie- und Betriebsparameter berücksichtigt werden. Mit Hilfe eines solchen Berechnungsmodells ist es möglich, eine den Einflussparametern entsprechende bedarfsgerechte Schmierung rechnerisch zu ermitteln. Das so erarbeitete Modell wird über Versuche an einem zu erstellenden Prüfstand verifiziert.

### **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 4.9). Bei dieser Elementarreaktion steht die Frage, welches der denkbaren Produkte gebildet wird – ein Oberflächenalkoxid (*tert*-Butoxid, Isobutoxid) oder das *tert*-Butylcarbeniumion?

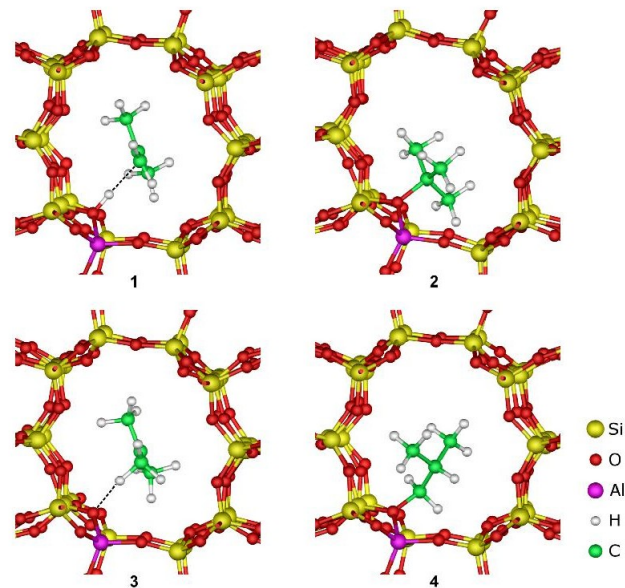


ABBILDUNG 4.9: Berechnete Strukturen für den  $\pi$ -Komplex von Isobuten (1), das *tert*-Butoxid (2), das *tert*-Butylcarbeniumion (3) und das Isobutoxid (4) in einer Pore des Zeoliths Ferrierit.

### Strömungssimulation um ein generisches Kraftfahrzeugmodell mit aktiver Beeinflussung des Ablösegebietes

**Verantwortlicher Wissenschaftler:** F. Thiele, Hermann-Föttinger-Institut für Strömungsmechanik, TU Berlin

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 4.10), 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.



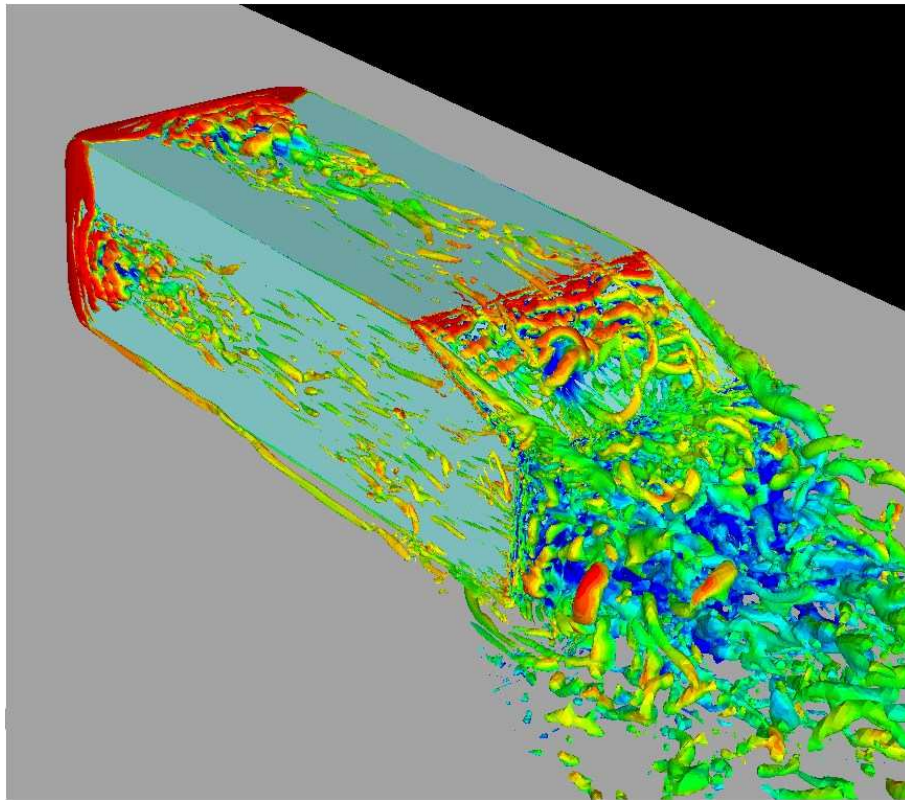


ABBILDUNG 4.10: Wirbelstrukturen in der turbulenten Strömung um das Fahrzeugmodell (Ahmed-Body)

### **Entwicklung und Validierung von Footprintmodellen für homogenes und inhomogenes Gelände mit Hilfe von hochauflösenden Grobstruktursimulationen**

**Verantwortlicher Wissenschaftler:** S. Raasch, Institut für Meteorologie und Klimatologie, Universität Hannover

Footprintmodelle bestimmen den räumlichen Zusammenhang der Messung eines Flusses oder einer Konzentration, indem sie die Transferfunktion zwischen den Quellen und Senken eines Signals und der Position des Messsensors definieren. Sie werden zunehmend zur Planung von Messungen in Feldexperimenten und als Maßnahme zur Qualitätssicherung mikrometeorologischer Messungen eingesetzt. Fragestellungen sind dabei, ob und wann sich die zu untersuchende Unterlage im Footprintbereich des Messkomplexes befindet. Obwohl innerhalb der Mikrometeorologie zunehmend atmosphärische Strömungen über komplexem Gelände untersucht werden, ist die Anwendbarkeit der bis heute entwickelten Footprintmodelle im Grunde genommen auf idealisierte Fälle mit horizontal homogenen Flussbedingungen beschränkt, was sich aus den in den Modellen verwendeten Annahmen und Vereinfachungen ergibt. Mangels Alternativen kommen diese Footprintmodelle jedoch auch bei nicht-homogenen Strömungsbedingungen zum Einsatz, so dass die erhaltenen Footprints allenfalls grobe Abschätzungen der wahren Verhältnisse darstellen und ihre Aussagekraft somit bezweifelt werden muss.

Dieses Projekt zielt auf die Entwicklung und Validierung von Methoden ab, mit denen Footprints über thermisch und aerodynamisch heterogenen Oberflächen bestimmt werden können, wobei die thermische Schichtung der untersuchten Strömung in einem sehr weiten Bereich von stabil bis labil liegen darf. Dazu soll in das seit 1997 am Institut für Meteorologie und Klimatologie fortlaufend weiterentwickelte Grobstruktursimulationsmodell PALM ein im Vorwärtsmodus betriebenes Lagrangesches Partikel-Dispersionsmodell integriert werden, um direkt aus den vom Grobstruktursimulationsmodell auf dem Massivparallelrechner des HLRN berechneten Feldern der aufgelösten Geschwindigkeiten und der subskaligen turbulenten kinetischen Energie die Verlagerung einer endlichen Anzahl voneinander unabhängiger Partikel in der untersuchten Strömung und damit letztlich Footprints bestimmen zu können.

Darüber hinaus sollen die vom Grobstruktursimulationsmodell generierten Daten zur Entwicklung und Validierung von verbesserten Parametrisierungen, die auch die Turbulenz in Gegenwart von Inhomogenitäten richtig beschreiben, zum Gebrauch in herkömmlichen Lagrangeschen Footprintmodellen, die später bei einer Messkampagne vor Ort auf einem gewöhnlichen PC eingesetzt werden können sollen, verwendet werden. Die Verwendung von Daten aus Grobstruktursimulationen zur Entwicklung von Parametrisierungen bietet sich dabei an, weil bisher kaum Daten aus Feldexperimenten in inhomogenem Gelände mit der hier benötigten hohen räumlichen und zeitlichen Auflösung vorliegen. Zur abschließenden Einordnung der mit dem Grobstruktursimulationsmodell und mit dem Lagrangeschen Footprintmodell erhaltenen Footprints soll schließlich für einige der wenigen Fälle, in denen bereits entsprechende Daten aus Feldexperimenten vorliegen und zu denen die mit uns kooperierende Arbeitsgruppe von der Universität Bayreuth Zugang hat, eine Validierung der Modellergebnisse anhand der Daten aus diesen Experimenten erfolgen.

## 4.2 Fachberatung

Das vor vielen Jahren am ZIB eingeführte Konzept der HPC-Fachberatung hat sich auch im Berichtszeitraum uneingeschränkt bewährt. Jedem vom Wissenschaftlichen Ausschuss empfohlenen Projekt ist ein Fachberater des HLRN zugeordnet; die Fachberater des ZIB sind in Tabelle 4.2 aufgeführt.

<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)
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. Sie geben 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 Softwarehersteller 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 läuft stabil, es befindet sich allerdings 2007 technologisch im sechsten Jahr und damit am Ende seiner Lebenszeit. Problematisch bleibt für alle arbeitswilligen Projekte die starke Auslastung und die stets weiter wachsende Konkurrenz um die verfügbaren Ressourcen. Das System ist „zu klein“ geworden und somit für manche Projekte unattraktiv – man wartet auf das HLRN-II-System. Daher setzen einige der Projekte verstärkt auf eigene PC-Cluster als zusätzliche Produktionsumgebung oder sie weichen auf andere Zentren aus. Die Bereitstellung und Unterstützung einer breiten Softwarepalette macht den HLRN aber auch weiterhin für Benutzer und Projekte attraktiv.

Die effektive Betreuungskapazität an den beiden Sitzinstitutionen (ZIB, RRZN) hat sich im vergangenen Jahr durch das altersbedingte Ausscheiden von Mitarbeitern sowohl im Administrations- als auch im Fachberatungsbereich deutlich verringert. Ein beträchtlicher Anteil der Fachberatertätigkeit musste sich daher auf teils sehr systemnahe Themen konzentrieren, zu Lasten der Anwenderunterstützung. 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, das aber wegen der erst Ende 2006 endgültig gesicherten Finanzierung erst im 1. Quartal 2007 in die Ausschreibungsphase gegangen ist.

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.

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

- die weitere Verbesserung und Pflege der technischen Infrastruktur und Nutzung elektronischer Kommunikationsmittel wie z. B. ein web- und datenbank-basiertes Trouble-Ticket-System sowie
- der weitere Ausbau des Dokumentationssystems einschließlich der notwendigen Web-server.

#### 4.2.1 Chemie und Bioinformatik

Die Fachberater für Chemie und Bioinformatik betreuen Nutzer mit den fachliche Schwerpunkten Chemie und Bioinformatik vorrangig aus den Ländern Berlin, Mecklenburg-Vorpommern und Schleswig-Holstein. Da es am Regionalen Rechenzentrum für Niedersachsen seit Mitte 2005 keine korrespondierende Funktion mehr gibt, werden auch Nutzer innerhalb von Großprojekten aus den Ländern Niedersachsen und Hamburg betreut.

Großprojekte aus den Fachgebieten Chemie und Bioinformatik hatten im Berichtszeitraum einen Anteil von 29 % an der vom HLRN-System in 2006 abgegebenen Leistung (s. Abbildung 4.4). Der Anteil der Chemie an der Nutzung des HLRN-Systems allein ist mit 27 % im Vergleich zum Vorjahr konstant hoch und zeigt, dass das HLRN-System ein wesentliches Arbeitsmittel der Chemiker in Norddeutschland ist. Im Berichtszeitraum sind neu hinzugekommen Projekte aus dem Fachgebiet Bioinformatik, wie zum Beispiel ein Projekt der Fachhochschule Stralsund zur Simulation der Zellkern-Struktur Chromatin und der DNA.

Die Mehrheit der Nutzer aus dem Bereich Chemie macht von den im HLRN angebotenen kommerziellen Softwarepaketen Gaussian03 und TURBOMOLE Gebrauch. Der überwiegende Anteil der abgegebenen Leistung kommt allerdings durch die Nutzung massiv-paralleler Software wie VASP, CPMD und NAMD durch wenige Großprojekte zustande, die zu den größten am HLRN gehören (s. Abschnitt 4.1.3).

Der Fachberater Chemie 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 23,5 % 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 HLRN durch Großprojekte aus dem ingenieurwissenschaftlichen Bereich hat von rund 19 % in Jahr 2005 auf rund 22 % im Berichtsjahr weiter zugenommen.

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* ist auch in diesem Berichtszeitraum hoch.

Wissenschaftlich arbeitet der Fachberater eng mit der Arbeitsgruppe von Frank Thiele (Hermann-Föttinger-Institut der TU Berlin) 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>10</sup> der TU Berlin.

Im Ausbildungsbereich werden Kurse (MPI/OpenMP-Kurs, auch im Bereich des HLRN) und Vorlesungen an der TU Berlin (Spezialthemen aus dem Bereich der Informations- und Kommunikationstechnik im Ingenieurwesen: *Netzwerktechnik* und *Parallel Computing*) vom Fachberater durchgeführt.

### 4.2.4 Physik

Der von Physikprojekten im HLRN abgenommene Rechenzeitanteil beträgt im Berichtsjahr 23,7 % und ist damit im Vergleich zum Vorjahr konstant geblieben.

In der Weiterbildung der Nutzer wurde der integrierte Kurs „Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP“ durchgeführt. An der Humboldt-Universität wurde vom Fachberater im Wintersemester 2006/07 die Vorlesung „Hochleistungsrechnen für Naturwissenschaftler“ gehalten.

---

<sup>10</sup><http://www.tu-berlin.de/fst/>

Wissenschaftlich arbeitet der Fachberater auf dem Gebiet der Gitterfeldtheorie mit den Gruppen von Prof. Müller-Preußker (HU Berlin) und Prof. Gerrit Schierholz (DESY Zeuthen) zusammen. Das Schwergewicht liegt auf der Weiterentwicklung des vom Fachberater geschriebenen Simulationsprogramms BQCD.

Ein weiteres Tätigkeitsfeld des Fachberaters war die Mitarbeit bei der Vorbereitung der Nachfolgebeschaffung HLRN-II.

### 4.3 Das Berliner Wissenschaftsnetzwerk BRAIN

**Bearbeitet von:** Hubert Busch, Marek Fröhlich, Ursula Droebe

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

**Förderung:** Institut für Wissenschaftliche Information Osnabrück, BMBF

Seit 1994 wird das Berliner Wissenschaftsnetz BRAIN<sup>11</sup> von den Hochschulen, Forschungsinstituten und Bildungseinrichtungen sowie anderen öffentlichen Einrichtungen in Berlin als Hochgeschwindigkeitsdatennetz genutzt. Zentrales Planungs- und Steuerungsorgan für BRAIN ist die von der Senatsverwaltung für Bildung, Wissenschaft und Forschung (vormals 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

Die technische Grundlage von BRAIN ist das LWL<sup>12</sup>-Netz des Landes Berlin, welches vom IT-Dienstleistungszentrum Berlin (ITDZ<sup>13</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, ein Kontingent von insgesamt 2500 km Faserstrecke ist hiervon 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. 2006 erfolgte der Lückenschluss Karlshorst – Oberschöneweide – Adlershof im Rahmen des Umzugs der FHTW nach Oberschöneweide sowie der Anschluss des Campus Berlin Buch. Es wurden folgende weitere Baumaßnahmen abgeschlossen:

- Fachhochschule für Wirtschaft Berlin (FHW): Neue Bahnhofstraße
- Stiftung Preußische Schlösser und Gärten (SPSG): Schloß Charlottenburg
- Technische Fachhochschule Berlin (TFH): Seestraße

<sup>11</sup>BRAIN – Berlin Research Area Information Network

<sup>12</sup>LWL – Lichtwellenleiter

<sup>13</sup>ITDZ, ehemals LIT – Landesbetrieb für Informationstechnik



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 in Gigabit-Ethernet-Technik mit zentralem Netzwerkmanagement
- BRAIN-ATM: Betrieb eines Metro-Netzes in ATM-Technik
- Betrieb des regionalen WiN<sup>14</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
- Bereitstellung von Glasfasern zur internen Vernetzung der in der Stadt verteilten Standorte einzelner Einrichtungen
- BRAIN-WDM: Bereitstellung dedizierter Bandbreiten über die eigene WDM<sup>15</sup>-Infrastruktur für den Transport beliebiger Protokolle

<sup>14</sup>WiN – Wissenschaftsnetz des Vereins zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes

<sup>15</sup>WDM-Wavelength-Division-Multiplexing – Laserlicht unterschiedlicher Wellenlängen wird benutzt, um

- Zugang zum Berliner Landesnetz über eine dedizierte LWL-Verbindung zum ITDZ; dies erlaubt den Verwaltungen der wissenschaftlichen Einrichtungen, direkt auf die Formularserver 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 jedes Jahr neu ermittelt, wobei auch der Anteil der Grundfinanzierung für die Einrichtung durch das Land Berlin berücksichtigt wird.

### BRAIN-GE – Berliner Gigabit-Ethernet-Verbund

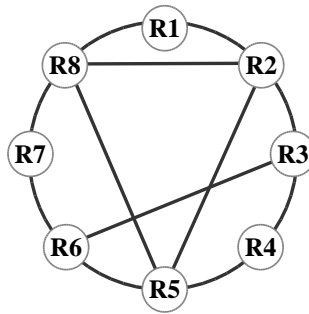


ABBILDUNG 4.12: BRAIN-GE-Verbundnetz: R1..R8 = Layer2/Layer3-Router

Das BRAIN-GE-Verbundnetz verbindet 48 Standorte von 21 Einrichtungen über acht in Berlin verteilte Netzknoten (Abbildung 4.12) über Gigabit-Ethernet miteinander und wird zentral gemanagt. Die Ringstruktur sowie die zusätzlichen Querverbindungen sorgen für Redundanz im Verbundnetz. Dadurch sind Unterbrechungen einzelner Backbone-Verbindungen (z. B. durch Leitungsschaden) für den Nutzer nicht spürbar. Als Transportprotokoll im Backbone wird MPLS<sup>16</sup> eingesetzt.

Im Rahmen ihrer Anbindung wird für jede Einrichtung ein eigenes Layer2-VPN<sup>17</sup> aufgespannt, welches die entfernten Standorte einer Einrichtung zu einem von den Teilnehmern selbständig gemanagten LAN verbindet. Ein Layer2-VPN separiert die Datenströme der Einrichtungen auf der untersten Protokollebene, unabhängig von eventuell konfigurierbaren VLAN<sup>18</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 bestehen-

gleichzeitig mehrere Kommunikationskanäle (Wellenkanäle) über eine Glasfaser zu übertragen

<sup>16</sup>MPLS – Multiprotokoll-Label-Switching, RFC 3031, RFC 3032

<sup>17</sup>VPN – Virtual-Private-Network

<sup>18</sup>VLAN – Virtual-LAN, Layer2-Broadcast-Domäne



den Verbindungen in ca. 50–100 ms auf die Backup-Tunnel geschwenkt (Fast-ReRoute) – die laufenden Anwendungen der Einrichtung werden nicht unterbrochen.

Zum Ende des Berichtsjahres waren 21 Einrichtungen mit 49 Standorten am Gigabit-Ethernet-Backbone angeschlossen.

(ausführliche Liste: <http://www.brain.de/Verbundnetz/Brain-GE/Standorte>)

### **BRAIN-WDM – CWDM-Technik für das BRAIN-Leitungsnetz**

BRAIN setzt derzeit auf sechs Strecken WDM-Technik für den Transport von Gigabit-Ethernet, Fast-Ethernet, ATM und SDH ein. Bei den aktiven Komponenten handelt es sich um Geräte der Serie TS1100 des schwedischen Herstellers Transmode. Die Geräte, die zentral von BRAIN betrieben werden, multiplexen protokolltransparent beliebige Anwendungen über eine einzelne LWL. Auf diese Weise wurden Engpässe im Glasfasernetz behoben und Glasfaser-Strecken eingespart. Der modulare Aufbau der Geräte ermöglicht künftige Erweiterungen. Im derzeitigen Ausbau können pro Wellenlänge Bandbreiten bis zu 2,5 Gbit/s übertragen werden. Anstatt eine Wellenlänge nur für eine Anwendung zu nutzen, lassen sich mit Hilfe von TDM<sup>19</sup>-Modulen mehrere Anwendungen über eine Wellenlänge übertragen. Die Daten der unterschiedlichen Anwendungen werden zeitlich versetzt auf die Trägerwelle (entspricht einem 2,5 Gbit/s optischen Kanal) moduliert. Beispielsweise werden auf einer Strecke mit Hilfe eines TDM-Moduls zwei Fast-Ethernet-Kanäle und zwei STM1-Kanäle innerhalb einer Wellenlänge über eine Faser übertragen. Das Management der Geräte erfolgt vollständig über eine einfach gehaltene Web-Schnittstelle und über SNMP<sup>20</sup> und ist daher mit allen aktuellen Betriebssystemen möglich. Ein dedizierter Server mit proprietärer Steuer-Software ist nicht notwendig. Im BRAIN werden derzeit mit WDM-Technik Strecken in einer Gesamtlänge von 137 km Einzelfaser betrieben. Würde stattdessen für jede der im WDM-Kernnetz transportierten Anwendungen eine separate Doppelfaser geschaltet werden, ergäbe sich eine Gesamtlänge von 500 km Einzelfaser, dies entspricht einer Ersparnis von 73 %.

### **Zentrales Management**

Das Management der Netzwerkkomponenten und der CWDM-Geräte erfolgt zentral durch das BRAIN-NOC<sup>21</sup>. Dies umfasst die Installation, Konfiguration, Inbetriebnahme und Überwachung aller aktiven und passiven Komponenten. Im Störfall erfolgt auch die Fehleranalyse und ggf. Fehlerbehebung durch das BRAIN-NOC. Für die Überwachung der Systeme wurde ein Nagios-Server<sup>22</sup> eingerichtet. Dieser kann auf bestimmte Ereignisse (Alarmer, Traps, Über-/Unterschreiten von Schwellwerten etc.) mit dem Versand von E-Mails oder SMS an einzelne Administratoren oder Gruppen von Administratoren zu individuell konfigurierbaren Zeiten reagieren. Eine webbasierte Oberfläche bietet berechtigten Nutzergruppen detaillierte Statusansichten aller zu überwachenden Komponenten. Das System ist modular aufgebaut und wird durch Erweiterungen (Plugins) den Änderungen der BRAIN-Infrastruktur zeitnah angepasst. Darüber hinaus erfolgt die grafische Aufbereitung der Netzauslastung mit MRTG<sup>23</sup>

<sup>19</sup>TDM, Time Division Multiplexing, Zeitmultiplexverfahren – die Übertragung der Daten verschiedener Anwendungen erfolgt zeitlich versetzt innerhalb eines Datenkanals.

<sup>20</sup>SNMP – Simple Network Management Protocol

<sup>21</sup>NOC – Network Operation Center

<sup>22</sup>[www.nagios.org](http://www.nagios.org)

<sup>23</sup>MRTG – Multi Router Traffic Grapher, einem einfach zu bedienenden Werkzeug zur grafischen Darstellung von Verkehrsflüssen, z. B. in Routern, <http://oss.oetiker.ch/mrtg/>

(Abbildung 4.13). Der aktuelle Status des BRAIN-GE-Verbundnetzes kann über eine Webschnittstelle (<http://www.brain.de/netzstatus>) mit allen gängigen Web-Browsern von überall eingesehen werden.

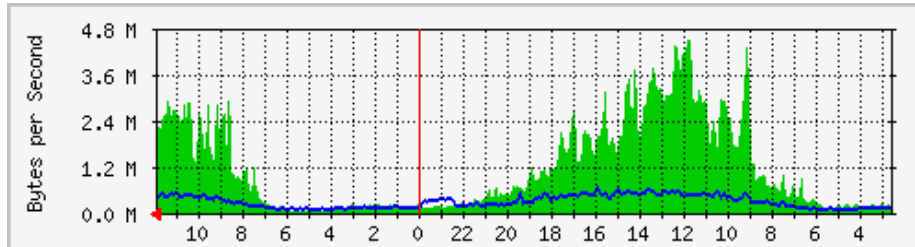


ABBILDUNG 4.13: Darstellung der Netzauslastung mit MRTG

### Ausblick

Im Jahr 2007 werden weitere Einrichtungen mit deren Standorten an den BRAIN-GE-Backbone angeschlossen. Die Möglichkeit zur Erhöhung der Redundanz innerhalb des Kabelnetzes bzw. die Anbindung von Standorten in noch nicht per LWL erschlossenen Lagen wird geprüft. Dienste, die für die BRAIN-Community einen Mehrwert darstellen und über die BRAIN-Infrastruktur etabliert werden können, werden evaluiert und deren Umsetzung angestrebt. Zusätzlich zum BRAIN-IP-Verbundnetz wird ein BRAIN-SAN-Pilotprojekt<sup>24</sup> durchgeführt, um Möglichkeiten einer verteilten Datenhaltung der Berliner Hochschulen und wissenschaftlichen Einrichtungen zu schaffen.

Weitere Informationen zu BRAIN unter <http://www.brain.de>.

<sup>24</sup>SAN – Speichernetzwerk, in dem Fileserver und andere Server entfernt angebotene Speicherkapazität (Festplatten, Magnetbänder) nutzen können.

## 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

#### Artur Andrzejak

- Multiagent and Grid Systems – An International Journal, IOS Press, Amsterdam, Niederlande

#### Peter Deuffhard

- Journal of Computational Mathematics, Science Press, Peking, 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

#### 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, New York, USA

### Hans-Christian Hege

- Book series „Visualization and Mathematics“, Springer, Berlin, Heidelberg, New York
- Video series „VideoMATH“, Springer, Berlin, Heidelberg, New York

### Alexander Reinefeld

- Future Generation Computer Systems (FGCS), Elsevier Science, Niederlande
- International Journal of Grid and Utility Computing (IJGUC), Inderscience Publishers, Olney, Vereinigtes Königreich
- Journal of Grid Computing (JoGC), Springer, Berlin, Heidelberg New York

## 5.3 Beiträge in Zeitschriften und Tagungsbänden

1. R. Abiri, Z. Neyman, H.-F. Geerdes und A. Eisenblätter, *Automatic network design, Understanding UMTS Radio Network Modelling, Planning and Automated Optimisation: Theory and Practice* (M. Nawrocki, H. Aghvami und M. Dohler, Hg.), Wiley, 2006.
2. T. Achterberg, M. Grötschel und T. Koch, *Teaching MIP modeling and solving*, ORMS Today **33** (2006), Nr. 6, 14–15.
3. T. Achterberg, T. Koch und A. Martin, *MIPLIB 2003*, OR Lett. **34** (2006), Nr. 4, 1–12.
4. A. Andrzejak, A. Reinefeld, F. Schintke, T. Schütt: *On Adaptability in Grid Systems*, In: *Future Generation Grids*, V. Getov, D. Laforenza, A. Reinefeld (Eds.), pp. 29–46, Springer Science + Business Media Inc., Januar 2006.
5. A. Andrzejak, P. Domingues, L. Moura Silva: *Predicting Machine Availabilities in Desktop Pools*, 2006 IEEE/IFIP Network Operations & Management Symposium (NOMS 2006), Vancouver, Canada, April 2006.
6. A. Andrzejak, S. Graupner, S. Plantikow: *Predicting Resource Demand in Dynamic Utility Computing Environments*, International Conference on Autonomic and Autonomous Systems (ICAS'06), Santa Clara, USA, July 2006.
7. A. Andrzejak, L. Moura Silva: *Deterministic Models of Software Aging and Optimal Rejuvenation Schedules*, CoreGRID TR-0047, November, 2006.
8. D. Baum und H.-C. Hege, *A point-matching based algorithm for 3D surface alignment of drug-sized molecules*, in: M.R. Berthold, R. Glen, and I. Fischer (Hrsg.), *Computational Life Sciences II, Second International Symposium, CompLife 2006*, Cambridge (UK), Sept. 2006, *Lecture Notes in Bioinformatics*, Vol. 4216, Seiten 183–193. Springer, 2006.
9. T. Beitz, R. Laudien, H. G. Löhmannsröben, B. Kallies: *Ion mobility spectrometric investigation of aromatic cations in the gas phase*, J. Phys. Chem. A **110** (2006), 3514–3520.

10. W. Benger, H. Bartsch, H.-C. Hege, H. Kitzler, A. Shumilina und A. Werner, *Visualizing neuronal structures in the human brain via Diffusion Tensor MRI*, Int. Journal of Neuroscience, 116(4):461–514, 2006.
11. W. Benger und H.-C. Hege, *Analysing curved spacetimes with tensor splats*, in: M. Novello and S. Perez-Bergliaffa (Hrsg.), Proceedings of the Tenth Marcel Grossmann Meeting in Theoretical and Experimental General Relativity, Gravitation and Relativistic Field Theories, World Scientific, Vol. 3, Seiten 1619–1624, Singapore, 2006.
12. W. Benger und H.-C. Hege, *Strategies for direct visualization of second-rank tensor fields*, Visualization and Processing of Tensor Fields, Seiten 191–214, 2006.
13. A. Bley, F. Kupzog und A. Zymolka, *Auslegung heterogener Kommunikationsnetze nach Performance und Wirtschaftlichkeit*, Tagungsband 11. Kasseler Symposium Energie-Systemtechnik: Energie und Kommunikation (Institut für Solare Energieversorgungstechnik (ISET) Verein an der Universität Kassel e. V., Hg.), Kassel, 2006, 84–97.
14. H. L. Bodlaender, F. V. Fomin, A. M. C. A. Koster, D. Kratsch und D. M. Thilikos, *On exact algorithms for treewidth*, Proceedings 14th Annual European Symposium on Algorithms, ESA 2006 (Y. Azar und T. Erlebach, Hg.), Lecture Notes in Computer Science, Bd. 4168, Springer Verlag, Berlin Heidelberg, 2006, 672–683.
15. H. L. Bodlaender und A. M. C. A. Koster, *Safe separators for treewidth*, Discrete Math. **306** (2006), Nr. 3, 337–350.
16. H. L. Bodlaender, T. Wolle und A. M. C. A. Koster, *Contraction and treewidth lower bounds*, Journal of Graph Algorithms and Applications **10** (2006), Nr. 1, 5–49.
17. R. Borndörfer, M. Grötschel, S. Lukac, K. Mitusch, T. Schlechte, S. Schultz und A. Tanner, *An auctioning approach to railway slot allocation*, Competition and Regulation in Network Industries **1** (2006), Nr. 2, 163–196.
18. R. Borndörfer, M. Grötschel und M. Pfetsch, *Public transport to the fORE!*, ORMS Today **33** (2006), Nr. 2, 30–40.
19. R. Borndörfer, M. Grötschel und M. Pfetsch, *A column-generation approach to line planning in public transport*, Transport. Sci. **41** (2007), Nr. 1, 123–132.
20. R. Borndörfer, M. Neumann und M. Pfetsch, *Optimal fares for public transport*, Operations Research Proceedings 2005 (H.-D. Haasis, H. Kopfer und J. Schönberger, Hg.), Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2006, 591–596.
21. R. Borndörfer, U. Schelten, T. Schlechte und S. Weider, *A column generation approach to airline crew scheduling*, Operations Research Proceedings 2005 (H.-D. Haasis, H. Kopfer und J. Schönberger, Hg.), Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2006, 343–348.
22. A. Brandt und M. Brandt, *A sample path relation for the sojourn times in G/G/1-PS systems and its applications*, Queueing Syst. **52** (2006), 281–286.
23. S. Burger, R. Klose, A. Schädle, F. Schmidt, and L. Zschiedrich, *Adaptive FEM solver for the computation of electromagnetic eigenmodes in 3D photonic crystal structures*, Scientific Computing in Electrical Engineering (A. M. Anile, G. Ali, and G. Mascali, eds.), Springer Verlag, 2006 pp. 169–175.
24. S. Burger, A. Schädle, L. Zschiedrich, and F. Schmidt, *Advanced FEM analysis of nano-optical devices*, Nanophotonics (D. L. Andrews, J.-M. Nunzi, and A. Ostendorf, eds.), Proc. SPIE, **6195**, 2006, pp. 72–82.

25. S. Burger, L. Zschiedrich, A. Schädle, R. Klose, B. Kettner, J. Pomplun, T. Pollok, and F. Schmidt, *Advanced FEM analysis of nano-optical devices*, Proc. Symposium on Photonics Technologies for the 7th Framework Programme, 2006.
26. S. Burger, R. Köhle, L. Zschiedrich, H. Nguyen, F. Schmidt, R. März, and C. Nölscher, *Rigorous simulation of 3D masks*, Photomask Technology (P. M. Martin and R. J. Naber, eds.), **6349**, Proc. SPIE, 2006, p. 63494Z.
27. 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*, in: Microcirculation, 13:15–32, 2006.
28. M. Clasen und H.-C. Hege, *Terrain rendering using spherical clipmaps*, in: EuroVis 2006 - Eurographics/IEEE VGTC Symposium on Visualization, S. 91–98, 2006.
29. L. Coconu, O. Deussen und H.-C. Hege, *Real-time pen-and-ink illustration of landscapes*, in: NPAR '06: Proceedings of the 3rd International Symposium on Non-photorealistic Animation and Rendering, Seiten 27–35, New York, NY, USA, 2006. ACM press.
30. P. Colli Franzone, P. Deuffhard, B. Erdmann, J. Lang, L. F. Pavarino, *Adaptivity in space and time for reaction-diffusion systems in electrocardiology*, SIAM J. Sc. Comp., Vol. 28, No. 3, pp. 942-962, SIAM (2006)
31. P. Deuffhard, M. Weiser, S. Zachow: *Mathematics in Facial Surgery*. Notices of the AMS, Volume 53, No. 9, pp. 2-6 (2006).
32. G. Dolling, M. Wegener, A. Schädle, S. Burger, and S. Linden, *Observation of magnetization waves in negative-index photonic metamaterials*, Appl. Phys. Lett., **2006**, 231118.
33. P. Domingues, A. Andrzejak, L. Moura Silva: *Using Checkpointing to Enhance Turnaround Time on Institutional Desktop Grids*, 2nd IEEE International Conference on e-Science and Grid Computing (eScience 2006), Amsterdam, Netherlands, 2006.
34. J. Dornheim, H. Seim, B. Preim, I. Hertel und G. Strauß, *Segmentation of neck lymph nodes in CT datasets with stable 3D mass-spring models*, in: MICCAI (2), Seiten 904–911, 2006.
35. L. Dornheim, J. Dornheim, H. Seim und K. D. Tönnies, *Aktive Sensoren: Kontextbasierte Filterung von Merkmalen zur modellbasierten Segmentierung*, in: Bildverarbeitung für die Medizin, Seiten 96–100, Springer-Verlag, 2006.
36. A. Duffy, S. Harries, J. Marzi, C. Petz and Z. Wu. *VIRTUE: integrating CFD ship design*, in Proc. 7th International Conference on Hydrodynamics, Theory and Applications (ICHDT), Seiten 615–624, 2006.
37. R. Ehrig, W. R. Taylor, G. N. Duda, and M. O. Heller, *A new approach for the determination of joint axes*, Proceedings of the 52th Annual Meeting of the Orthopedic Society (Chicago), 2006.
38. R. Ehrig, W. R. Taylor, G. N. Duda, and M. O. Heller, *A survey for formal methods for determining the centre of ball joints*, Journal of Biomechanics, **39**, 2006, 2798–2809.
39. A. Eisenblätter und H.-F. Geerdes, *Wireless network design: Solution-oriented modeling and mathematical optimization*, IEEE Wireless Comm. (Special Issue on 3G/4G/WLAN/WMAN Planning and Optimization) (2006).

40. A. Eisenblätter, H.-F. Geerdes und I. Siomina, *Integrated access point placement and channel assignment for wireless LANs in an indoor office environment*, Techn. Ber. 346, MATHEON, Berlin, Germany, 2006.
41. C. Fouard, G. Malandain, S. Prohaska und M. Westerhoff. *Blockwise processing applied to brain micro-vascular network study*, in: IEEE Transactions on Medical Imaging, 25(10):13–19, 2006.
42. P. Friese und J. Rambau, *Online-optimization of multi-elevator transport systems with reoptimization algorithms based on set-partitioning models*, Discrete Appl. Math. **154** (2006), Nr. 13, 1908–1931.
43. T. Gänzler, S. Volkwein, M. Weiser, *SQP methods for parameter identification problem arising in hyperthermia*, Opt. Meth. Softw. Special Issue on Parameter Estimation and Experimental Design, **21**(6), 2006, pp. 869–887.
44. H.-F. Geerdes, A. Eisenblätter, P. M. Slobodzian, M. Iwamura, M. Dohler, R. Zdunek und M. J. Nawrocki, *Theoretical models for UMTS radio networks*, Understanding UMTS Radio Network Modelling, Planning and Automated Optimisation: Theory and Practice (M. Nawrocki, H. Aghvami und M. Dohler, Hg.), Wiley, 2006.
45. H.-F. Geerdes und F. Ryll, *Efficient approximation of blocking rates in UMTS radio networks*, Proc. PGTS'06 (Breslau, Polen), 2006.
46. J. Gellermann, M. Weihrauch, C. Cho, W. Wlodarczyk, H. Föhling, R. Felix, V. Budach, M. Weiser, J. Nadobny, P. Wust, *Comparison of MR-thermography and planning calculations in phantoms*, Medical Physics **33**, 2006, pp. 3912–3920.
47. A. Gerdenitsch, A. Eisenblätter, H.-F. Geerdes, R. Abiri, M. Livschitz, Z. Neyman und M. J. Nawrocki, *Theory of automated network optimisation*, Understanding UMTS Radio Network Modelling, Planning and Automated Optimisation: Theory and Practice (M. Nawrocki, H. Aghvami und M. Dohler, Hg.), Wiley, 2006.
48. V. Getov, D. Laforenza, A. Reinefeld (Hrsg.): *Future Generation Grids*, Springer-Verlag, ISBN: 0 387 27935-0, Januar 2006.
49. R. Gillmann und V. Kaibel, *Reflux-Initial 0/1-Polytopes*, J. Comb. Theory, Ser. A **113** (2006), 799–821.
50. L. Goubergrits, T. Timmel, K. Affeld, C. Petz, D. Stalling und H.-C. Hege, *Characterization of an artificial valve flow using the numerical dye washout visualization technique: Application to the monoleaflet valve with purged flow*, Artificial Organs, 30(8):642–650, 2006.
51. M. Grötschel, *Ein gemischt-ganzzahliges lineares Optimierungsmodell für ein Laserschweißproblem im Karosseriebau*, Zeitschrift für wirtschaftlichen Fabrikbetrieb (ZWF) Karosseriebau, 101:5 (2006) 260-264.
52. M. Grötschel, H. Hinrichs, K. Schröer und A. Tuchscherer, *Ein gemischt-ganzzahliges lineares Optimierungsmodell für ein Laserschweißproblem im Karosseriebau*, Zeitschrift für wissenschaftlichen Fabrikbetrieb (2006), Nr. 5, 260–264.
53. J. Gross, H. Geerdes, H. Karl und A. Wolisz, *Performance analysis of dynamic OFDMA systems with inband signaling*, IEEE J. Sel. Area Comm. (Special Issue on 4G Wireless Systems) (2006).

54. T. Harks, S. Heinz und M. Pfetsch, *Competitive Online Multicommodity Routing*, Proc. Workshop on Approximation and Online Algorithms (WAOA) 2006, (T. Erlebach und C. Kaklamanis, Hg.), Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2006, 240–252.
55. A. Hess, H.-F. Geerdes und R. Wessäly, *Intelligent distribution of intrusion prevention services on programmable routers*, Proc. IEEE INFOCOM 2006 (Barcelona, Spanien), 2006.
56. C. A. Herrmann, T. Langhammer: *Combining Partial Evaluation and Staged Interpretation in the Implementation of Domain-Specific Languages*, In Science of Computer Programming, Special Issue on the First MetaOCaml Workshop 2004, 62(1):47–65, September 2006.
57. B. Hiller, S. O. Krumke und J. Rambau, *Reoptimization gaps versus model errors in online-dispatching of service units for ADAC*, Discrete Appl. Math. **154** (2006), Nr. 13, 1897–1907.
58. M. Holschneider and G. Teschke, *Existence and Computation of Optimally Localized Coherent States*, Journal of Mathematical Physics **47**, 2006, 123503.
59. R. Holzlöhner, S. Burger, P. J. Roberts, and J. Pomplun, *Efficient optimization of hollow-core photonic crystal fiber design using the finite-element method*, J. Europ. Opt. Soc.: Rap. Comm. **1** 2006, 06011.
60. I. Horenko, J. Schmidt-Ehrenberg und C. Schütte, *Set-oriented dimension reduction: Localizing principal component analysis via hidden Markov models*, in: M.R. Berthold, R. Glen, and I. Fischer (Hrsg.), Computational Life Sciences II: Second International Symposium CompLife 2006, Cambridge (UK), Sept. 2006, *Lecture Notes in Bioinformatics*, Vol. 4216, Seiten 98–115. Springer, 2006.
61. R. Hülsermann, M. Jäger, A. M. C. A. Koster, S. Orłowski, R. Wessäly und A. Zymolka, *Availability and cost based evaluation of demand-wise shared protection*, Proceedings 7th ITG-Workshop on Photonic Networks (Leipzig, Germany), VDE Verlag GmbH, 2006, 161–168.
62. F. Hupfeld, M. Gordon: *Using distributed consistent branching for efficient reconciliation of mobile workspaces*, 2nd International Conference on Collaborative Computing: Networking, Applications and Worksharing (IEEE CollaborateCom) Workshops, 2006.
63. A. Hutanu, G. Allen, S.D. Beck, P. Holub, H. Kaiser, A. Kulshrestha, M. Liska, J. MacLaren, L. Matyska, R. Paruchuri, S. Prohaska, E. Seidel, B. Ullmer und S. Venkataraman, *Distributed and collaborative visualization of large data sets using high-speed networks*, Future Generation Comp. Syst., 22(8):1004–1010, 2006.
64. A. Imhof, *RSWK/SWD und Faceted Browsing: neue Möglichkeiten einer inhaltlich-intuitiven Navigation*, Bibliotheksdienst 40 (2006), H. 8/9, S. 1015–1025.
65. M. Joswig und M. E. Pfetsch, *Computing optimal morse matchings*, SIAM J. Discrete Math. **20** (2006), Nr. 1, 11–25.
66. R. Kähler, J. Wise, T. Abel und H-C. Hege, *GPU-Assisted Raycasting of Cosmological Adaptive Mesh Refinement Simulations*, in: Proc. Int. Workshop on Volume Graphics (VG06), S. 103–110, Boston, July 30 - 31, 2006, Eurographics/IEEE VGTC 2006.
67. C. Kober, B. Erdmann, C. Hellmich, M. Geiger, R. Sader, H.-F. Zeilhofer, *How does the PDL influence overall stress/strain profiles of the partially edentulous mandible?* in:



- Biological Mechanisms of Tooth Eruption, Resorption and Movement*, Eds. Z. Davidovitch, J. Mah, S. Suthanarak, Harvard Society for the Advancement of Orthodontics, Boston, Massachusetts, USA, 2006, pp. 349–355.
68. C. Kober, B. Erdmann, C. Hellmich, R. Sader, H.-F. Zeilhofer, *Consideration of anisotropic elasticity minimizes volumetric rather than shear deformation in human mandible*, *Comp. Meth. Biomed. Eng.*, **9**(2), 2006, pp. 91–101.
69. Thorsten Koch, *Mathematische Programmierung auf der Überholspur*, *OR News* **26** (2006), 36–37.
70. Thorsten Koch, *Rapid Mathematical Programming or How to Solve Sudoku Puzzles in a few Seconds*, *Operations Research Proceedings 2005* (H.-D. Haasis, H. Kopfer und J. Schönberger, Hg.), Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2006, 21–27.
71. B. Kolbeck, P. May, T. Schmidt-Goenner, T. Steinke, E. W. Knapp: *Connectivity independent protein fold detection: A hierarchical approach*, *BMC Bioinformatics* 2006, 7:510, Nov. 2006.
72. A. M. C. A. Koster, *Cost-efficient transparent optical networks with high connection availabilities*, *Proceedings 8th International Conference on Transparent Optical Networks, ICTON 2006* (M. Marciniak, Hg.), Bd. 3, 2006, 101–104.
73. A. M. C. A. Koster und A. K. Wagler, *On determining the imperfection ratio*, *Electronic Notes in Discrete Mathematics* **25** (2006), 177–181, *Proceedings of 5th Cologne-Twente Workshop on Graphs and Combinatorial Optimization*.
74. S. Kube, M. Weber, *A Coarse Graining Method for the Identification of Transition rates between Molecular Conformations*, *J. Chem. Phys.*, **126**(2), 2007
75. A. Kuss, H.-C. Hege, S. Krofczik und J. Borner, *Pipeline for the creation of surface-based averaged brain atlases, 2007*, *Proc. of WSCG 2007 (full papers)*, 15th Int. Conf. in Central Europe on Computer Graphics, Visualization and Computer Vision, Plzen, Czech Republic, Jan 2007, Vol. 1, pp. 17–24.
76. H. Lamecker, T. H. Wenckeback und H.-C. Hege, *Atlas-based 3D-shape reconstruction from X-ray images*, in *Proc. Int. Conf. of Pattern Recognition (ICPR2006)*, Vol. I, S. 371–374. IEEE Computer Society, 2006.
77. H. Lamecker, T. H. Wenckeback und H.-C. Hege, G. N. Duda und M. O. Heller, *Atlas-basierte 3D-Rekonstruktion des Beckens aus 2D-Projektionsbildern*, in: H. Handels et al. (Hrsg.), *Bildverarbeitung für die Medizin 2006: Algorithmen – Systeme – Anwendungen*, S. 26–30, 2006.
78. H. Lamecker, S. Zachow, H.-C. Hege und M. Zöckler, *Surgical treatment of craniosynostosis based on a statistical 3D-shape model: First clinical application*, *Int. J. Computer Assisted Radiology and Surgery*, 1(1):253–254, 2006.
79. H. Lamecker, S. Zachow, A. Wittmers, B. Weber, H.-C. Hege, B. Elsholtz und M. Stiller, *Automatic segmentation of mandibles in low-dose CT-data*, *Int. J. Computer Assisted Radiology and Surgery*, 1(1):393–395, 2006.
80. T. Lange, H. Lamecker, M. Hünerbein, S. Eulenstein, S. Beller und P. M. Schlag, *A new class of distance measures for registration of tubular models to image data*, angenommen für *BVM* 2007.

81. V. Lehmann, G. Teschke, *A new intermittent clutter filtering algorithm for radar wind profiler*, Proc. ISTP Boulder, 2006
82. S. Linden, C. Enkrich, G. Dolling, M. W. Klein, J. Zhou, T. Koschny, C. M. Soukoulis, S. Burger, F. Schmidt, and M. Wegener, *Photonic metamaterials: Magnetism at optical frequencies*, IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics, **12**, 2006, pp. 1097–1105.
83. M. López-Fernández, C. Palencia, and A. Schädle, *A spectral order method for inverting sectorial laplace transforms*, SIAM J. Numer. Anal., **44**(3), 2006, pp. 1332–1350.
84. J. Lügger, *Neustart für Bibliotheken ins Informationszeitalter*, ABI-Technik 26, ISSN 0720-6763, Heft 2/2006, S. 94–104.
85. B. Lutz-Westphal *Typisch diskret – Was macht diskretes Arbeiten aus?* Beiträge zum Mathematikunterricht (2006), 45–47.
86. P. May, M. Bauer, C. Köberle, G.W. Klau: *A computational approach to microRNA detection*, ZIB Report 06-44, Nov. 2006.
87. P. May, H. C. Ehrlich, T. Steinke: *ZIB Structure Prediction Pipeline: Composing a Complex Biological Workflow through Web Services*, In: W.E. Nagel, W.V. Walter, and W. Lehner (Eds.): Euro-Par 2006, Parallel Processing, 12th International Euro-Par Conference, 2006.
88. P. May, T. Steinke: *THESEUS – Protein Structure Prediction at ZIB*, ZIB-Report 06-24, 2006.
89. A. Maye, T.H. Wenckebach und H.-C. Hege, *Visualization, reconstruction, and integration of neuronal structures in digital brain atlases*, Int. Journal of Neuroscience, 116(4):431–459, 2006.
90. R. Meier, M. Molinier, C. Anson, A.K. Powell, B. Kallies, R. v. Eldik: *Structure of sodium bis(N-methyl-iminodiacetato)iron(III): trans-meridional N-coordination in the solid state and in solution*, Dalton Trans. **46** (2006), 5506–5514.
91. M. Meyer, T. Steinke, J. Sühnel: *Density functional study of isoguanine tetrad and pentad sandwich complexes with alkali metal ions*, J. of Mol. Modeling, online first DOI 10.1007/s00894-006-0148-5, Springer , September 30, 2006.
92. D. Michaelis, C. Wächter, S. Burger, L. Zschiedrich, and A. Bräuer, *Micro-optically assisted high index waveguide coupling*, Appl. Opt., **45**, 2006, pp. 1831–1838.
93. S. Orłowski und R. Wessäly, *The effect of hop limits on optimal cost in survivable network design*, Telecommunications Planning: Innovations in Pricing, Network Design and Management (S. Raghavan und G. Anandalingam, Hg.), Operations Research/Computer Science Interfaces, Bd. 33, Springer-Verlag, 2006, 151–166.
94. K. Peter, P. Sobe: *Flexible Definition of Data and Redundancy Layout for Storage Systems*, Sixth European Dependable Computing Conference (EDCC-6), Proceedings Supplemental Volume, pp. 59/60, Coimbra, Portugal, October 2006.
95. M. Pfetsch und R. Borndörfer, *Routing in line planning for public transport*, Operations Research Proceedings 2005 (Hans-Dietrich Haasis, Herbert Kopfer, and Jörn Schönberger, Hg.), Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2006, 405–410.

96. J. Pomplun, S. Burger, F. Schmidt, L. Zschiedrich, and F. Scholze, *Rigorous FEM-simulation of EUV-masks: Influence of shape and material parameters*, Photomask Technology (P. M. Martin and R. J. Naber, eds.), **6349**, Proc. SPIE, 2006, p. 63493D.
97. S. Prohaska, *Interaktive Visualisierung und Datenanalyse: Herausforderungen durch wachsende Datenmengen*, Kartographische Schriften: Aktuelle Entwicklungen in Geoinformation und Visualisierung (GEOVIS 2006), 10:103–110, 2006.
98. R. Ramlau and G. Teschke, *A Projection Iteration for Nonlinear Operator Equations with Sparsity Constraints*, Numerische Mathematik **104**, 2006, pp. 177–203.
99. T. Röblitz, K. Rządca: *On the Placement of Reservations into Job Schedules*, In: W. E. Nagel, W. V. Walter, and W. Lehner (Eds.): Euro-Par 2006, Parallel Processing, 12th International Euro-Par Conference, pp. 198–210, August 2006.
100. T. Röblitz, F. Schintke, A. Reinefeld: *Resource Reservations with Fuzzy Requests*, Concurrency and Computation: Practice and Experience, 18(13):1681-1703, November 2006.
101. B. Rusch, *See you at Victor's and Mauritz's*, SMUG 4 EU, European Newsletter for SFX/MetaLib Users, Issue 3, June 2006, p. 3.
102. B. Rusch, *IGeLU from a SMUG'ers perspective*, IGeLU Newsletter, 2006–1, p. 4.
103. B. Rusch, *Lucky S-NUG – what does this mean for SFX/MetaLib users?*, IGeLU Newsletter, 2006–2, p. 3.
104. J. Sahner, T. Weinkauff, N. Teuber und H.-C. Hege, *Vortex and strain skeletons in Eulerian and Lagrangian frames*, IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics, zur Veröffentlichung angenommen.
105. A. Schädle, M. López-Fernández, and Ch. Lubich, *Fast and oblivious convolution quadrature*, SIAM J. Sci. Comput., **28**(2), 2006, pp. 421–438.
106. T. Schütt, F. Schintke, A. Reinefeld: *Structured Overlay without Consistent Hashing: Empirical Results*, Sixth Workshop on Global and Peer-to-Peer Computing (GP2PC'06), May 2006.
107. H. Seim, J. Dornheim und U. Preim, *Ein 2-Fronten-Feder-Masse-Modell zur Segmentierung von Lymphknoten in CT-daten des Halses*. in: Bildverarbeitung für die Medizin, S. 106–110, Springer-Verlag, 2006.
108. K. Shi, H. Theisel, T. Weinkauff, H. Hauser, H.-C. Hege und H.-P. Seidel, *Extracting separation surfaces of path line oriented topology in periodic 2D time-dependent vector fields*, Journal of WSCG, 15(1-3), pp. 75-82, 2007.
109. K. Shi, H. Theisel, T. Weinkauff, H. Hauser, H.-C. Hege und H.-P. Seidel, *Path line oriented topology for periodic 2D time-dependent vector fields*, in Proc. Eurographics/IEEE VGTC Symposium on Visualization, Seiten 139–146, Lisbon, Portugal, May 2006.
110. T. Steinke, A. Reinefeld, T. Schütt: *Experiences with High-Level Programming of FPGAs on Cray XD1*, CUG Proceedings 2006.
111. H. Stüben, *Mass storage capacity for computational hadron physics*, in: Hadron Physics, I.J.D. MacGregor und R. Kaiser (Hrsg.), Taylor & Francis.
112. H. Stüben, S. Wollny: *Using the Mass Storage System at ZIB within I3HP*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 153 (2006) 300–305.

113. D. Talia, P. Trunfio, J. Zeng, M. Höggqvist: *A DHT-based Peer-to-Peer Framework for Resource Discovery in Grids*, CoreGRID TR-0048, June, 2006.
114. D. Talia, P. Trunfio, J. Zeng, M. Höggqvist: *A Peer-to-Peer framework for resource discovery in large-scale Grids*, CoreGRID Integration Workshop, October, 2006.
115. 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, pp. 791–798.
116. W.R. Taylor, R.M. Ehrig, G.N. Duda, and M.O. Heller, *The determination of joint axes: the performance of a new approach*, 5. World Congress of Biomechanics, Munich, Journal of Biomechanics, **39**, Suppl. 1, 2006, pp. S571–S572.
117. W.R. Taylor, R.M. Ehrig, G.N. Duda, and M.O. Heller, *The symmetrical axis of rotation approach (SARA) for determination of joint axes in clinical gait analysis*, 1st Joint ESMAC-GCMAS Meeting, Amsterdam, 2006.
118. W.R. Taylor, C. König, A.D. Speirs, R.M. Ehrig, G.N. Duda, and M.O. Heller, *Die medio-laterale Kraftverteilung im Schafsknie*, Deutscher Kongress für Orthopädie und Unfallchirurgie, Berlin, 2006.
119. G. Teschke, U. Görtsdorf, P. Körner, and D. Trede, *A new approach for target classification in ka-band radar data*, Proc. ERAD Barcelona, 2006.
120. M. Weber, W. Rungtarityotin, and 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, Eds. M. Spiliopoulou, R. Kruse, C. Borgelt, A. Nürnberger, and W. Gaul, Spring Series Studies in Classification, Data Analysis, and Knowledge Organization, 2006, pp. 103–110.
121. T. Weinkauff, J. Sahner, H. Theisel, H.-C. Hege und H.-P. Seidel, *A unified feature extraction architecture*, in: Active Flow Control 2006, Berlin, Germany, September 27-29, 2006.
122. T. Weinkauff, H. Theisel, H.-C. Hege und H.-P. Seidel, *Topological structures in two-parameter-dependent 2D vector fields*, Computer Graphics Forum, 25 (3):607–616, 2006.
123. S. Zachow, H.-C. Hege, P. Deuffhard: *Computer Assisted Planning in Cranio-Maxillo-facial Surgery*. Journal of Computing and Information Technology – CIT 14, 1, pp. 53-64 (2006).
124. S. Zachow, H. Lamecker, B. Elsholtz und M. Stiller, *Is the course of the mandibular nerve deducible from the shape of the mandible?*, Int. J. of Computer Assisted Radiology and Surgery, Seiten 415–417, 2006.
125. S. Zachow, A. Steinmann, T. Hildebrandt, R. Weber und W. Heppt, *CFD simulation of nasal airflow: Towards treatment planning for functional rhinosurgery*, Int. J. of Computer Assisted Radiology and Surgery, Seiten 165–167, 2006.
126. L. Zschiedrich, S. Burger, B. Kettner, and F. Schmidt, *Advanced finite element method for nano-resonators*, Physics and Simulation of Optoelectronic Devices XIV (M. Osinski, F. Henneberger, and Y. Arakawa, eds.), vol. 6115, Proc. SPIE, 2006, pp. 164–174.
127. L. Zschiedrich, R. Klose, A. Schädle, F. Schmidt. *A new finite element realization of the Perfectly Matched Layer Method for Helmholtz scattering problems on polygonal domains in 2D* J. Comput. Appl. Math., **188**, 2006, pp. 12–32, 2006.

128. L. Zschiedrich, R. März, S. Burger, and F. Schmidt. *Efficient 3D Finite Element Simulation of Fiber-Chip Coupling*, Integrated Photonics Research and Applications/Nanophotonics, Technical Digest (Optical Society of America), paper ITuF1 (2006).

## 5.4 Monographien

1. P. Deuffhard: *Newton Methods for Nonlinear Problems. Affine Invariance and Adaptive Algorithms. Second printed edition. Series Computational Mathematics 35*, Springer (2006).
2. S. Hußmann und B. Lutz-Westphal (Hg.), *Kombinatorische Optimierung erleben. In Studium und Unterricht*, Vieweg, 2007.

## 5.5 Habilitationen

### Universität Bremen

**Gerd Teschke** (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

*Operator Equations, Mixed Constraints, Frame-Based Iterative Concepts and Applications*

Gutachter: Peter Maass (Universität Bremen) Ingrid Daubechies, Princeton University, USA; Heinz Engl, Radon Institute for Computational and Applied Mathematics (RICAM), Linz, Österreich; Alfred Schmidt, Otto-von-Guericke-Universität Bremen

### Universität Magdeburg

**Annegret Wagler** (Abt. Optimierung)

*Beyond Perfection: On Relaxations and Superclasses*

Gutachter: Martin Grötschel, TU Berlin und ZIB; Thomas Lieblich, EPFL Lausanne, Schweiz; Robert Weismantel, Universität Magdeburg

## 5.6 Dissertationen

### Freie Universität Berlin

**Anton Schiela** (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

*The Control Reduced Interior Point Method – A Function Space Oriented Algorithmic Approach*

Betreuer: Peter Deuffhard (FU Berlin und ZIB)

**Marcus Weber** (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)

*Meshless Methods in Conformation Dynamics*

Betreuer: Peter Deuffhard (FU Berlin und ZIB)

**Technische Universität Berlin****Brigitte Lutz-Westphal** (Abt. Optimierung)*Kombinatorische Optimierung – Inhalte und Methoden für einen authentischen Mathematikunterricht*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

**Adrian Zymolka** (Abt. Optimierung)*Design of Survivable Optical Networks by Mathematical Optimization*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

**Swedish Institute of Computer Science****Ali Ghodsi** (Abt. Computer Science Research)*Distributed k-ary System: Algorithms for Distributed Hash Tables*

Betreuer: Alexander Reinefeld (HU Berlin und ZIB)

**5.7 Examensarbeiten****Freie Universität Berlin****Benjamin Böhmer** (Abt. Computer Science Research)*Optimierung einer Topologiegraphendatenbank mit Hilfe eines genetischen Algorithmus*

Betreuer: Patrick May, Thomas Steinke (ZIB)

**Florian Klingenberg** (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)*Numerische Behandlung partieller Dirichlet-Randbedingungen in der nichtlinearen Elastomechanik*

Betreuer: Martin Weiser (ZIB)

**Aaron Richardson** (Abt. Wissenschaftliche Informationssysteme)*Automatic Classification of Mathematical Documents*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

**Alexander Riemer** (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)*Accuracy, Stability, Convergence of Rigorous Thermodynamic Sampling Methods*

Betreuer: Frank Cordes (ZIB)

**Christian Schudoma** (Abt. Computer Science Research)*A Fragment Based Approach to RNA Threading*

Betreuer: Patrick May (ZIB)

**Sascha Willuweit** (Abt. Computer Science Research)*Evaluierung von Domänen-Domänen-Interaktionen*

Betreuer: Thomas Steinke (ZIB)

**Humboldt-Universität zu Berlin****Monika Moser** (Abt. Computer Science Research)*Platzierung von Replikaten in Verteilten Systemen*

Betreuer: Alexander Reinefeld (HU und ZIB)

**Technische Universität Berlin****Christine Anders** (Abt. Optimierung)*Das Chordalisierungspolytop und die Berechnung der Baumweite eines Graphen*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

**Cornelia Bönisch** (Abt. Optimierung)*Sensitivitätsanalyse in der Fahrzeugumlaufplanung*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

**Timo Bertold** (Abt. Optimierung)*Primal Heuristics for Mixed Integer Programs*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

**Berthold Bongardt** (Abt. Optimierung)*Anwendungen von Gitterbasisreduktion in der Ganzzahligen Linearen Programmierung*

Betreuer: Volker Kaibel (TU Berlin)

**Stylianos Chiotellis** (Abt. Optimierung)*Two-Dimensional Cutting and Packing: MIP approaches and Computations*

Betreuer: Arie M. C. A. Koster (TU Berlin)

**Julia Däumer** (Abt. Optimierung)*Optimierung der Verfügbarkeit von Mehrwegladungsträgern*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

**Henry Irwan** (Abt. Optimierung)*User Mobility and UMTS Radio Network Performance Evaluation*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

**Marko Kitzing** (Abt. Optimierung)*Lagrangian-Based Heuristics for 2-Layer Network Design*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

**Alexander Klar** (Abt. Optimierung)*Cutting Planes for Mixed Integer Programming*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

**Victoria Kulina** (Abt. Optimierung)*Heuristiken in der Psychologie der Entscheidungsfindung: Übersicht und Analyse aus mathematischer Perspektive*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

**Annette Mura** (Abt. Optimierung)*Trassenauktionen im Schienenverkehr*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

**Arne Nielsen** (Abt. Optimierung)*Optimization of a Home Health Care Service*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

**Jan Pomplun** (Abt. Numerische Analysis und Modellierung)*Rigorous FEM-Simulation of Maxwell's Equations for EUV Lithography*

Betreuer: Frank Schmidt (ZIB)

**Mikis Rolke und Nicole Vigh** (Abt. Optimierung)

*Graphs, complexity, and approximability: a data base surveying major results*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

**Franziska Ryll** (Abt. Optimierung)

*Approximating Blocking rates in UMTS Networks*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

**Timo Schreiter** (Abt. Optimierung)

*Mathematische Modellierung rekonfigurierbarer Schaltnetzwerke*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

**Mike Schülken** (Abt. Optimierung)

*Graphenfärbung: Geschichte und neue Entwicklungen, ein Überblick (wissenschaftliche Hausarbeit)*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

**Philip Sommer** (Abt. Optimierung)

*Unique Sink Orientations of Cubes*

Betreuer: Volker Kaibel (TU Berlin)

**Fabian Stöfler** (Abt. Optimierung)

*Heuristics for Duty Scheduling in Public Transit*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

**Nicole Vigh und Mikis Rolke** (Abt. Optimierung)

*Graphs, complexity, and approximability: a data base surveying major results*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

**Kati Wolter** (Abt. Optimierung)

*Implementation of Cutting Plane Separators for Mixed Integer Programs*

Betreuer: Martin Grötschel (TU Berlin und ZIB)

## **Berufsakademie Berlin**

**Christian Schimmel** (Abt. IT Services)

*Entwurf und Aufbau eines zentral verwalteten Sicherheitssystems*

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)

#### NewtonLib

In dieser Software-Sammlung sind Implementierungen von Algorithmen aus dem Buch „Newton Methods for Nonlinear Problems – Affine Invariance and Adaptive Algorithms“ von P. Deuffhard zusammengestellt.

Weitere Informationen finden sich auf den NEWTONLIB-Webseiten unter:

<http://www.zib.de/Numerik/numsoft/NewtonLib/>

<http://www.zib.de/Software/>

**Ansprechpartner:** Ulrich Nowak (nowak@zib.de)

#### CodeLab

CodeLab ist ein interaktives Laboratorium für die Durchführung von Experimenten mit ausgewählten numerischen Codes aus CODELIB und NEWTONLIB.

Weitere Informationen finden sich unter:

<http://www.zib.de/Software/>

**Ansprechpartner:** Ulrich Nowak (nowak@zib.de)

## JCMsuite

JCMsuite ist ein kommerziell vertriebenes Software Paket zur Lösung der Maxwell'schen Gleichungen für optische Anwendungen. JCMsuite wird gemeinsam mit der JCMwave GmbH, Putzbrunn, entwickelt.

Weitere Informationen finden sich auf <http://www.jcmwave.com>.

**Ansprechpartner:** Lin Zschiedrich ([zschiedrich@zib.de](mailto:zschiedrich@zib.de)), Frank Schmidt ([frank.schmidt@zib.de](mailto: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](mailto:erdmann@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 Benutzungsoberfläche und kann per Skript gesteuert werden. Ein generischer Programmkern kann um anwendungsspezifische Module ergänzt werden. Auf diese Weise ist es möglich, für spezifische Anwendungsbereiche maßgeschneiderte Problemlösungen zu realisieren.

Kooperationspartner des ZIB können eine spezielle Version der Software kostenfrei erhalten. Diese Software enthält, neben den unten beschriebenen Funktionen der kommerziellen Version, Entwicklungen aus aktuellen Forschungsschwerpunkten. Im Jahr 2006 wurden zwei dieser Forschungsversionen (ZIB-2006-1 und ZIB-2006-2) veröffentlicht.

Eine professionelle End-User-Version mit einem ausgewählten Satz von Modulen sowie eine erweiterbare Entwickler-Version wird von Mercury Computer Systems kommerziell angeboten. Im Frühjahr 2006 wurde amira 4.1 veröffentlicht. Es werden folgende Betriebssysteme unterstützt:

- Windows 2000/XP, 32-bit code
- Windows XP 2003 x64 Edition (5.2) 64-bit Code (AMD Opteron, Intel Xeon 64, etc.)
- Linux x86 (Red Hat Enterprise Linux 3.0) 32-bit Code
- Linux AMD 64 (Red Hat Enterprise Linux 3.0) 64-bit Code (AMD Opteron, Intel Xeon 64, etc.)

- Linux IA64 (Red Hat Enterprise Linux 3.0) 64-bit Code (Itanium 2)
- Mac OS X Tiger (10.4) 32-bit code
- HP-UX 11.0, 32/64-Bit-Code

Das Gesamtpaket ist in mehrere Teile aufgespalten, die auf einzelne Anwendungsfelder zugeschnitten sind. Neben der Standardversion `amira 4.1 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-Displaysysteme, 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))

### Lenné3D

Lenné3D bezeichnet die am ZIB entwickelten Landschaftsvisualisierungssysteme. Der seit 2001 entwickelte Lenné3D-Player zeichnet sich durch eine Vielzahl von Features aus, die in der wissenschaftlichen Anwendung hilfreich sind. So stellt er unter anderem Szenen realistisch, skizzenhaft oder gemischt dar, bietet Kamerapfade und Video-Export für Offline-Darstellungen und erlaubt die interaktive Synchronisation mit GIS-Systemen wie dem LandXplorer. Die in C++ entwickelte Software ist für Windows (32-Bit) verfügbar. Das Spin-Off Lenné3D-GmbH (<http://www.lenne3d.de>) nutzt dieses System für Dienstleistungsprojekte.

Das Nachfolgesystem Biosphere3D wurde mit dem Schwerpunkt auf Vegetationsdarstellung in großen Szenarien entwickelt. Im Gegensatz zum Lenné3D-Player kann die ganze Erde visualisiert werden, wodurch auch ausgedehnte Landschaftsprojekte an einem Stück verarbeitet werden können. Das System besteht aus C++-Modulen, die über Python-Skripte zusammengesetzt und mit einer Benutzeroberfläche versehen werden. Unterstützt wird zur Zeit Windows in 32 Bit. Versionen für Windows/64-Bit, Linux und Mac OS X sind in Vorbereitung. Die Verfügbarkeit für Anwender und externe Softwareentwickler wird unter <http://www.zib.de/visual/software/> bekanntgegeben.

**Ansprechpartner:** Malte Clasen ([clasen@zib.de](mailto:clasen@zib.de))

## 6.3 Optimierung

### Modellierungssprache Zimpl

Zimpl ist eine Programmiersprache, um das mathematische Modell eines Problems in ein lineares (LP) oder gemischt-ganzzahliges Programm (MIP) zu übersetzen. Das Ergebnis wird als MPS-Datei oder LP-Datei ausgegeben und kann dann von gängigen LP-Lösern wie z. B. SoPlex (siehe Abschnitt 6.3) und MIP-Lösern (siehe Projekt *Gemischt-Ganzzahlige Programmierung*) verarbeitet werden.

Das 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*, siehe Abschnitt 2.2.7. Das Programm wird kontinuierlich entsprechend den Anforderungen in den Projekten und von Seiten der Nutzer weiterentwickelt. In 2006 wurden zwei neue Releases veröffentlicht.

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

**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.

perPlex ist online verfügbar unter <http://www.zib.de/koch/perplex>.

**Ansprechpartner:** Thorsten Koch (koch@zib.de)

### LP-Löser SoPlex

SoPlex ist eine Implementierung des revidierten Simplexverfahrens zur Lösung von linearen Programmen. Das Programm beinhaltet sowohl primale als auch duale Lösungsroutinen und ist als Klassenbibliothek in C++ implementiert. SoPlex kann als Unterroutine in anderen Programmen, aber auch selbständig verwendet werden. Das Einlesen von Problemen erfolgt in den Standardformaten MPS und LP. Der Code wurde von Roland Wunderling am ZIB im Rahmen seiner Dissertation *Paralleler und Objektorientierter Simplex-Algorithmus* (Report 96-09) entwickelt und hat registrierte Nutzer in mehr als 50 Ländern.

Der Code wird in Zusammenarbeit mit und im Auftrag von Lizenznehmern fortlaufend gewartet und weiterentwickelt. Im Berichtszeitraum umfasst dies insbesondere die folgenden Punkte:

- Ein verbessertes *Preprocessing* wurde implementiert, das wesentlich mehr Möglichkeiten zur Vereinfachung des Problems bietet. Des Weiteren ist nun auch eine vollständige Rekonstruktion der optimalen Basis für das ursprüngliche Problem möglich.
- Eine SoPlex-Version, die Fehlerbehandlungen durch *Exceptions* ermöglicht, ist alternativ zu der bisherigen Variante entwickelt worden.
- *Fehlerausgaben* können nun in Abhängigkeit von der Art der Fehlers beliebig umgeleitet werden.
- Der Code wurde intensiv getestet und eine *Code-Coverage-Analyse* durchgeführt.

Mehr als 600 Downloads des Codes sind für das letzte Jahr zu verzeichnen. Des Weiteren wurde SoPlex in die renommierte Benchmark-Suite SPEC CPU2006 aufgenommen, die zum Vergleich von Architekturen und Compilern von allen großen Herstellern genutzt wird.

Weitere Informationen finden sich unter <http://soplex.zib.de>. Durchschnittlich wird die Web-Seite über 800 mal monatlich besucht.

**Ansprechpartner:** Marc Pfetsch (pfetsch@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 0.90 enthält SCIP bereits eine Vielzahl von Komponenten, die es erlaubt, gemischt-ganzzahlige Programme zu lösen. Zusammen mit dem LP-Löser SoPlex und der Modellierungssprache Zimpl, beide ebenfalls am ZIB entwickelt, stellt SCIP ein integriertes Modellierungs- und Optimierungswerkzeug dar, welches bereits mit großem Erfolg in verschiedenen Projekten und innerhalb der Lehre eingesetzt wird. Unabhängige Vergleichsrechnungen von Hans Mittelmann (<http://plato.asu.edu/ftp/milpf.html>) zeigen, dass SCIP/SoPlex der derzeit schnellste frei verfügbare Löser zur gemischt-ganzzahligen Programmierung ist.

SCIP ist online verfügbar unter <http://scip.zib.de/>.

**Ansprechpartner:** Tobias Achterberg ([achterberg@zib.de](mailto:achterberg@zib.de)), Timo Berthold ([berthold@zib.de](mailto:berthold@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](mailto:wessaely@zib.de))

## CS-OPT

CS-OPT ist ein mathematisches Optimierungstool für den Luftverkehr, das die Planung von Pairings unter Beachtung von komplexen Regelwerken und Kapazitätsbedingungen erlaubt. Das Tool wurde 2005 von der Lufthansa Systems Berlin GmbH (LSB) lizenziert und in das kommerzielle Planungssystem NetLine/Crew integriert. Die Software wird seitdem unter der

Bezeichnung xOPT von LSB weiterentwickelt.

**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. 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)

### TS-OPT

TS-OPT ist ein mathematisches Optimierungstool zur Allokation von Eisenbahnfahrtrassen. Es erlaubt die Bestimmung eines ertragsmaximalen Grobfahrplans (auf einer mesoskopischen Ebene) unter Beachtung von eisenbahntechnischen Nebenbedingungen wie Mindestzugfolgezeiten, Gleisbelegungen, usw.

TS-OPT ist eine Komponente eines experimentellen Trassenauktionssystems, mit dem die Machbarkeit alternativer Organisationsformen im Eisenbahnverkehr untersucht werden soll. Neben TS-OPT besteht das System aus einem Infrastruktur- und Trassengenerator, einem Auktions- und einem Feinsimulationsmodul.

TS-OPT wird derzeit im interdisziplinären BMBF-Verbundprojekt „Trassenbörse“ (FKZ 19M2019) in Zusammenarbeit mit dem Fachgebiet für Wirtschafts- und Infrastrukturpolitik der TU Berlin, dem Fachgebiet Schienenfahrwege und Bahnbetrieb des Instituts für Land- und Seeverkehr der TU Berlin, der Ilgmann & Miethner Management Consulting, Hamburg, der IABG, Ottobrunn, dem Institut für Verkehrswesen, Eisenbahnbau und -betrieb der Universität Hannover und der Rail Management Consultants GmbH, Hannover entwickelt.

**Ansprechpartner:** Ralf Borndörfer (borndoefer@zib.de), Thomas Schlechte (schlechte@zib.de)

### MIPLIB 2003

Um den Bedarf der Forscher nach Zugriff auf interessante gemischt-ganzzahlige lineare Programme (MIP or Mixed Integer Program) zu bedienen, erzeugten R. E. Bixby, E. A. Boyd und R. R. Indovina 1992 die MIPLIB, eine Bibliothek elektronisch verfügbarer Probleme. 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 R. E. Bixby, S. Ceria, C. M. McZeal, and M. W. P. Savelsbergh 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.

Die Problem-Bibliothek wird kontinuierlich verbessert und gepflegt.

**Ansprechpartner:** Thorsten Koch (koch@zib.de), Tobias Achterberg (achterberg@zib.de)

### FAP-Web

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. FAP-web hat seit seinem Start im Juli 2000 mehr als 35.000 Besucher willkommen heißen dürfen. FAP-Web ist unter der Adresse <http://fap.zib.de> erreichbar.

Auf Initiative der Zeitschriften *Annals of Operations Research* und *4OR* wurde im Berichtszeitraum eine neue Auflage des Übersichtsartikels [1] zum Thema Frequenzzuweisung erarbeitet. Zusammen mit weiteren Übersichtartikeln wird dieser demnächst erneut publiziert [2].

### Publikationen

- [1] K. I. Aardal, C. P. M. v. Hoesel, A. M. C. A. Koster, C. Mannino und A. Sassano, *Models and solution techniques for the frequency assignment problem*, 4OR **1** (2003), Nr. 4, 261–317.
- [2] K. I. Aardal, C. P. M. v. Hoesel, A. M. C. A. Koster, C. Mannino und A. Sassano, *Models and solution techniques for the frequency assignment problem*, Ann. Oper. Res. (2007).

**Ansprechpartner:** Andreas Eisenblätter (eisenblätter@zib.de), Arie Koster (koster@wbs.ac.uk)



### SteinLib Testdata Library

Das Steinerbaumproblem in Graphen läßt sich wie folgt formulieren: In einem Graphen  $G = (V, E, c)$  mit einer Knotenmenge  $V$ , einer Kantenmenge  $E$  und Kantengewichten  $c_e$  sowie einer Menge  $T \subseteq V$  von ausgezeichneten Terminals wird ein  $T$  aufspannender Subgraph von  $G$  minimalen Gewichts gesucht. Hierbei sind auch Varianten möglich, z. B. das Steinerarboreszenzproblem, bei dem in einem gerichteten Graphen  $G = (V, A, c)$  eine  $T$  aufspannende Arboreszenz mit Wurzel  $r \in T$  gesucht wird.

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

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

Es hat sich gezeigt, daß sich, wie erhofft, immer mehr Veröffentlichungen darauf beziehen.

**Ansprechpartner:** Thorsten Koch (koch@zib.de)

### SNDlib – Survivable Network Design library

SNDlib ist eine Bibliothek von Testdatensätzen für die Festnetzplanung in der Telekommunikation. Ziel der SNDlib ist es,

- 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 Wissenschaftler und Praktiker in diesem Bereich bereitzustellen.

Neben den Testdaten umfasst die SNDlib auch die besten bekannten primalen und dualen Lösungen, eine Publikationsliste, eine Konferenzliste und eine Mailingliste. All diese Informationen sind unter der Adresse <http://sndlib.zib.de> abrufbar.

Die SNDlib wurde zuerst in einem Plenarvortrag bei der Konferenz „Design of Reliable Communication Networks“ (DRCN2005)<sup>1</sup> im Dezember 2005 vorgestellt. In der ursprünglichen Version waren bewusst nur Planungsaufgaben ohne Schutz gegen Knoten- und Kantenausfälle in die Datenbasis aufgenommen worden, um sie bei ihrer Bekanntmachung möglichst einfach zu halten.

Im letzten Jahr wurde die SNDlib um mehrere Aspekte erweitert. Zum einen werden nun auch Problemvarianten mit verschiedenen Ausfallsicherheitsmodellen angeboten, was den Anwendungsbezug und die Attraktivität der Datenbibliothek für Planer in der Praxis deutlich erhöht. Zum anderen wurden wesentliche Teile des verwendeten Java-Codes auf der SNDlib-Webseite zum Download bereitgestellt, um die Nutzung der Daten zu erleichtern.

<sup>1</sup><http://www.drcn.org>

Die Bekanntheit der SNDlib ist im letzten Jahr deutlich gestiegen und hat die internationale Sichtbarkeit des ZIB erhöht. Auf der Webseite wurden über 14.000 Zugriffe registriert, unter anderem von Forschungsinstituten und Universitäten in Frankreich, Polen, der Türkei, Ungarn, Kanada und den USA. Auch in Konferenzbeiträgen und anderen Veröffentlichungen verwenden mehr und mehr Autoren die Netze dieser Datenbibliothek, um ihre Algorithmen mit früheren Lösungsansätzen zu vergleichen.

**Ansprechpartner:** Sebastian Orłowski (orłowski@zib.de), Roland Wessälly, (wessaely@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.). Seit April 2004 ist die Version 3.8 weltweit für zahlreiche Rechnersysteme freigegeben. Vom ZIB wurden 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.

Neue Versionen der Software, z. B. für Macintosh mit Intel-Prozessoren werden angeboten.

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 redfront Interface sowie 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)
REACTEQN	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 der Verschlüsselung der Nutzdaten für große Datenmengen ungeeignet. Eine Kompromisslösung ist das ebenfalls auf `ssh` aufsetzende, im ZIB entwickelte Produkt `dmscp`. Hier geschieht die Sitzungssteuerung und das Übertragen der Metadaten verschlüsselt und die Nutzdaten werden unverschlüsselt übertragen. Eine Reihe von Maßnahmen verhindert das unbemerkte Verändern der Nutzdaten innerhalb des Netzes. Zusätzlich hat `dmscp` eine Reihe von Features, die im Zusammenhang mit Datenmigration stehen, wie Filefragmentierung und die Behandlung 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 Hochleistungsrechnerbereich und an einigen wissenschaftlichen Einrichtungen in den USA genutzt. Im Jahre 2006 wurde insbesondere das Verhalten im Fehlerfall und das Signalhandling überarbeitet und damit die Zuverlässigkeit deutlich erhöht.

Die aktuelle Fassung ist in einem Drittmittelprojekt des ZIB bereits im Produktionseinsatz. Weitere Informationen und die Quellen unter: <http://mss.zib.de/mss>.

**Ansprechpartner:** Manfred Stolle (stolle@zib.de)

## MetaLooper – Framework für die Konfiguration und Durchführung von Batch-experimenten

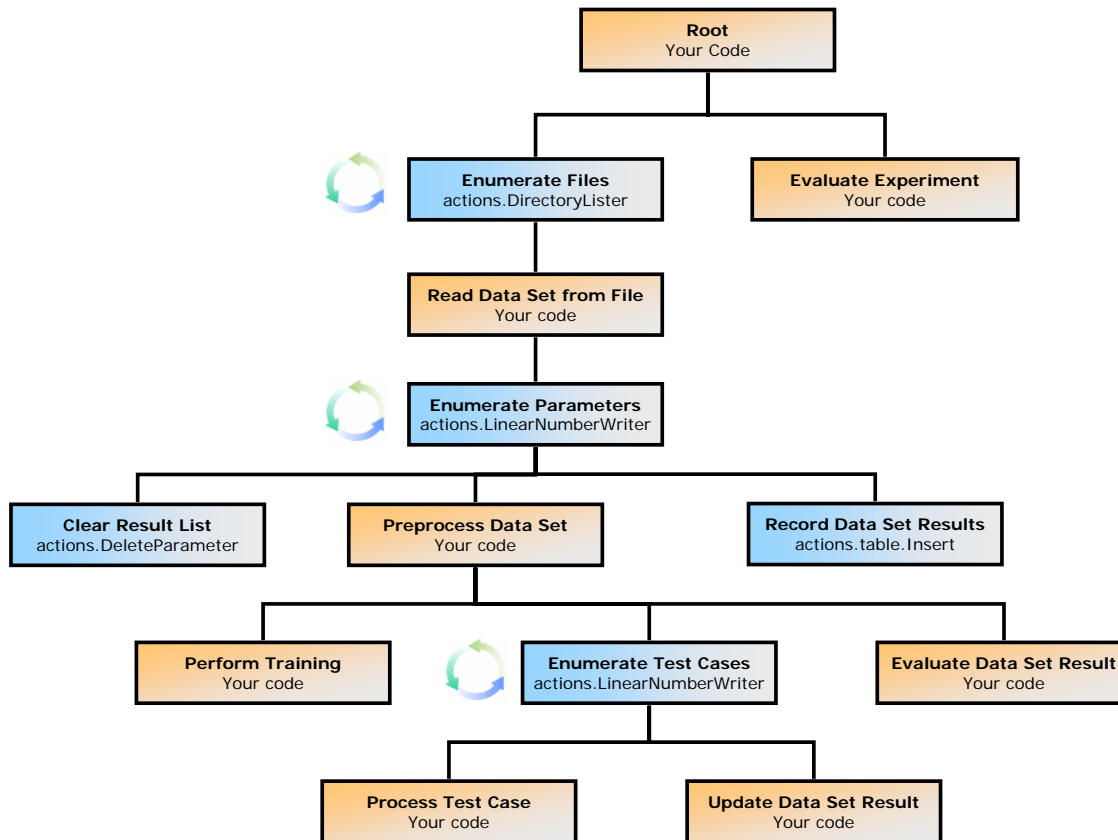


ABBILDUNG 6.1: Beispiel eines Baumes von Codekomponenten, die von MetaLooper ausgeführt werden.

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 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)

### **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 mit 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 unter Verwendung von 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. 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. Aus Demonstrations- und Dokumentationszwecken soll dieser Server 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 4.700 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 knapp 1.500 Personen in die Datenbank eingetragen.

**Ansprechpartner:** Wolfgang Dalitz (dalitz@zib.de)

## Werkzeuge zur Erstellung von Webseiten

Im Rahmen des Math&Industry-Projekts wurden mehrere Software-Tools entwickelt, um Webseiten für Projektbeschreibungen zu erstellen. Neben acht Spezialmodulen für die Beschreibung verschiedener Aspekte eines Projekts, ist dabei insbesondere das Rahmenprogramm WebSiteMaker zu nennen, siehe URL:

[http://www.math-net.org/create\\_website](http://www.math-net.org/create_website), das durch die gesamte Webseitenerstellung führt.

Die MIPM-Module (MIPM = Math&Industry Presentation Maker) und ihre Funktionen:

- MIPMPub – Publikationsbeschreibungen
- MIPMSoftware – Softwarebeschreibungen
- MIPMPers – Erstellung von Homepages von Personen
- MIPMOrg – Erstellung von Homepages von Institutionen und Firmen
- MIPMEvents – Veranstaltungsbeschreibungen
- MIPMLinks – Erstellung von kommentierten Linklisten
- MIPMGlossary – Erstellung von Glossaren der verwendeten Fachbegriffe
- MIPMText – erstellt nicht weiter spezifizierte/strukturierte Seiten

Die einzelnen Module finden sich auf der Homepage des Math&Industry-Projekts <http://www.mathematik-21.de/software/software.shtml>.

**Ansprechpartner:** Robert Roggenbuck (roggenbuck@zib.de), Wolfgang Dalitz (dalitz@zib.de)

## 6.7 KOBV-Dienste

### KOBV-Portal, Digitale Bibliothek des KOBV und KOBV-Server

Der KOBV betreibt ein regionales Internet-Portal mit Zugang zu den Informationsangeboten und Dienstleistungen der beteiligten Bibliotheken und der KOBV-Zentrale:

die digitale Bibliothek des KOBV: <http://digibib.kobv.de/>

Über diese Adresse, die auch als KOBV-Portal bezeichnet wird, sind erreichbar:

- KOBV-Schnellsuche
- KOBV-Metasuche
- Navigation in e-Ressourcen
- Navigation in e-Zeitschriften

sowie weitere Dienste, wie der

KOBV-Volltextserver	<a href="http://volltexte.kobv.de/">http://volltexte.kobv.de/</a>
KOBV-Bibliothekenführer	<a href="http://bibliotheken.kobv.de/">http://bibliotheken.kobv.de/</a>
Verbundkatalog Film	<a href="http://digibib.kobv.de/vkfilm">http://digibib.kobv.de/vkfilm</a>
Verbundkatalog Judaica	<a href="http://digibib.kobv.de/judaica">http://digibib.kobv.de/judaica</a>

In den KOBV selbst, seine Organisationsform, seine Partner und aktuelle Ereignisse im KOBV führt der KOBV-Server ein: <http://www.kobv.de/>

Der KOBV-Server enthält ferner einem Überblick über die Dienste des KOBV und gibt Auskunft über vergangene und aktuelle Ereignisse, über Partner, Gremien und Arbeitsgruppen.

**Ansprechpartner:** KOBV-Zentrale im ZIB ([kobv-zt@zib.de](mailto:kobv-zt@zib.de))



## 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.

### 7.1 Organe

Organe des ZIB sind der Verwaltungsrat und der Präsident.

Der Verwaltungsrat setzte sich im Jahre 2006 wie folgt zusammen:

- Prof. Dr. Hans Jürgen Prömel, HUB, Vorsitzender
- Prof. Dr.-Ing. Klaus Petermann, TUB, stellvertretender Vorsitzender – bis 17.06.2006  
Prof. Dr. Johann Köppel, TUB, stellvertretender Vorsitzender – ab 18.06.2006
- Prof. Dr. Helmut Keupp, FUB
- Bernd Lietzau, Senatsverwaltung für Bildung, Wissenschaft und Forschung  
(vormals Wissenschaft, Forschung und Kultur)
- Ingrid Walther, Senatsverwaltung für Wirtschaft, Technologie und Frauen  
(vormals 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 07. Juli 2006.

Präsident des ZIB ist Prof. Dr. Dr. h.c. Peter Deuffhard.

Als Vizepräsident amtiert Prof. Dr. Dr. h.c. Martin Grötschel.

---

<sup>1</sup><http://www.zib.de/General/Organization/gesetz/index.de.html>

## 7.2 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>.

## 7.3 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 – SNPC GbR, 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
- Dr. Karl-Viktor von Schöning, Berlin
- Dr. Horst D. Simon – NERSC, Lawrence Berkeley, National Laboratory, Berkeley, USA
- Dr.-Ing. Ehrhard Winter – (chem.) E-Plus Mobilfunk GmbH, Düsseldorf

Der Wissenschaftliche Beirat tagte am 26. und 27. Juni 2006 im ZIB.

## 7.4 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. (bis 31.12.2007)

<sup>2</sup><http://www.zib.de/General/Organization/satzung/index.de.html>

- 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.

## 7.5 ZIB-Fellows

Präsident und Vizepräsident vergeben an wenige ausgewählte Wissenschaftler das Konrad-Zuse-Fellowship, in dessen Rahmen im Jahre 2006 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*
- Prof. Dr. Marc Steinbach (Leibniz-Universität Hannover)  
*Optimierung in Energie- und Versorgungswirtschaft*
- Prof. Dr. Markus Wacker (Fachhochschule für Technik und Wirtschaft Dresden)  
*Numerische Textilmodellierung*
- Prof. Dr. Thomas Wolf (Brock University, St. Catharines, Kanada)  
*Symbolische Lösung von Differentialgleichungen und Differentialgleichungssystemen;  
symbolisches Rechnen in der allgemeinen Relativitätstheorie*

## 7.6 Selbstverwaltung

Der Personalrat setzt sich wie folgt zusammen:

Uwe Pöhle (Vorsitzender)  
Marlies Engelke  
Bodo Erdmann  
Hans-Florian Geerdes  
Gabriele Kempf  
Thorsten Koch  
Dirk Krickel

## 7.7 Wirtschaftliche Situation

Die wirtschaftliche Situation des ZIB ist nach wie vor durch die finanzielle Lage des Landes Berlin geprägt – eine Situation, die immer wieder die Substanz des ZIB als einer in der Grundausstattung zu 100 % vom Land finanzierten Einrichtung zu beeinträchtigen droht. Die im Sommer 2003 vereinbarten spürbaren Kürzungen der Gehälter aller Beschäftigten im öffentlichen Dienst des Landes Berlin zeigen das finanzielle Dilemma 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 Drittmiteleinahmen 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.

Der Zuschuss des Landes Berlin im *konsumtiven* Bereich ist für das Jahr 2006 „überrollt“ und in gleicher Höhe wie für 2005 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 Beteiligung aus vom Bund bereitgestellten Geldern – nach erheblichen Problemen der ersten Ausbaustufe Anfang 2007 – endlich gesichert werden konnten, ist mit einer Inbetriebnahme des Rechnersystems zu Beginn des Jahres 2008 zu rechnen. Die Wirtschaftsplanansätze im Jahre 2006 beliefen sich im Aufwand auf insgesamt 12.013,9 T €; davon entfallen auf den konsumtiven Bereich 9.705 T € und auf Investitionen 2.308,6 T €.

Das Land Berlin leistete einen ausgabewirksamen, konsumtiven Zuschuss von 6.817 T € (ohne BRAIN- und KOBV-Anteile). Die Höhe der Drittmiteleinahmen ist – vor Prüfung des Jahresabschlusses – mit 4.627 T € anzusetzen. Damit werden die Drittmiteleinahmen einen Spitzenwert in der Geschichte des ZIB erreichen. Bezogen auf den Wirtschaftsplan 2006 ist ein ausgeglichener Jahresabschluss 2006 zu erwarten.

Die in den letzten Jahren sehr positive Entwicklung der Einnahmen aus Drittmitteln, einem wesentlichen, wenn auch nicht dem einzigen Indikator für die Forschungseffizienz einer wissenschaftlichen Institution, lässt sich anhand der nachstehenden Tabelle (Jahresabschlussrelevante Angaben) ablesen.

	Drittmiteleinnahmen			Zuwendungen des Landes Berlin		Zuwendungen Bund/Dritte T€	Sonstige Einnahmen T€	Einnahmen insgesamt T€
	Wirtschaft/ Industrie T€	öffentliche Mittel T€	insgesamt T€	konsumtiv T€	investiv T€			
1997	1.295	1.330	2.625	7.330	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>1</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	866	2.814	3.680	6.864	574	1.426	197	12.741
2006 <sup>2</sup>	972	3.655	4.627	6.817	435	936	260	13.075

Tabelle 9.1: Einnahmen-Entwicklung  
– ohne BRAIN-Serviceanteil –

Die Entwicklung der Drittmiteleinnahmen in den letzten 10 Jahren – für 2006 voraussichtliche Ist-Zahlen – lässt sich anhand der nachstehenden Grafik darstellen.

<sup>1</sup>Erhöhung des Zuschusses durch bilanztechnische Auswirkungen

<sup>2</sup>voraussichtliches Ist 2006 – vor Prüfung des Jahresabschlusses

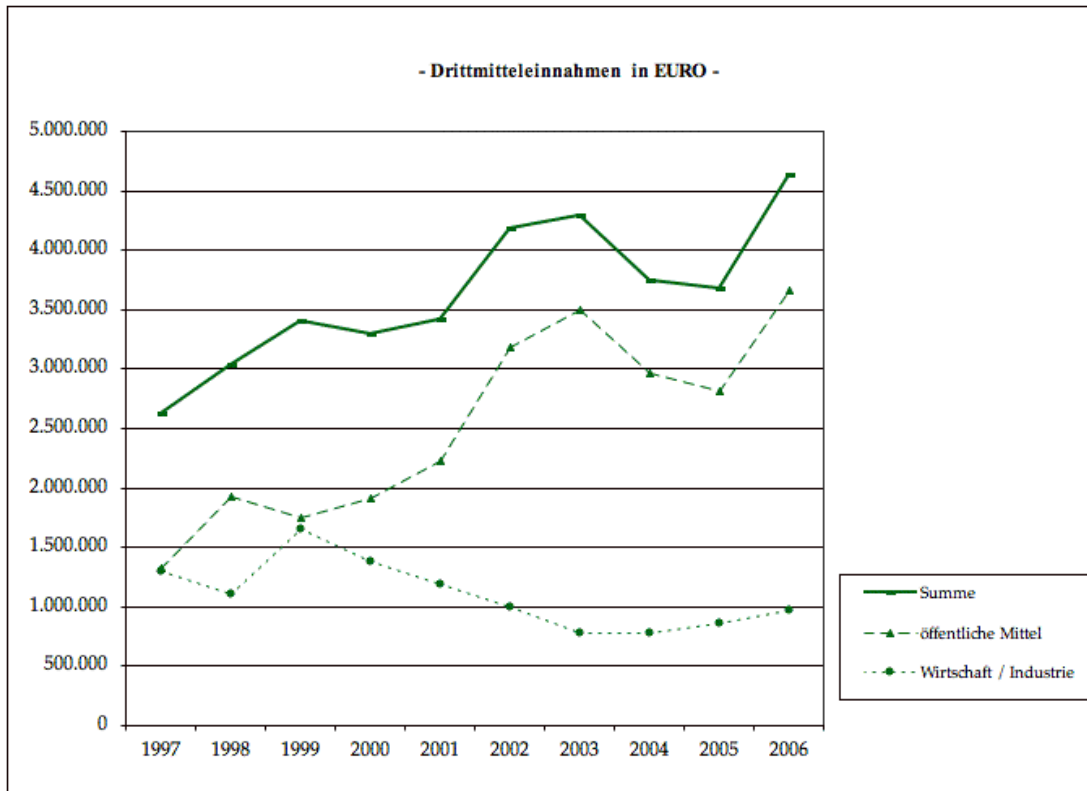


ABBILDUNG 9.1: Drittmittel-Entwicklung

## 7.8 Spin-off-Firmen

Mitarbeiter des ZIB haben in den letzten Jahren die folgenden Firmen gegründet:

- Computing in Technology (CIT) GmbH – 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 GmbH – 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  
Integrierte Softwareumgebungen (Amira etc.), Virtual Reality System Integration  
<http://www.amiravis.com>

- atesio GmbH – 2000  
Entwicklung von Software und Dienstleistung für die Planung, Konfiguration und Optimierung von Telekommunikationsnetzen  
<http://www.atesio.de>
- Löbel, Borndörfer & Weider GbR – 2000  
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>
- onScale solutions GmbH – 2006  
Softwareentwicklung, Beratung und Dienstleistungen für parallele und verteilte Speicher- und Rechnersysteme  
<http://www.onscale.de>

## 7.9 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:

	<b>01.01.2006</b>	<b>01.01.2007</b>
Leitung	4	4
Wissenschaftliches Personal	84	82
Servicepersonal	47	47
KOBV-Zentrale	15	14
Studentische Hilfskräfte	59	45
<b>Insgesamt</b>	<b>209</b>	<b>192</b>

ABBILDUNG 9.2: Personal-Entwicklung

Aus Mitteln des Landes Berlin waren am 01.01.2007 insgesamt 122 Personen am ZIB beschäftigt. Aus Drittmittelprojekten wurden 70 Beschäftigte finanziert.





## KAPITEL 8

### **Ansprechpartner**

Präsident: Prof. Dr. Dr. h.c. Peter Deuffhard  
Inhaber des Lehrstuhls *Scientific Computing*  
am Fachbereich Mathematik und Informatik  
der Freien Universität Berlin  
Tel. (030) 841 85-101

Vizepräsident: Prof. Dr. Dr. h.c. Martin Grötschel  
Inhaber des Lehrstuhls *Diskrete Mathematik*  
am Institut für Mathematik  
der Technischen Universität Berlin  
Tel. (030) 841 85-210

Bereichsleiter  
Computer Science: Prof. Dr. Alexander Reinefeld  
Inhaber des Lehrstuhls *Praktische Informatik*  
am Institut für Informatik  
der Humboldt-Universität zu Berlin  
Tel. (030) 841 85-130

Bereichsleiter  
Verwaltung: Henry Thieme  
Tel. (030) 841 85-100

Numerische Analysis und Modellierung:	Prof. Dr. Dr. h.c. Peter Deuffhard/ Dr. Martin Weiser	841 85-101 841 85-170
Visualisierung & Datenanalyse:	Hans-Christian Hege, Hon.-Prof.	841 85-141
Optimierung:	Prof. Dr. Dr. h.c. Martin Grötschel/ Dr. Ralf Borndörfer	841 85-210 841 85-243
Wissenschaftliche Informationssysteme:	Joachim Lügger	841 85-173
Computer Science Research:	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 A: Übersicht Preprints

**ZIB-Report 06-01.** Susanna Kube; Marcus Weber. *Identification of Metastabilities in Monomolecular Conformation Kinetics.*

**Abstract:** The identification of metastable conformations of molecules plays an important role in computational drug design. One main difficulty is the fact that the underlying dynamic processes take place in high dimensional spaces. Although the restriction of degrees of freedom to a few dihedral angles significantly reduces the complexity of the problem, the existing algorithms are time-consuming. They are based on the approximation of transition probabilities by an extensive sampling of states according to the Boltzmann distribution. We present a method which can identify metastable conformations without sampling the complete distribution. Our algorithm is based on local transition rates and uses only pointwise information about the potential energy surface. In order to apply the cluster algorithm PCCA+, we compute a few eigenvectors of the rate matrix by the Jacobi-Davidson method. Interpolation techniques are applied to approximate the thermodynamical weights of the clusters. The concluding example illustrates our approach for epigallocatechine, a molecule which can be described by seven dihedral angles.

**ZIB-Report 06-02.** Andreas Bley. *Approximability of Unsplittable Shortest Path Routing Problems.*

**Abstract:** In this paper, we discuss the relation of unsplittable shortest path routing (USPR) to other routing schemes and study the approximability of three USPR network planning problems. Given a digraph  $D = (V, A)$  and a set  $K$  of directed commodities, an USPR is a set of flow paths  $\Phi_{(s,t)}$ ,  $(s, t) \in K$ , such that there exists a metric  $\lambda = (\lambda_a) \in \mathbb{Z}_+^A$  with respect to which each  $\Phi_{(s,t)}$  is the unique shortest  $(s, t)$ -path.

In the MIN-CON-USPR problem, we seek for an USPR that minimizes the maximum congestion over all arcs. We show that this problem is hard to approximate within a factor of  $\mathcal{O}(|V|^{1-\epsilon})$ , but easily approximable within  $\min(|A|, |K|)$  in general and within  $\mathcal{O}(1)$  if the underlying graph is an undirected cycle or a bidirected ring. We also construct examples where the minimum congestion that can be obtained by USPR is a factor of  $\Omega(|V|^2)$  larger than that achievable by unsplittable flow routing or by shortest multi-path routing, and a factor of  $\Omega(|V|)$  larger than by unsplittable source-invariant routing. In the CAP-USPR problem, we seek for a minimum cost installation of integer arc capacities that admit an USPR of the given commodities. We prove that this problem is  $\mathcal{NP}$ -hard to approximate within  $2 - \epsilon$  (even in the undirected case), and we devise approximation algorithms for various special cases. The fixed charge network design problem CAP-USPR, where the task is to find a minimum cost subgraph of  $D$  whose fixed arc capacities admit an USPR of the commodities, is shown to be  $\mathcal{NPO}$ -complete.

All three problems are of great practical interest in the planning of telecommunication networks that are based on shortest path routing protocols. Our results indicate that they are harder than the corresponding unsplittable flow or shortest multi-path routing problems.

**ZIB-Report 06-03.** Akiyoshi Shioura. *Note on L#-convex Function Minimization Algorithms: Comparison of Murota's and Kolmogorov's Algorithms.*

**Abstract:** The concept of L#-convexity is introduced by Fujishige-Murota (2000) as a discrete convexity for functions defined over the integer lattice. The main aim of this note is to understand the difference of the two algorithms for L#-convex function minimization: Murota's steepest descent algorithm (2003) and Kolmogorov's primal algorithm (2005).

**ZIB-Report 06-04.** Achim Schädle; Lin Zschiedrich; Sven Burger; Roland Klose; Frank Schmidt. *Domain Decomposition Method for Maxwell's Equations: Scattering off Periodic Structures.*

**Abstract:** We present a domain decomposition approach for the computation of the electromagnetic field within periodic structures. We use a Schwarz method with transparent boundary conditions at the interfaces of the domains. Transparent boundary conditions are approximated by the perfectly matched layer method (PML). To cope with Wood anomalies appearing in periodic structures an adaptive strategy to determine optimal PML parameters is developed.

We focus on the application to typical EUV lithography line masks. Light propagation within the multi-layer stack of the EUV mask is treated analytically. This results in a drastic reduction of the computational costs and allows for the simulation of next generation lithography masks on a standard personal computer.

**ZIB-Report 06-05.** Michael Oevermann; Rupert Klein. *A cartesian grid finite volume method for the solution of the Poisson equation with variable coefficients and embedded interfaces.*

**Abstract:** We present a finite volume method for the solution of the two-dimensional Poisson equation  $\nabla \cdot (\beta(\mathbf{x}) \nabla u(\mathbf{x})) = f(\mathbf{x})$  with variable, discontinuous coefficients and solution discontinuities on irregular domains. The method uses bilinear ansatz functions on Cartesian grids for the solution  $u(\mathbf{x})$  resulting in a compact nine-point stencil. The resulting linear problem has been solved with a standard multigrid solver. Singularities associated with vanishing partial volumes of intersected grid cells or the dual bilinear ansatz itself are removed by a two-step asymptotic approach. The method achieves second order of accuracy in the  $L^\infty$  and  $L^2$  norm.

**ZIB-Report 06-06.** Gary Froyland; Thorsten Koch; Nicole Megow; Emily Duane; Howard Wren. *Optimizing the Landside Operation of a Container Terminal.*

**Abstract:** This paper concerns the problem of operating a landside container exchange area that is serviced by multiple semi-automated rail mounted gantry cranes (RMGs) that are moving on a single bi-directional traveling lane. Such a facility is being built by Patrick Corporation at the Port Botany terminal in Sydney. The gantry cranes are a scarce resource and handle the bulk of container movements. Thus, they require a sophisticated analysis to achieve near optimal utilization. We present a three stage algorithm to manage the container exchange facility, including the scheduling of cranes, the control of associated short-term container stacking, and the allocation of delivery locations for trucks and other container transporters. The key components of our approach are a time scale decomposition, whereby an integer program controls decisions across a long time horizon to produce a balanced plan that is fed to a series of short time scale online subproblems, and a highly efficient space-time divisioning of short term storage areas.

A computational evaluation shows that our heuristic can find effective solutions for the planning problem; on real-world data it yields a solution at most 8% above a lower bound on optimal RMG utilization.

**ZIB-Report 06-07.** Frank H. Lutz. *Enumeration and Random Realization of Triangulated Surfaces.*

**Abstract:** We discuss different approaches for the enumeration of triangulated surfaces. In particular, we enumerate all triangulated surfaces with 9 and 10 vertices. We also show how geometric realizations of orientable surfaces with few vertices can be obtained by choosing coordinates randomly.

**ZIB-Report 06-08.** Frank H. Lutz. *Triangulated Manifolds with Few Vertices: Combinatorial Manifolds.*

**Abstract:** In this survey on combinatorial properties of triangulated manifolds we discuss various lower bounds on the number of vertices of simplicial and combinatorial manifolds. Moreover, we give a list of all known examples of vertex-minimal triangulations.

**ZIB-Report 06-09.** Ekkehard G. Köhler; Frank H. Lutz. *Triangulated Manifolds with Few Vertices: Vertex-Transitive Triangulations I.*

**Abstract:** We describe an algorithm for the enumeration of (candidates of) vertex-transitive combinatorial  $d$ -manifolds. With an implementation of our algorithm, we determine, up to combinatorial equivalence, all combinatorial manifolds with a vertex-transitive automorphism group on  $n \leq 13$  vertices. With the exception of actions of groups of small order, the enumeration is extended to 14 and 15 vertices.

**ZIB-Report 06-10.** Martin Grötschel. *Designing telecommunication networks by integer programming. (Nicht erschienen.)*

**ZIB-Report 06-11.** Péter Csorba; Frank H. Lutz. *Graph Coloring Manifolds.*

**Abstract:** We introduce a new and rich class of graph coloring manifolds via the Hom complex construction of Lovász. The class comprises examples of Stiefel manifolds, series of spheres and products of spheres, cubical surfaces, as well as examples of Seifert manifolds. Asymptotically, graph coloring manifolds provide examples of highly connected, highly symmetric manifolds.

**ZIB-Report 06-12.** Stefan Hougardy; Frank H. Lutz; Mariano Zelke. *Polyhedra of Genus 2 with 10 Vertices and Minimal Coordinates.*

**Abstract:** We give coordinate-minimal geometric realizations in general position of all 865 vertex-minimal triangulations of the orientable surface of genus 2 in the  $4 \times 4 \times 4$ -cube.

**ZIB-Report 06-13.** Stefan Hougardy; Frank H. Lutz; Mariano Zelke. *Polyhedra of Genus 3 with 10 Vertices and Minimal Coordinates.*

**Abstract:** We give coordinate-minimal geometric realizations in general position for 17 of the 20 vertex-minimal triangulations of the orientable surface of genus 3 in the  $5 \times 5 \times 5$ -cube.

**ZIB-Report 06-14.** Frank H. Lutz. *Combinatorial 3-Manifolds with 10 Vertices.*

**Abstract:** We give a complete enumeration of combinatorial 3-manifolds with 10 vertices: There are precisely 247882 triangulated 3-spheres with 10 vertices as well as 518 vertex-minimal triangulations of the sphere product  $S^2 \times S^1$  and 615 triangulations of the twisted sphere product  $S^2 \times S^1$ .

An analysis of the 3-spheres with up to 10 vertices shows that all these spheres are shellable, but that there are 29 vertex-minimal non-shellable 3-balls with 9 vertices.

**ZIB-Report 06-15.** Ralf Hülsermann; Monika Jäger; Arie M. C. A. Koster; Sebastian Orlowski; Roland Wessälly; Adrian Zymolka. *Availability and Cost Based Evaluation of Demand-wise Shared Protection.*

**Abstract:** In this paper, we investigate the connection availabilities for the new protection scheme Demand-wise Shared Protection (DSP) and describe an appropriate approach for their computation. The exemplary case study on two realistic network scenarios shows that in most cases the availabilities for DSP are comparable with that for 1+1 path protection and better than in case of shared path protection.

**ZIB-Report 06-16.** Anton Schiela. *Convergence of the Control Reduced Interior Point Method for PDE Constrained Optimal Control with State Constraints.*

**Abstract:** We propose a variant of the control reduced interior point method for the solution of state constrained problems. We show convergence of the corresponding interior point pathfollowing algorithm in function space. Moreover, we provide error bounds for the iterates.

**ZIB-Report 06-17.** Volker Kaibel; Marc E. Pfetsch. *Packing and Partitioning Orbitopes.*

**Abstract:** We introduce *orbitopes* as the convex hulls of 0/1-matrices that are lexicographically maximal subject to a group acting on the columns. Special cases are packing and partitioning orbitopes, which arise from restrictions to matrices with at most or exactly one 1-entry in each row, respectively. The goal of investigating these polytopes is to gain insight into ways of breaking certain symmetries in integer programs by adding constraints, e.g., for a well-known formulation of the graph coloring problem.

We provide a thorough polyhedral investigation of packing and partitioning orbitopes for the cases in which the group acting on the columns is the cyclic group or the symmetric group. Our main results are complete linear inequality descriptions of these polytopes by facet-defining inequalities. For the cyclic group case, the descriptions turn out to be totally unimodular, while for the symmetric group case, both the description and the proof are more involved. The associated separation problems can be solved in linear time.

**ZIB-Report 06-18.** Isabel Reinecke; Peter Deuffhard. *A Complex Mathematical Model of the Human Menstrual Cycle.*

**Abstract:** This paper aims at presenting the complex coupled network of the human menstrual cycle to the interested community. Beyond the presently popular smaller models, where important network components arise only as extremely simplified source terms, we add: the GnRH pulse generator in the hypothalamus, receptor binding, and the biosynthesis in the ovaries. Simulation and parameter identification are left to a forthcoming paper.

**ZIB-Report 06-19.** Akiyoshi Shioura; Ken'ichiro Tanaka. *Polynomial-Time Algorithms for Linear and Convex Optimization on Jump Systems.*

**Abstract:** The concept of jump system, introduced by Buchet and Cunningham (1995), is a set of integer points with a certain exchange property. In this paper, we discuss several linear and convex optimization problems on jump systems and show that these problems can be solved in polynomial time under the assumption that a membership oracle for a jump system is available. We firstly present a polynomial-time implementation of the greedy algorithm for the minimization of a linear function. We then consider the minimization of a separable-convex function on a jump system, and propose the first polynomial-time algorithm for this problem. The algorithm is based on the domain reduction approach developed in Shioura (1998). We finally consider the concept of M-convex functions on constant-parity jump systems which has been recently proposed by Murota (2006). It is shown that the minimization of an M-convex function can be solved in polynomial time by the domain reduction approach.

**ZIB-Report 06-20.** Stefan Heinz; Volker Kaibel; Matthias Peinhardt; Jörg Rambau; Andreas Tuchscherer. *LP-Based Local Approximation for Markov Decision Problems.*

**Abstract:** The standard computational methods for computing the optimal value functions of Markov Decision Problems (MDP) require the exploration of the entire state space. This is practically infeasible for applications with huge numbers of states as they arise, e.g., from modeling the decisions in online optimization problems by MDPs. Exploiting column generation techniques, we propose and apply an LP-based method to determine an  $\varepsilon$ -approximation of the optimal value function at a given state by

inspecting only states in a small neighborhood. In the context of online optimization problems, we use these methods in order to evaluate the quality of concrete policies with respect to given initial states. Moreover, the tools can also be used to obtain evidence of the impact of single decisions. This way, they can be utilized in the design of policies.

**ZIB-Report 06-21.** Martin Grötschel; Hinrich Hinrichs; Klaus Schröer; Andreas Tuchscherer. *Ein gemischt-ganzzahliges lineares Optimierungsmodell für ein Laserschweißproblem im Karosseriebau.*

Erschienen in: Zeitschrift für wirtschaftlichen Fabrikbetrieb (ZWF) Karosseriebau 101(5/2006) S. 260-264, english Version: *A Mixed Integer Programming Model for a Laser Welding Problem in Car Body Manufacturing.*

**Zusammenfassung:** Wir beschäftigen uns mit dem Problem der Betriebsplanung von Laserschweißrobotern im Karosseriebau. Gegeben ist eine Menge von Schweißnähten, die innerhalb einer Fertigungszelle an einem Karosserieteil gefertigt werden müssen. Die Schweißnähte werden durch mehrere parallel betriebene Roboter bearbeitet. Die Aufgabe besteht darin, für jeden Roboter eine Reihenfolge und eine zeitliche Koordinierung seiner Bewegungen zu finden, so dass alle Schweißnähte innerhalb der Taktzeit der Fertigungszelle bearbeitet werden und so wenig Laserquellen wie möglich eingesetzt werden. Dabei müssen einige Nebenbedingungen berücksichtigt werden. Für dieses spezielle Schweißproblem haben wir eine Formulierung als gemischt-ganzzahliges lineares Programm entwickelt, welches sich für die untersuchten praktischen Fälle sehr schnell lösen lässt.

**ZIB-Report 06-22.** Volker Kaibel; Matthias Peinhardt. *On the Bottleneck Shortest Path Problem.*

**Abstract:** The Bottleneck Shortest Path Problem is a basic problem in network optimization. The goal is to determine the limiting capacity of any path between two specified vertices of the network. This is equivalent to determining the unsplittable maximum flow between the two vertices. In this note we analyze the complexity of the problem, its relation to the Shortest Path Problem, and the impact of the underlying machine/computation model.

**ZIB-Report 06-23.** Tobias Achterberg; Martin Grötschel; Thorsten Koch. *Software for Teaching Modeling of Integer Programming Problems.*

**Abstract:** Modern applications of mathematical programming must take into account a multitude of technical details, business demands, and legal requirements. Teaching the mathematical modeling of such issues and their interrelations requires real-world examples that are well beyond the toy sizes that can be tackled with the student editions of most commercial software packages.

We present a new tool, which is freely available for academic use including complete source code. It consists of an algebraic modeling language and a linear mixed integer programming solver. The performance and features of the tool are in the range of current state-of-the-art commercial tools, though not in all aspects as good as the best ones. Our tool does allow the execution and analysis of large real-world instances in the classroom and can therefore enhance the teaching of problem solving issues.

Teaching experience has been gathered and practical usability was tested in classes at several universities and a two week intensive block course at TU Berlin. The feedback from students and teachers has been very positive.

**ZIB-Report 06-24.** Patrick May; Thomas Steinke. *THESEUS - Protein Structure Prediction at ZIB.*

**Abstract:** THESEUS, the ZIB threading environment, is a parallel implementation of a protein threading based on a multi-queued branch-and-bound optimal search algorithm to find the best sequence-to-structure alignment through a library of template structures. THESEUS uses a template core model based on secondary structure definition and a scoring function based on knowledge-based potentials reflecting pairwise interactions and the chemical environment, as well as pseudo energies for homology detection, loop alignment, and secondary structure matching. The threading core is implemented in C++ as a SPMD parallization architecture using MPI for communication. The environment is designed for generic testing of different scoring functions, e.g. different secondary structure prediction terms, different scoring matrices and information derived from multiple sequence alignments. A validation of the structure prediction results has been done on the basis of standard threading benchmark sets. THESEUS successfully participated in the 6th Critical Assessment of Techniques for Protein Structure Prediction (CASP) 2004.

**ZIB-Report 06-25.** Andreas Brandt; Manfred Brandt. *On the stability of the multi-queue multi-server processor sharing with limited service.*

**Abstract:** We consider a multi-queue multi-server system with  $n$  servers (processors) and  $m$  queues. At the system there arrives a stationary and ergodic stream of  $m$  different types of requests with service requirements which are served according to the following  $k$ -limited head of the line processor sharing

discipline: The first  $k$  requests at the head of the  $m$  queues are served in processor sharing by the  $n$  processors, where each request may receive at most the capacity of one processor. By means of sample path analysis and Loynes' monotonicity method, a stationary and ergodic state process is constructed, and a necessary as well as a sufficient condition for the stability of the  $m$  separate queues are given, which are tight within the class of all stationary ergodic inputs. These conditions lead to tight necessary and sufficient conditions for the whole system, also in case of permanent customers, generalizing an earlier result by the authors for the case of  $n=k=1$ .

**ZIB-Report 06-26.** Lionel Walter; Marcus Weber. **ConfJump** : *a fast biomolecular sampling method which drills tunnels through high mountains.*

**Abstract:** In order to compute the thermodynamic weights of the different metastable conformations of a molecule, we want to approximate the molecule's Boltzmann distribution in a reasonable time. This is an essential issue in computational drug design. The energy landscape of active biomolecules is generally very rough with a lot of high barriers and low regions. Many of the algorithms that perform such samplings (e.g. the hybrid Monte Carlo method) have difficulties with such landscapes. They are trapped in low-energy regions for a very long time and cannot overcome high barriers. Moving from one low-energy region to another is a very rare event. For these reasons, the distribution of the generated sampling points converges very slowly against the thermodynamically correct distribution of the molecule.

The idea of ConfJump is to use *a priori* knowledge of the localization of low-energy regions to enhance the sampling with artificial jumps between these low-energy regions. The artificial jumps are combined with the hybrid Monte Carlo method. This allows the computation of some dynamical properties of the molecule. In ConfJump, the detailed balance condition is satisfied and the mathematically correct molecular distribution is sampled.

**ZIB-Report 06-27.** Tobias Harks; Stefan Heinz; Marc. E. Pfetsch. *Competitive Online Multicommodity Routing.*

Appeared in: T. Erlebach and C. Kaklamani (eds.) Approximation and Online Algorithms (WAOA 2006). LNCS 4368, pp. 240-252, 2007

**Abstract:** We study online multicommodity minimum cost routing problems in networks, where commodities have to be routed sequentially. Arcs are equipped with load dependent price functions defining the routing weights. We discuss an online algorithm that routes each commodity by minimizing a convex cost function that depends on the demands that are previously routed. We present a competitive analysis of this algorithm showing that for affine linear price functions this algorithm is  $4K/2 + K$ -competitive, where  $K$  is the number of commodities. For the parallel arc case this algorithm is optimal. Without restrictions on the price functions and network, no algorithm is competitive. Finally, we investigate a variant in which the demands have to be routed unsplitably.

**ZIB-Report 06-28.** Volker Kaibel; Thorsten Koch. *Mathematik für den Volkssport.*

Ersch. in: Mitteilungen der DMV 14 Nr. 2 (2006) 93-96

**Zusammenfassung:** „Volkssport Sudoku“ titelt der Stern in seiner Ausgabe vom 24. Mai 2006. In der Tat traut sich derzeit kaum noch eine Zeitung, ohne Sudoku zu erscheinen. Die Begeisterung am Lösen dieser Zahlenrätsel offenbart eine unvermutete Freude am algorithmischen Arbeiten. Mathematisch kann man Sudokus als lineare diophantische Gleichungssysteme mit Nichtnegativitätsbedingungen formulieren. Solche ganzzahligen linearen Programme sind die wichtigsten Modellierungswerkzeuge in zahlreichen Anwendungsgebieten wie z. B. der Optimierung von Telekommunikations- und Verkehrsnetzen. Moderne Verfahren zur Lösung dieser Optimierungsprobleme sind durch Sudokus allerdings deutlich weniger zu beeindrucken als Zeitungsleser.

**ZIB-Report 06-29.** Nadine Abboud; Martin Grötschel; Thorsten Koch. *Mathematical Methods for Physical Layout of Printed Circuit Boards: An Overview.*

**Abstract:** This article surveys mathematical models and methods used for physical PCB layout, i.e., component placement and wire routing. The main concepts are briefly described together with relevant references.

**ZIB-Report 06-30.** Arie M. C. A. Koster; Annegret K. Wagler. *The extreme points of QSTAB( $G$ ) and its implications.*

**Abstract:** Perfect graphs constitute a well-studied graph class with a rich structure, reflected by many characterizations w.r.t different concepts. Perfect graphs are, e.g., characterized as precisely those graphs  $G$  where the stable set polytope  $\text{STAB}(G)$  coincides with the clique constraint stable set polytope  $\text{QSTAB}(G)$ . For all imperfect graphs  $\text{STAB}(G) \subset \text{QSTAB}(G)$  holds and, therefore, it is natural to measure imperfection in terms of the difference between  $\text{STAB}(G)$  and  $\text{QSTAB}(G)$ . Several concepts

have been developed in this direction, for instance the dilation ratio of  $\text{STAB}(G)$  and  $\text{QSTAB}(G)$  which is equivalent to the imperfection ratio  $\text{imp}(G)$  of  $G$ . To determine  $\text{imp}(G)$ , both knowledge on the facets of  $\text{STAB}(G)$  and the extreme points of  $\text{QSTAB}(G)$  is required.

The anti-blocking theory of polyhedra yields all *dominating* extreme points of  $\text{QSTAB}(G)$ , provided a complete description of the facets of  $\text{STAB}(\overline{G})$  is known. As this is typically not the case, we extend the result on anti-blocking polyhedra to a *complete* characterization of the extreme points of  $\text{QSTAB}(G)$  by establishing a 1-1 correspondence to the facet-defining subgraphs of  $\overline{G}$ . We discuss several consequences, in particular, we give alternative proofs of several famous results.

**ZIB-Report 06-31.** Holger Meyer; Sebastian Moll; Frank Cordes; Marcus Weber. *ConFlow? A new space-based Application for complete Conformational Analysis of Molecules.*

**Abstract:** Biochemical interactions are determined by the 3D-structure of the involved components – thus the identification of conformations is a key for many applications in rational drug design. ConFlow is a new multilevel approach to conformational analysis with main focus on completeness in investigation of conformational space.

In contrast to known conformational analysis, the starting point for design is a space-based description of conformational areas. A tight integration of sampling and analysis leads to an identification of conformational areas simultaneously during sampling. An incremental decomposition of high-dimensional conformational space is used to guide the analysis. A new concept for the description of conformations and their path connected components based on convex hulls and *Hypercubes* is developed. The first results of the ConFlow application constitute a 'proof of concept' and are further more highly encouraging. In comparison to conventional industrial applications, ConFlow achieves higher accuracy and a specified degree of completeness with comparable effort.

**ZIB-Report 06-32.** Hans L. Bodlaender; Fedor V. Fomin; Arie M. C. A. Koster; Dieter Kratsch; Dimitrios M. Thilikos. *On exact algorithms for treewidth.*

**Abstract:** We give experimental and theoretical results on the problem of computing the treewidth of a graph by exact exponential time algorithms using exponential space or using only polynomial space. We first report on an implementation of a dynamic programming algorithm for computing the treewidth of a graph with running time  $O^*(2^n)$ . This algorithm is based on the old dynamic programming method introduced by Held and Karp for the TRAVELING SALESMAN problem. We use some optimizations that do not affect the worst case running time but improve on the running time on actual instances and can be seen to be practical for small instances. However, our experiments show that the space used by the algorithm is an important factor to what input sizes the algorithm is effective. For this purpose, we settle the problem of computing treewidth under the restriction that the space used is only polynomial. In this direction we give a simple  $O^*(4^n)$  algorithm that requires *polynomial* space. We also show that with a more complicated algorithm, using balanced separators, TREEWIDTH can be computed in  $O^*(2.9512^n)$  time and polynomial space.

**ZIB-Report 06-33.** Nicht erschienen.

**ZIB-Report 06-34.** Andres Imhof. *RSWK/SWD und Faceted Browsing: neue Möglichkeiten einer inhaltlich-intuitiven Navigation.*

**Zusammenfassung:** Das deutschsprachige Bibliothekswesen verfügt mit den „Regeln für den Schlagwortkatalog“ (RSWK) unter Verwendung der „Schlagwortnormdatei“ (SWD) über ein Instrumentarium, welches zusammen mit einem „Faceted Browsing“ das bisher bestehende Angebot für ein Information Retrieval optimal ergänzen kann. Die Verbindung zwischen Standardvokabular (SWD) und Kettenbildung (RSWK) einerseits und eine nach Facetten-Eigenschaften gegliederte Navigation andererseits unterstützt bestmöglich eine inhaltlich bezogene Recherche. Die Stärken und Schwächen der RSWK/SWD werden erörtert und auch Klassifikationen (DDC und RVK) als mögliche Facetten diskutiert.

**ZIB-Report 06-35.** Susanna Kube; Marcus Weber. *Coarse Grained Molecular Kinetics.*

**Abstract:** The dynamic behavior of molecules can often be described by Markov processes. From computational molecular simulations one can derive transition rates or transition probabilities between subsets of the discretized conformational space. On the basis of this dynamic information, the spatial subsets are combined into a small number of so-called metastable molecular conformations. This is done by clustering methods like the Robust Perron Cluster Analysis (PCCA+). Up to now it is an open question how this coarse graining in space can be transformed to a coarse graining of the Markov chain while preserving the essential dynamic information. In the following article we aim at a consistent coarse graining of transition probabilities or rates on the basis of metastable conformations such that important physical and mathematical relations are preserved. This approach is new because PCCA+



computes molecular conformations as linear combinations of the dominant eigenvectors of the transition matrix which does not hold for other clustering methods.

**ZIB-Report 06-36.** Ingrid Daubechies; Gerd Teschke; Luminita Vese. *Iteratively Solving Linear Inverse Problems under General Convex Constraints.*

**Abstract:** We consider linear inverse problems where the solution is assumed to fulfill some general homogeneous convex constraint. We develop an algorithm that amounts to a projected Landweber iteration and that provides an iterative approach to the solution of this inverse problem. For relatively moderate assumptions on the constraint we can always prove weak convergence of the iterative scheme. In certain cases, i.e. for special families of convex constraints, weak convergence implies norm convergence. The presented approach covers a wide range of problems, e.g. Besov- or BV-restoration for which we present also numerical experiments in the context of image processing.

**ZIB-Report 06-37.** Bodo Erdmann; Jens Lang; Sebastian Matera; Krzysztof Wilmański. *Adaptive Linearly Implicit Methods for Linear Poroelastic Equations.*

**Abstract:** Adaptive numerical methods in time and space are introduced and studied for linear poroelastic models in two and three space dimensions.

We present equivalent models for linear poroelasticity and choose both the *displacement-pressure* and the *stress-pressure* formulation for our computations. Their discretizations are provided by means of linearly implicit schemes in time and linear finite elements in space. Our concept of adaptivity opens a way to a fast and reliable simulation of different loading cases defined by corresponding boundary conditions.

We present some examples using our code *Kardos* and show that the method works efficiently. In particular, it could be used in the simulation of some bone healing models.

**ZIB-Report 06-38.** Rüdiger Stephan. *Facets of the  $(s, t)$ - $p$ -path polytope.*

**Abstract:** We give a partial description of the  $(s, t)$ - $p$ -path polytope of a directed graph  $D$  which is the convex hull of the incidence vectors of simple directed  $(s, t)$ -paths in  $D$  of length  $p$ . First, we point out how the  $(s, t)$ - $p$ -path polytope is located in the family of path and cycle polyhedra. Next, we give some classes of valid inequalities which are very similar to inequalities which are valid for the  $p$ -cycle polytope, that is, the convex hull of the incidence vectors of simple cycles of length  $p$  in  $D$ . We give necessary and sufficient conditions for these inequalities to be facet defining. Furthermore, we consider a class of inequalities that has been identified to be valid for  $(s, t)$ -paths of cardinality at most  $p$ . Finally, we transfer the results to related polytopes, in particular, the undirected counterpart of the  $(s, t)$ - $p$ -path polytope.

**ZIB-Report 06-39.** Marcus Weber; Susanna Kube; Lionel Walter; Peter Deuffhard. *Stable computation of probability densities for metastable dynamical systems.*

**Abstract:** Whenever the invariant stationary density of metastable dynamical systems decomposes into almost invariant partial densities, its computation as eigenvector of some transition probability matrix is an ill-conditioned problem. In order to avoid this computational difficulty, we suggest to apply an aggregation/disaggregation method which only addresses wellconditioned sub-problems and thus results in a stable algorithm. In contrast to existing methods, the aggregation step is done via a sampling algorithm which covers only small patches of the sampling space. Finally, the theoretical analysis is illustrated by two biomolecular examples.

**ZIB-Report 06-40.** Joachim Lügger. *Neustart für Bibliotheken ins Informationszeitalter.*

Erschienen in: ABI-Technik 26, ISSN 0720-6763, Heft 2/2006, S. 94-104

**Zusammenfassung:** Wir erleben zu Beginn des aufkommenden Informationszeitalters mit dem Siegeszug von Google und anderen Internet-Technologien einen Wandel im Verhalten von Wissenschaftlern und Studenten, der mit dem Einsatz von *Google Scholar* und *Google Book Search* einen Paradigmenwechsel für Bibliotheken und Informationsversorger gleichkommt. Der Artikel untersucht die technischen Hintergründe für den Erfolg dieser besonderen Art des Information Retrievals: Fulltext Indexing und Citation Ranking als besondere Form des Information Mining. Er diskutiert Stärken und auch Schwächen des Google-Ansatzes. Der Autor stellt sich auch der Frage, unter welchen Bedingungen es möglich ist, ein zu *Google Scholar* und der *Google Book Search* konkurrenzfähiges Retrieval in der Landschaft der Bibliotheken und Bibliotheksverbände zu errichten. Die These ist, dass dieses unter Einsatz des *Open Source* Indexierers *Lucene* und des Web-Robots *Nutch* möglich ist. Bibliotheken können durch gezielten Einsatz solcher Internet-Technologien dem Nutzer die Leistungen, die Google uns mit seinen Tools im *Visible Web* und mit Referenzen auf *Citations* in der Welt der Literatur zur Verfügung stellt, in vergleichbarer Art auch für ihre eigenen durch Lizenzen geschützten digitalen Journale und ihre speziellen lokal verfügbaren Ressourcen anbieten, auf die Internet-Suchmaschinen keinen Zugriff haben. Es

besteht die Hoffnung, dass Nutzer dann nicht – wie in einer kürzlichen Studie des OCLC konstatiert – überwiegend im Internet bleiben, sondern bei ihrer Suche auch den Weg zu den Angeboten der örtlichen Bibliothek attraktiv finden.

**ZIB-Report 06-41.** Anton Schiela. *A continuity result for Nemyckii Operators and some applications in PDE constrained optimal control.*

**Abstract:** This work explores two applications of a classical result on the continuity of Nemyckii operators to optimal control with PDEs. First, we present an alternative approach to the analysis of Newton’s method for function space problems involving semi-smooth Nemyckii operators. A concise proof for superlinear convergence is presented, and sharpened bounds on the rate of convergence are derived. Second, we derive second order sufficient conditions for problems, where the underlying PDE has poor regularity properties. We point out that the analytical structure in both topics is essentially the same.

**ZIB-Report 06-42.** Peter Deuffhard; Rolf Krause; Susanne Ertel. *A Contact-Stabilized Newmark Method for Dynamical Contact Problems.*

**Abstract:** The numerical integration of dynamical contact problems often leads to instabilities at contact boundaries caused by the non-penetration condition between bodies in contact. Even a recent energy dissipative modification due to Kane et al. (1999), which discretizes the non-penetration constraints implicitly, is not able to circumvent artificial oscillations. For this reason, the present paper suggests a contact stabilization which avoids artificial oscillations at contact interfaces and is also energy dissipative. The key idea of this contact stabilization is an additional  $L^2$ -projection at contact interfaces, which can easily be added to any existing time integration scheme. In case of a lumped mass matrix, this projection can be carried out completely locally, thus creating only negligible additional numerical cost. For the new scheme, an elementary analysis is given, which is confirmed by numerical findings in an illustrative test example (Hertzian two body contact).

**ZIB-Report 06-43.** Tobias Harks. *Nash Equilibria in Online Sequential Routing Games. (revised Version Jan07) (Original Version Oct06 under the title: On the Efficiency of Equilibria in Sequential Nonatomic Routing Games.)*

**Abstract:** In this paper, we study the efficiency of Nash equilibria for a sequence of nonatomic routing games. We assume that the games are played consecutively in time in an online fashion: by the time of playing game  $i$ , future games  $i + 1, \dots, n$  are not known, and, once players of game  $i$  are in equilibrium, their corresponding strategies and costs remain fixed. Given a sequence of games, the cost for the sequence of Nash equilibria is defined as the sum of the cost of each game. We analyze the efficiency of a sequence of Nash equilibria in terms of competitive analysis arising in the online optimization field. Our main result states that the online algorithm *SeqNash* consisting of the sequence of Nash equilibria is  $\frac{4n}{2+n}$ -competitive for affine linear latency functions. For  $n = 1$ , this result contains the bound on the price of anarchy of  $\frac{4}{3}$  for affine linear latency functions of Roughgarden and Tardos [2002] as a special case. Furthermore, we analyze a problem variant with a modified cost function that reflects the total congestion cost, when all games have been played. In this case, we prove an upper bound of  $\frac{4n}{2+n}$  on the competitive ratio of *SeqNash*. We further prove a lower bound of  $\frac{3n-2}{n}$  of *SeqNash* showing that for  $n = 2$  our upper bound is tight.

**ZIB-Report 06-44.** Patrick May; Markus Bauer; Christian Köberle; Gunnar Klau. *A computational approach to microRNA detection.* RNA have been discovered that were previously thought of being carried out by proteins alone. One of the most striking discoveries was the detection of microRNAs, a class of noncoding RNAs that play an important role in post-transcriptional gene regulation. Large-scale analyses are needed for the still increasingly growing amount of sequence data derived from new experimental technologies. In this paper we present a framework for the detection of the distinctive precursor structure of microRNAs that is based on the well-known Smith-Waterman algorithm and various filtering steps. We conducted experiments on real genomic data and we found several new putative hits for microRNA precursor structures.

**ZIB-Report 06-45.** María López-Fernández; Christian Lubich; Achim Schädle. *Adaptive, Fast and Oblivious Convolution in Evolution Equations with Memory.*

**Abstract:** To approximate convolutions which occur in evolution equations with memory terms, a variable-stepsize algorithm is presented for which advancing  $N$  steps requires only  $O(N \log N)$  operations and  $O(\log N)$  active memory, in place of  $O(N^2)$  operations and  $O(N)$  memory for a direct implementation. A basic feature of the fast algorithm is the reduction, via contour integral representations, to differential equations which are solved numerically with adaptive step sizes. Rather than the kernel itself, its Laplace transform is used in the algorithm. The algorithm is illustrated on three

examples: a blow-up example originating from a Schrödinger equation with concentrated nonlinearity, chemical reactions with inhibited diffusion, and viscoelasticity with a fractional order constitutive law.

**ZIB-Report 06-46.** Andreas Brandt; Manfred Brandt. *Waiting times for  $M/M$  systems under generalized processor sharing.*

**Abstract:** We consider a system where the arrivals form a Poisson process and the required service times of the requests are exponentially distributed. According to the generalized processor sharing discipline, each request in the system receives a fraction of the capacity of one processor which depends on the actual number of requests in the system. We derive systems of ordinary differential equations for the LST and for the moments of the conditional waiting time of a request with given required service time as well as a stable and fast recursive algorithm for the LST of the second moment of the conditional waiting time, which in particular yields the second moment of the unconditional waiting time. Moreover, asymptotically tight upper bounds for the moments of the conditional waiting time are given. The presented numerical results for the first two moments of the sojourn times in the  $M/M/m - PS$  system show that the proposed algorithms work well.

**ZIB-Report 06-47.** Sebastian Orlowski; Arie M. C. A. Koster; Christian Raack; Roland Wessäly. *Two-layer Network Design by Branch-and-Cut featuring MIP-based Heuristics.*

**Abstract:** This paper deals with MIP-based primal heuristics to be used within a branch-and-cut approach for solving multi-layer telecommunication network design problems. Based on a mixed-integer programming formulation for two network layers, we present three heuristics for solving important subproblems, two of which solve a sub-MIP. On multi-layer planning instances with many parallel logical links, we show the effectiveness of our heuristics in finding good solutions early in the branch-and-cut search tree.

**ZIB-Report 06-48.** Volker Kaibel; Matthias Peinhardt; Marc E. Pfetsch. *Orbitopal Fixing.*

**Abstract:** The topic of this paper are integer programming models in which a subset of 0/1-variables encode a partitioning of a set of objects into disjoint subsets. Such models can be surprisingly hard to solve by branch-and-cut algorithms if the permutation of the subsets of the partition is irrelevant. This kind of symmetry unnecessarily blows up the branch-and-cut tree.

We present a general tool, called orbitopal fixing, for enhancing the capabilities of branch-and-cut algorithms in solving this kind of symmetric integer programming models. We devise a linear time algorithm that, applied at each node of the branch-and-cut tree, removes redundant parts of the tree produced by the above mentioned permutations. The method relies on certain polyhedra, called orbitopes, which have been investigated in (Kaibel and Pfetsch (2006)). However, it does not add inequalities to the model, and thus, it does not increase the difficulty of solving the linear programming relaxations. We demonstrate the computational power of orbitopal fixing at the example of a graph partitioning problem motivated from frequency planning in mobile telecommunication networks.

**ZIB-Report 06-49.** Peter Deuffhard; Bodo Erdmann; Rainer Roitzsch; Glenn Terje Lines. *Adaptive Finite Element Simulation of Ventricular Fibrillation Dynamics.*

**Abstract:** The dynamics of ventricular fibrillation caused by irregular excitation is simulated in the frame of the monodomain model with an action potential model due to Aliev-Panfilov for a human 3D geometry. The numerical solution of this multiscale reaction-diffusion problem is attacked by algorithms which are fully adaptive in both space and time (code library KARDOS). The obtained results clearly demonstrate an accurate resolution of the cardiac potential during the excitation and the plateau phases (in the regular cycle) as well as after a reentrant excitation (in the irregular cycle).



## Anhang B: Vorträge und Lehrveranstaltungen von ZIB-Mitarbeitern

### B1: Vorträge und Gastaufenthalte

#### Tobias Achterberg

- 03.02.2006** *Chip Verification with Constraint Integer Programming*  
ILOG Annual Meeting, Cannes, Frankreich
- 03.02.2006** *SCIP – Solving Constraint Integer Programs*  
ILOG Annual Meeting, Cannes, Frankreich
- 03.02.2006** *Improving the Feasibility Pump*  
ILOG Annual Meeting, Cannes, Frankreich
- 15.02.2006** *Numerics in Integer Programming*  
MATHEON Workshop „Numerik des Simplexverfahrens und in der Optimierung“, TU Berlin
- 01.03.2006** *Chip Verification with Constraint Integer Programming*  
Mosek, Kopenhagen, Dänemark
- 01.03.2006** *SCIP – Solving Constraint Integer Programs*  
Mosek, Kopenhagen, Dänemark
- 02.08.2006** *Conflict Analysis in Mixed Integer Programming*  
ISMP 2006, Rio de Janeiro, Brasilien
- 20.09.2006** *Combining IP, CP and SAT Techniques to Solve Chip Verification Problems*  
Centre de Recherches Mathématiques, Montreal, Kanada
- 06.11.2006** *Cutting Planes in SCIP*  
INFORMS 2006, Pittsburgh, USA

#### Artur Andrzejak

- 20.04.2006** *Machine Learning for Modeling and Prediction of Complex Systems Behavior: A Tourist's Guide*  
Department of Computer Science, University of Coimbra, Portugal
- 20.11.2006** *Machine Learning and Modeling Methods for Adaptive System Management*  
SELFMAN Meeting, INRIA Grenoble, Frankreich
- 28.11.2006** *Deterministic Models of Software Aging and Optimal Rejuvenation Schedules*  
CoreGRID WP4 Meeting, INRIA Sophia-Antipolis, Frankreich

#### Daniel Baum

- 27.09.2006** *A Point-Matching Based Algorithm for 3D Surface Alignment of Drug-Sized Molecules*  
Computational-Life-Science-Konferenz, Cambridge, Vereinigtes Königreich
- 29.9.2006** *Visualization in Computational Life Science — Methods and Applications, Sprecher: Hans-Christian Hege*  
Plenarvortrag, Second International Symposium on Computational Life Sciences, Cambridge, Vereinigtes Königreich

#### Wolfgang Baumann

- 17.02.2006** *Part I: High Performance Computing - German High-Performance Computer Center North (HLRN); Part II: CFD projects at HLRN*  
“Seminar on 3D CFD 2006“ Polish Academy of Science, Subsection Computational Fluid Dynamics, Poznan University of Technology, Polen

## Andreas Bley

- 12.01.2006** *Design of Capacitated Networks with Unsplittable Shortest Path Routing*  
10th Aussois Workshop on Combinatorial Optimization, Aussois, Frankreich
- 06.03.2006** *Models and Algorithms for IP Network Optimization*  
3rd International Conference on High Performance Scientific Computing, Hanoi, Vietnam
- 16.03.2006** *Optimization for the German Research Network: Location Planning and Traffic Engineering*  
University of Science, Ho-Chi-Minh-Stadt, Vietnam
- 11.05.2006** *Congestion Minimization for Unsplittable Shortest Path Routing*  
Joint COFIN MATHEON Workshop on Advances in Telecommunication Networks Optimization, Villa Vigoni, Italien
- 31.07.2006** *Unsplittable shortest path routing: Complexity and Algorithms*  
19th International Symposium on Mathematical Programming, Rio de Janeiro, Brasilien
- 09.11.2006** *Auslegung heterogener Kommunikationsnetze nach Performance und Wirtschaftlichkeit*  
11. Kasseler Symposium Energie-Systemtechnik, Institut für Solare Energieversorgungstechnik e.V., Kassel
- 20.11.2006** *Solving Unsplittable Shortest Path Routing Problems*  
University of New South Wales, Sydney, Australien
- 18.9.2006–22.12.2006**  
Gastaufenthalt an der University of Melbourne, Australien

## Ralf Borndörfer

- 30.01.2006** *Optimization Problems in Public Transport*  
Kolloquium, Universität Darmstadt
- 02.02.2006** *Optimizing Public Transport*  
MATHEON-Workshop Deutsch-Chilenische Zusammenarbeit, TU Berlin
- 20.02.2006** *Optimierung*  
IVU-Public-Transport-Anwenderforum, Hilton Berlin
- 02.03.2006** *Mathematical Methods for Pairing Optimization*  
Workshop über Pairing Optimization, Lufthansa Systems Berlin GmbH, Berlin
- 05.04.2006** *Umlaufplanungsprobleme im Nah- und Bahnverkehr*  
IVU Traffic Technologies AG, Berlin
- 24.04.2006** *Mathematische Optimierung im Nahverkehr*  
Workshop über Dienstoptimierung, IVU Traffic Technologies AG, Berlin
- 02.05.2006** *Optimizing Public Transport*  
Workshop on Public Transport in Santiago de Chile, ZIB, Berlin
- 04.05.2006** *Strategische Planung im Nahverkehr*  
Workshop über Strategische Planung im Nahverkehr, ViP Verkehrsbetrieb in Potsdam GmbH, Berlin
- 08.05.2006** *Aktuelle Entwicklungen der mathematischen Optimierung*  
2. PSYRUS-Anwendertagung, DB Stadtverkehr GmbH, Kassel
- 22.06.2006** *Mathematische Grundlagen der Dienstplanoptimierung*  
VL Innovative Verfahren der Betriebssteuerung in Bahnverkehr und ÖPNV, TU Dresden
- 18.07.2006** *Integrierte Umlauf- und Dienstplanoptimierung*  
IVU Traffic Technologies AG, Berlin
- 25.07.2006** *Optimal Rail Track Allocation*  
X Encuentro de Matemática y sus Aplicaciones, EPN Quito, Ecuador
- 03.08.2006** *Line Planning in Public Transit*  
19th International Symposium on Mathematical Programming, Rio de Janeiro, Brasilien
- 08.08.2006** *Strategic Planning in Public Transport*  
Double Workshop on Transport and Sustainable Cities, CMM, Santiago de Chile, Chile
- 31.08.2006** *Mathematische Optimierung im ÖPNV*  
IVU-Entwicklerkonferenz 2006, Bildungszentrum Erkner
- 06.09.2006** *Rapid Branching for 0/1 Integer Programs and Applications in Public Transit*  
Symposium on Operations Research 2006, Karlsruhe

- 14.09.2006** *Directions in Railway and Public Transport Optimization*  
ATMOS 2006, Zürich, Schweiz
- 27.09.2006** *Line Planning*  
ARRIVAL/MATHEON Fall School on Timetabling and Line Planning, Dabendorf
- 29.09.2006** *Railway Slot Auctioning*  
ARRIVAL/MATHEON Fall School on Timetabling and Line Planning, Dabendorf
- 03.10.2006** *Mathematical Methods of Combinatorial Optimization*  
INFRA TRAIN Autumn School 2006, TU Berlin
- 03.10.2006** *Optimization in Traffic and Transport*  
INFRA TRAIN Autumn School 2006, TU Berlin
- 12.10.2006** *Optimization in Traffic and Transport*  
Fachgespräch Struktur, Arbeitsweise und innovative Vorhaben im Bereich Verkehr & Mobilität,  
Forschungs- und Anwendungsverbund Verkehrssystemtechnik, Berlin
- 22.11.2006** *Vehicle and Crew Scheduling Problems*  
MATHEON-Workshop mit BHP Billiton, ZIB, Berlin
- 22.11.2006** *Strategic Planning Problems*  
MATHEON-Workshop mit BHP Billiton, ZIB, Berlin
- 12.12.2006** *Vehicle & Track Scheduling*  
MATHEON-Workshop mit DB Systems, TU Berlin
- 16.12.2006** *Mathematische Methoden für die Planung & den Betrieb BBI*  
High-Level-Expertentreffen „Idealer Flughafen der Zukunft 8“, Forschungs- und Anwendungsverbund  
Verkehrssystemtechnik Berlin/Technologiestiftung Berlin
- 21.12.2006** *Traffic & Transport*  
Optimierungstag, ZIB, Berlin

### Manfred Brandt

- 08.09.2006** *A sample path relation for the sojourn times in  $G/G/1$ -PS systems and its applications*  
Operations Research 2006, Karlsruhe

### Sven Burger

- 23.03.2006** *Numerical investigation of nano-optical materials and components using finite-element methods*  
Laser Optik Berlin (LOB 2006)
- 03.04.2006** *Advanced FEM Analysis of Nano-Optical Devices (invited)*  
Photonics Europe, Straßburg
- 07.07.2006** *Advanced FEM analysis of nano-optical devices*  
Advanced Mask Technology Center, Dresden
- 12.10.2006** *Advanced FEM analysis of nano-optical devices (invited)*  
OPERA – Symposium on Photonics Technologies for the 7<sup>th</sup> Framework Programme, Breslau, Polen
- 27.10.2006** *Methoden für das Design von Photonischen-Kristall-Fasern (invited)*  
OpTecBB-Fokusseminar Photonische Kristallfasern und ihre Anwendungen, Zeuthen
- 16.11.2006** *Advanced FEM analysis of nano-optical devices*  
Max-Planck-Forschungsgruppe, Institut für Optik, Information und Photonik, Universität Erlangen-Nürnberg

### Hubert Busch

- 09.06.2006** *Das Berliner Wissenschaftsnetz BRAIN*  
20. DFN-Arbeitstagung über Kommunikationsnetze, Heilbronn

### Malte Clasen

- 8.05.2006** *Terrain Rendering using Spherical Clipmaps*  
EuroVis 2006, Lissabon, Portugal

## Wolfgang Dalitz

- 19.09.2006** *Eine Suchmaschine für die Mathematik*  
Jahrestagung der DMV 2006, Bonn

## Peter Deuflhard

- 26.01.2006** *The Smile of the Mathematicians. Mathematical Modelling and Simulation in Facial Surgery*  
IWR-Kolloquium, Universität Heidelberg
- 10.02.2006** *Conformation Dynamics in Computational Drug Design*  
Conference on Scientific Computing, Universität Wien, Österreich
- 06.03.2006** *Mathematical Modelling and Simulation in Facial Surgery*  
International Conference on High Performance Scientific Computing, Institute of Mathematics, Vietnamese Academy of Science and Technology, Hanoi, Vietnam
- 22.05.2006** *The Smile of the Mathematicians. Mathematical Modelling and Simulation in Facial Surgery*  
8<sup>th</sup> SIMAI Conference (Italian Society of Applied and Industrial Mathematics), Baia Samuelle, Italien
- 31.05.2006** *Das Lächeln der Mathematiker. Mathematik in der Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie*  
Kolloquium SS 2006, FB Mathematik, TU Darmstadt
- 12.07.2006** *Mathematics in Facial Surgery Planning*  
Plenary Speaker, 14<sup>th</sup> European Conference on Mathematics and Industry (ECMI 2006), Legaés, Spanien
- 15.08.2006** *Affine Conjugate Inexact Newton Multilevel Methods for Nonlinear Biomechanics*  
Invited Speaker, International Conference on Multilevel Iterative Methods, Peking University, Volksrepublik China
- 16.08.2006** *The DFG-Research Center MATHEON*  
Institute of Applied Physics and Computational Mathematics (IAPCM), Volksrepublik China
- 16.08.2006** *The DFG-Research Center MATHEON*  
Institute of Computational Mathematics (IAPCM), Chinese Academy of Mathematics, Volksrepublik China
- 15.09.2006** *Robust Perron Cluster Analysis in Computational Drug Design*  
Kolloquium anlässlich des 10-jährigen Jubiläums des ITWM und des 70. Geburtstages von Herrn Prof. Neunzert, ITWM, Universität Kaiserslautern
- 17.09.2006** *Multiscale Problems in Computational Medicine*  
IndAM Workshop on Multiscale Problems, Cortona, Italien
- 04.10.2006** *Mathematical Modelling and Simulation in Cranio-Maxillo-Facial Surgery*  
International Conference on Multifield Problems, Universität Stuttgart
- 06.11.2006** *Multiscale Problems in Computational Medicine*  
Myanmar-Germany Workshop "Computational Science", Yangon, Myanmar

## Andreas Eisenblätter

- 08.05.2006** *UMTS Radio Network Design Using Simple Heuristics*  
Workshop on Advances in Telecommunications Network Optimization, Villa Vigoni, Menaggio, Italien

## Philipp Friese

- 11.04.2006** *Optimization, Simulation, and Visualization of Multi-Elevator Transport Systems*  
Treffen mit der Firma Kollmorgen Steuerungstechnik GmbH, ZIB, Berlin
- 03.05.2006** *Optimization, Simulation, and Visualization of Multi-Elevator Transport Systems*  
Klausurtagung des DFG-Graduiertenkollegs 621 MAGSI, TU Berlin
- 28.09.2006** *Optimierung, Simulation und Visualisierung von Aufzugssystemen*  
Abschlussworkshop des DFG-Graduiertenkollegs 621 MAGSI, Neuer Hennings Hof, Perleberg
- 21.12.2006** *Optimierung, Simulation und Visualisierung von Aufzugssystemen*  
Optimierungstag, ZIB, Berlin



**Hans-Florian Geerdes**

- 12.01.2006** *Funknetzplanung für WLAN in Bürogebäuden*  
TU Braunschweig, IFN, Mobilfunk-Kolloquium
- 24.01.2006** *Project B4: Planning the UMTS Radio Interface*  
MATHEON Evaluation, TU Berlin
- 24.04.2006** *UMTS Radio Network Planning and Optimization*  
EGRES Seminar, ELTE, Budapest, Ungarn
- 04.08.2006** *New Approaches in UMTS Radio Network Optimization*  
ISMP 2006, Rio de Janeiro, Brasilien
- 14.09.2006** *Was ist MATHEON?*  
MATHERedaktion, ZIB, Berlin
- 20.09.2006** *Recent Trends in UMTS Radio Network Optimization*  
Radio Communication Seminar, Polytechnika Wroclawska, Breslau, Polen
- 22.09.2006** *Efficient Approximation of Blocking Rates in UMTS Radio Networks*  
PGTS 2006, Breslau, Polen
- 16.11.2006** *Schöner Telefonieren*  
Fest der Mathematik anlässlich der Eröffnung der Berlin Mathematical School, Berlin

**Martin Grötschel**

- 09.01.2006** *Mathematik: Schlüsselwissenschaft für Schlüsseltechnologien*  
Treffen der Regionalgruppe München der Gesellschaft für Informatik und des German Chapter of the ACM, München
- 24.01.2006** *Presentation of the DFG Research Center MATHEON: Achievements of the first three-and-a-half years and plans for the next four years*  
Begutachtung des MATHEON durch die DFG, TU Berlin
- 16.02.2006** *Das DFG-Forschungszentrum MATHEON: Nur mehr Stellen oder wirklich mehr?*  
Tagung „Exzellenz durch Vernetzung“, Innovationsforum der Partner für Innovation, Berlin
- 28.03.2006** *Karl der Große, PISA und Transportoptimierung*  
Kuratoriumssitzung der Technologiestiftung Berlin
- 24.05.2006** *Die optimierte Odyssee und die automatische Erzeugung von Portraits*  
Staatliche Hochschule für Gestaltung Karlsruhe
- 28.05.2006** *How to Solve Large-scale Integer Programs*  
Sixth Haifa Workshop on Interdisciplinary Applications of Graph Theory, Combinatorics, and Algorithms, Haifa, Israel
- 28.05.2006** *Designing Telecommunication Networks*  
Sixth Haifa Workshop on Interdisciplinary Applications of Graph Theory, Combinatorics, and Algorithms, Haifa, Israel
- 08.06.2006** *Lineare und ganzzahlige Optimierung: Was kann man damit in der Praxis lösen?*  
Öffentlicher Gastvortrag an der Universität Bayreuth
- 21.06.2006** *The Knowledge Triangle and the MATHEON – Mathematics for Key Technologies*  
Workshop: The Triangle of Knowledge: Creating Innovative Clusters, Experiences from Germany, Sweden and The United Kingdom; Ständige Vertretung der Bundesrepublik Deutschland bei der Europäischen Union, Brüssel, Belgien
- 02.07.2006** *The work of Luk van Wassenhove*  
21st European Conference on Operational Research, Reykjavik, Island
- 17.07.2006** *Presentation of the DFG Research Center MATHEON*  
Wissenschaftlicher Beirat des MATHEON, Berlin
- 02.08.2006** *Leonid Khachiyan and the polynomial-time solvability of linear programming*  
19th International Symposium on Mathematical Programming, Rio de Janeiro, Brasilien
- 19.08.2006** *The CEIC 2003–2006: Report to the General Assembly*  
General Assembly of the International Mathematical Union, Santiago de Compostela, Spanien
- 22.08.2006** *The Gauss Prize*  
International Congress of Mathematicians 2006, Madrid, Spanien

- 29.08.2006** *Designing telecommunication networks by integer programming*  
International Congress of Mathematicians 2006, Madrid, Spanien
- 06.09.2006** *Mathematik: Schlüsselwissenschaft für Schlüsseltechnologien*  
Sommerakademie der Studienstiftung des Deutschen Volkes, Görlitz
- 08.09.2006** *Das OR-Problem*  
Verleihung der Ehrendoktorwürde, Universität Karlsruhe
- 27.09.2006** *Mathematics: key to key technologies*  
Peking University, Peking, China
- 26.10.2006** *Open Access: Träume und Wirklichkeit*  
Gastvortrag, TFH Wildau
- 09.11.2006** *Die Wissenschaftsgalaxis: Wie sollte die zukünftige wissenschaftliche Informationsversorgung aussehen?*  
Forum „Digitale Informationsversorgung“ anlässlich der Veranstaltung „eUniversity – Update Bologna“, Internationales Kongresszentrum Bundeshaus, Bonn
- 27.11.2006** *Solving Transportation Problems by Integer Programming*  
IFORS Distinguished Lecture, XIII CLAIO Congreso Latino-Iberoamericano de Investigación Operativa, Montevideo, Uruguay

### Hans-Christian Hege

- 06.02.2006** *Visualization and Molecular Analysis*  
Boston University, Dept. of Biomedical Engineering, Structural Bioinformatics Laboratory, Boston, USA
- 07.02.2006** *The balance between complexity and efficiency in drug design and the benefit from numerical analysis and modeling*  
Boston University, Dept. of Biomedical Engineering, Structural Bioinformatics Laboratory, Boston, USA
- 20.03.2006** *Visualisierung und Datenanalyse: große Datensätze, große Displays*  
Bildverarbeitung für die Medizin 2006: Algorithmen – Systeme – Anwendungen, Hamburg
- 26.03.2006** *Goals and Challenges in Visual Data Analysis*  
Max-Planck-Institut für Kolloid- und Grenzflächenforschung, Abt. Biomaterialien, Golm
- 09.06.2006** *Anatomie-Rekonstruktion und Medizinische Planung*  
ZiG/MATHEON-Workshop, TU Berlin
- 03.07.2006** *New Challenges in Visual Analysis of Molecular Systems*  
Seminar zur Vorbereitung des Exzellenzclusters „Molecular Functional Units in Their Environments: Mathematical Modelling, Design, and Control“, ZIB, Berlin
- 02.09.2006** *Visualization of Dynamical Systems*  
2nd Int. Congress on Mathematical Software, ICMS'2006, Castro Urdiales, Spanien
- 29.09.2006** *Visualization in Computational Life Science*  
Plenary Talk, 2nd Int. Symposium on Computational Life Science, Cambridge University, Vereinigtes Königreich
- 08.11.2006** *Proposal for a Peta-Scale Visualization System*  
Vortrag für Mitarbeiter der Fujitsu Laboratories Japan and Europe, ZIB, Berlin
- 17.11.2006** *Proposal for a Peta-Scale Visualization System*  
Peta-Scale Computing Group, Fujitsu Laboratories, Kawasaki, Japan
- 18.11.2006** *Proposal for a Peta-Scale Visualization System*  
Board of Directors, Fujitsu Laboratories, Kawasaki, Japan
- 21.11.2006** *Anatomy Reconstruction and Medical Planning*  
Peta-Scale Computing Group, Fujitsu Laboratories, Kawasaki, Japan
- 21.11.2006** *Visual Flow Analysis*  
Peta-Scale Computing Group, Fujitsu Laboratories, Kawasaki, Japan
- 22.11.2006** *New Ideas for Peta-Scale Visualization*  
RIKEN Headquarter, Next-Generation Supercomputer R&D Center, Tokio, Japan
- 17.11.2006** *Proposal for a Peta-Scale Visualization System*  
Board of Directors, Fujitsu Laboratories, Kawasaki, Japan

- 05.12.2006** *Visualisierung in Computational Life Sciences – Status und Perspektiven*  
4. Treffpunkt Bioinformatik in Berlin-Brandenburg, Bioinformatik-Statusseminar von MATHEON, BiO-TOP und BCB, Harnack-Haus, Berlin
- 15.12.2006** *Visualization Methods and Anatomy Reconstruction in Biology*  
Conference: Visualization Tools for Cellular Complexity, Max-Planck-Institut für Biochemie, Martinsried

### Stefan Heinz

- 01.06.2006** *Policies for Online Target Date Assignment Problems: Competitive Analysis versus Expected Performance*  
Optimization Seminar, ZIB, Berlin
- 21.09.2006** *Policies for Online Target Date Assignment Problems: Competitive Analysis versus Expected Performance*  
DMV-Studentenkonferenz 2006
- 27.10.2006** *Policies for Online Target Date Assignment Problems: Competitive Analysis versus Expected Performance*  
Dies Mathematicus 2006, TU Berlin

### Benjamin Hiller

- 30.01.2006** *OnlineBinColoring*  
Mittagsseminar DFG-Forschergruppe „Algorithmen, Struktur, Zufall“, TU Berlin
- 26.06.2006** *Probabilistische Analyse von Online Bin Coloring via Stochastische Dominanz*  
Mittagsseminar DFG-Forschergruppe „Algorithmen, Struktur, Zufall“, TU Berlin
- 06.09.2006** *Evaluation and presentation of experimental results*  
GI-Forschungsseminar „Algorithm Engineering“, Schloss Dagstuhl
- 20.11.2006** *Markov Chains, Computer Proofs, and Average-Case Analysis of Best Fit Bin Packing*  
Mittagsseminar DFG-Forschergruppe „Algorithmen, Struktur, Zufall“, TU Berlin

### Lavinia Hodoroba

- 24.01.2006** *Lucene-Prototyp des KOBV*  
Lucene-Workshop, Universitätsbibliothek, Stuttgart
- 13.02.2006** *Einsatz von Suchmaschinen-Technologie in der Suche – OPAC-Retrieval mit Nutch und Lucene*  
KOBV-Workshop „Verbesserung des Retrievals“, ZIB, Berlin

### Nam Dung Hoang

- 08.03.2006** *Dirichlet Feedback Control for the Stabilization of Unstable Parabolic Systems: Application to Heat Transfer Control in Fluid Flow*  
International Conference on High Performance Scientific Computing, Hanoi, Vietnam
- 11.07.2006** *Dirichlet Feedback Control for the Stabilization of Unstable Parabolic Systems*  
Universität Karlsruhe

### Mikael Höggqvist

- 21.04.2006** *AstroGrid-D Information Service*  
CoreGRID workshop of the Virtual Institute on Grid Information, Resource and Workflow Monitoring, PNSC, Poznan, Polen
- 18.05.2006** *AstroGrid-D Data Management and Information Service*  
DGI workshop on Data Management, ZIB, Berlin

### Felix Hupfeld

- 17.11.2006** *Using distributed consistent branching for efficient reconciliation of mobile workspaces*  
IEEE CollaborateCom MobCops, Atlanta, USA

### Andres Imhof

- 13.02.2006** *Einsatz von Suchmaschinen-Technologie in der Navigation – Konzept für ein Faceted Browsing*  
KOBV-Workshop „Verbesserung des Retrievals“, ZIB, Berlin
- 27.09.2006** *Zweieinhalb Jahre Open-Linking im KOBV-Portal: ein Erfahrungsbericht*  
12. Jahrestagung der IuK-Initiative der wissenschaftlichen Fachgesellschaften in Deutschland, Niedersächsische Staats- und Universitätsbibliothek, Göttingen

### Ralf Kähler

- 31.07.2006** *GPU-Assisted Raycasting for Cosmological Adaptive Mesh Refinement Simulations*  
International Workshop on Volume Graphics 2006, Boston, USA
- 15.03.2006** *Visualization of Structured Adaptive Mesh Refinement Data*  
KIPAC/SCCS Seminar, Stanford University, Stanford, USA
- 02.03.2006** *Visualization of Structured Adaptive Mesh Refinement Data with Amira*  
CCT Special Seminar, Louisiana State University, Baton Rouge, USA

### Volker Kaibel

- 12.01.2006** *Orbitopes*  
10th Workshop on Combinatorial Optimization, Aussois, Frankreich
- 10.02.2006** *Orbitopes*  
Oberseminar Theoretische Informatik, HU Berlin
- 31.05.2006** *Orbitopes*  
Mixed Integer and Integer Programming – The Way Forward, CORE, Louvain-La-Neuve, Frankreich
- 02.08.2006** *Orbitopes*  
19th International Symposium on Mathematical Programming, Rio de Janeiro, Brasilien
- 14.09.2006** *Breaking Symmetry in Integer Programming*  
4th Joint Operations Research Days, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Schweiz
- 22.09.2006** *0/1-Polytopes with Exponentially Small Vertex-Expansion*  
DMV-Jahrestagung, Bonn
- 27.10.2006** *Orbitopes – Polyhedral Combinatorics of Symmetry Breaking in IP*  
Kolloquium, Università degli Studi di Roma, Tor Vergata, Rom, Italien
- 30.10.2006** *Orbitopes – Polyhedral Combinatorics of Symmetry Breaking in IP*  
Istituto di Analisi dei Sistemi ed Informatica, Rom, Italien
- 20.11.2006** *Orbitopes – Polyhedral Combinatorics of Symmetry Breaking in IP*  
Kolloquium des DFG-Graduiertenkollegs „Methods for Discrete Structures“, TU Berlin

### Uta Kaminsky

- 22.02.2006** *Friedrich-Althoff-Konsortium e. V., Erwerbungs Kooperation in der Region Berlin-Brandenburg*  
Fachvortrag für den Berufsverband Information Bibliothek e. V., Landesgruppe Brandenburg
- 20.06.2006** *Was Sie schon immer von ihrem Dienstleister wissen wollten, Friedrich-Althoff-Konsortium e. V.*  
1. Workshop „E-Journals in der Praxis“, Forschungszentrum Jülich
- 17.10.2006** *Was Sie schon immer von ihrem Dienstleister wissen wollten, Friedrich-Althoff-Konsortium e. V.*  
2. Workshop „E-Journals in der Praxis“, Forschungszentrum Jülich

### Benjamin Kettner

- 18.10.2006** *Construction of prismatoidal coordinate systems for exterior domain discretisations*  
Minisymposium Nano Optics, ZIB, Berlin

### Roland Klose

- 25.09.2006** *Pole Condition: Numerical solution of Helmholtz-type scattering problems with far field evaluation*  
FEM-Symposium, Chemnitz
- 02.10.2006** *Numerische Behandlung von Streuproblemen*  
Institutsseminar TU Hamburg-Harburg

- 12.12.2006** *Pole Condition: A numerical method for Helmholtz-type scattering problems with inhomogeneous exterior domain*  
FEMTEC, El Paso, USA

### Thorsten Koch

- 15.02.2006** *Linear Equation Systems in the Simplex Algorithm*  
MATHEON-Workshop zur Lösung großer unstrukturierter Gleichungssysteme in der linearen und ganzzahligen Optimierung an der TU Berlin
- 07.03.2006** *Coverage and Capacity Planning for Cellular Networks*  
3rd International Conference on High Performance Computing, Hanoi, Vietnam
- 16.03.2006** *Coverage and Capacity Planning for Cellular Networks*  
University of Natural Sciences Vietnam National University, Ho-Chi-Minh-Stadt, Vietnam
- 28.03.2006** *Finding the Strategic Corridor*  
77. Jahrestreffen der Gesellschaft für Angewandte Mathematik und Mechanik, Berlin
- 28.06.2006** *Improving the Landside Operation of a Container Terminal by an Intermediate Stacking Area*  
INFORMS International Conference 2006, Hongkong, VR China
- 06.11.2006** *MIPLIB 20XX: On the Difficulties to Find a Good Set of MIP Instances for Benchmarking*  
INFORMS Annual Conference 2006, Pittsburgh, USA
- 07.11.2006** *Zimpl: A Solver Independent Open Source Modelling Language*  
INFORMS Annual Conference 2006, Pittsburgh, USA

### Arie M. C. A. Koster

- 13.03.2006** *TELEKOMBINATORIK – Modelle und Algorithmen zur Optimierung von Telekommunikationsnetzen*  
Universität Dortmund, Dortmund
- 22.03.2006** *On the complexity of Demand-wise Shared Protection*  
COST 293 – Treffen des Arbeitskreises „Optical and Broadband Networks“, Budapest, Ungarn
- 27.–29.03.2006** *Forschungsaufenthalt Texas A & M University*  
College Station, USA
- 30.03.2006** *Network Optimization for a Mobile-network Operator*  
Invited workshop, 8th INFORMS Telecommunications Conference, Dallas, USA
- 30.03.2006** *A cut-and-branch-and-price approach to two-layer network design*  
8th INFORMS Telecommunications Conference, Dallas, USA
- 01.04.2006** *Survivable network design by demand-wise shared protection*  
8th INFORMS Telecommunications Conference, Dallas, USA
- 28.04.2006** *Availability and Cost Based Evaluation of Demand-wise Shared Protection*  
7. ITG-Fachtagung „Photonische Netze“, Leipzig
- 05.06.2006** *Treewidth and Integer Programming*  
Invited talk, Mixed Integer Programming (MIP 2006), Miami, USA
- 12.06.2006** *Nobody is perfect!?*  
Montagsseminar der DFG-Forschergruppe „Algorithmen, Struktur, Zufall“, HU Berlin
- 14.06.2006** *Integer Programming for Treewidth and Fill-in*  
TACO day, Universiteit Maastricht, Niederlande
- 20.06.2006** *Cost-efficient transparent optical networks with high connection availabilities*  
Invited talk, 8th International Conference on Transparent Optical Networks (ICTON), COST 293 annual conference on GRAPHS and ALGORITHMS in communication networks, Nottingham, Großbritannien
- 25.09.2006** *Decomposition of Graphs: Upper bounds, Lower bounds, and Exact methods to compute Treewidth*  
Invited talk, 8th International Workshop on Preferences and Soft Constraints (Soft 2006), Nantes, Frankreich
- 13.10.2006** *Vermeidung von Wellenlängenzuweisungskonflikten durch optimierte Routingverfahren*  
Treffen des Arbeitskreises Referenznetze BMBF-Verbundvorhaben Efficient Integrated Backbone (EIBONE), Heinrich-Hertz-Institut, Berlin
- 30.10.2006** *How to avoid communication on the same wavelength?*  
The University of Warwick, Coventry, Großbritannien

**23.11.2006** *Mathematical Optimization for Multi-Layer Networks*  
Ericsson, Backnang

**12.11.2006** *Graphenfärbung und Optische Netze*  
RWTH Aachen

### Susanna Kube

**07.02.2006** *Modelling Principles in Computational Drug Design*  
Institutsseminar, TU Freiberg

**25.05.2006** *Modeling Principles and Coarse Graining Methods in Computational Drug Design*  
Präsentation im Rahmen der McGill summer school "Systems Biology Dynamics", Centre for Nonlinear Dynamics in Physiology and Medicine, McGill University, Montreal

**22.09.2006** *A Coarse Graining Method for the Identification of Transition Rates between Molecular Conformations*  
Workshop "Methods of Molecular Simulation 2006", Interdisciplinary Center for Scientific Computing (IWR), Universität Heidelberg

### Monika Kuberek

**13.02.2006** *Verbesserung des Retrievals – Empfehlungen der AG Retrieval*  
KOBV-Workshop: „Verbesserung des Retrievals“, ZIB, Berlin

**13.02.2006** *Verbesserung des Retrievals – Ausblick*  
KOBV-Workshop: „Verbesserung des Retrievals“, ZIB, Berlin

**22.03.2006** *Verbundübergreifende Fernleihe – Kooperation, die sich bezahlt macht. Teil 1 „Technisch-organisatorische Umsetzung“*  
95. Deutscher Bibliothekartag „Netzwerk Bibliothek“, Internationales Congress Center, Dresden

**04.05.2006** *KOBV – Konzepte dezentraler Verbundarbeit*  
Gastseminar im Fachbereich Buch und Museum, Hochschule für Technik, Wirtschaft und Kultur, Leipzig

**24.11.2006** *Bibliotheksverbände – Neue Entwicklungen im KOBV*  
Symposium „175 Jahre Universitätsbibliothek“, HU Berlin

### Hans Lamecker

**21.03.2006** *Atlas-basierte 3D-Rekonstruktion des Beckens aus 2D-Projektionsbildern*  
Workshop Bildverarbeitung für die Medizin, Hamburg

**04.05.2006** *Analysis of Anatomical Shape Variability for Computer-Aided Medical Planning*  
Medical and Biological Informatics, Deutsches Krebsforschungszentrum, Heidelberg

**06.05.2006** *Mathematik gut in Form: Was steckt hinter Morphing?*  
Tag der Mathematik, Berlin

**29.06.2006** *Automatic Segmentation of Mandibles in Low-Dose CT-Data*  
20th Int. Congress on Computer Assisted Radiology and Surgery, Osaka, Japan

**30.06.2006** *Surgical Treatment of Craniosynostosis based on a Statistical 3D-Shape Model: First Clinical Application*  
20th Int. Congress on Computer Assisted Radiology and Surgery, Osaka, Japan

**04.11.2006** *Statistical 3D-Shape Analysis and Applications in Medicine*  
Vortrag im Rahmen des Aschauer Soires der Deutschen Gesellschaft für Auxologie

### Monika Lill

**09.02.2006** *Über die Erfahrungen bei der „Datenzusammenführung“ im Verbundkatalog Filmbibliotheken*  
Tagung: „Audiovisuelle Wissensmedien online“, IWF Wissen und Medien, Göttingen

**27.06.2006** *DINI-Zertifikat*  
Opus-Workshop, ZIB, Berlin

**Stefan Lohrum**

- 14.06.2006** *Integration der Verbundfernleihe in den SISIS-InfoGuide*  
21. Anwenderforum Berlin-Brandenburg, Senftenberg
- 16.06.2006** *Entwicklungsstand der Fernleihe in der Region Berlin-Brandenburg*  
Arbeitsgemeinschaft Berlin-Brandenburgischer Leihverkehr, Berlin

**Joachim Lügger**

- 14.03.2006** *Suchmaschinentechnologie und Verteilte Digitale Bibliothek im KOBV*  
Bundesministerium für Bildung und Forschung, Referat 532, Bonn
- 26.04.2006** *Suchmaschinentechnologie im KOBV – Neue Perspektiven*  
Sun Summit Bibliotheken 2006, Rheinisches Landesmuseum Bonn
- 18.05.2006** *Ein Vorschlag zur Architektur von e-Science*  
Bundesministerium für Bildung und Forschung, Bonn, Expertenkreis  
„Förderinitiative e-Science-Wissensvernetzung“
- 04.07.2006** *Aspekte der Archivierung und Preservation*  
Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kultur des Landes Brandenburg
- 08.09.2006** *Search Engine Strategies, Services and Strategies in KOBV*  
Besuch japanischer Bibliothekare, ZIB, Berlin
- 19.10.2006** *Search Engine Strategies, Services and Strategies in KOBV*  
Besuch isländischer Bibliothekare, ZIB, Berlin
- 07.11.2006** *Zur Architektur von e-Science*  
Integrationsworkshop: e-Science-Wissensvernetzung, SUB Göttingen

**Brigitte Lutz-Westphal**

- 11.01.2006** *Keine Angst vor Mathematik*  
Sozialpädagogische Fortbildung Berlin
- 09.03.2006** *Typisch diskret – was macht diskretes Arbeiten aus?*  
Universität Osnabrück
- 15.07.2006** *Was ist ein guter Vortrag?*  
DFG-Forschungszentrum MATHEON, Schloss Trebnitz
- 19.7.2006** *Kombinatorische Optimierung erleben – Inhalte und Methoden für einen authentischen Mathematikunterricht*  
Disputation, Technische Universität Berlin
- 23.11.2006** *Mathematik für die Müllabfuhr – Einführung in die kombinatorische Optimierung*  
Vorstellungsvortrag, Hochschule Vechta

**Daniel Mauter**

- 23.11.2006** *SRB*  
DGrid DGI All Hands Meeting, DESY Hamburg

**Patrick May**

- 18.07.2006** *CASP6*  
Max-Planck-Institut für Molekulare Genetik, Berlin

**Marika Neumann**

- 31.08.2006** *Fare Planning for Public Transport*  
Optimierungsseminar, ZIB Berlin
- 06.09.2006** *Line Planning in Public Transport*  
Operations Research 2006, Karlsruhe
- 08.09.2006** *Mathematische Preisplanung im ÖPNV*  
Operations Research 2006, Karlsruhe

**07.10.2006** *Fare Planning in Public Transport*  
Conference on Applied Infrastructure Research, TU Berlin

**13.10.2006** *Mathematische Preisplanung im Nahverkehr*  
Workshop „Mathematik und Automobile“, Graduiertenkolleg Angewandte Algorithmische Mathematik, München

### Sebastian Orlowski

**07.03.2006** *An Integer Programming Approach to 2-layer Telecommunication Network Design*  
HPSC 2006, Hanoi, Vietnam

**16.03.2006** *Approaches to Multi-layer Network Planning at ZIB*  
Politecnico Ho-Chi-Minh-City, Ho-Chi-Minh-Stadt, Vietnam

**10.05.2006** *Branch, Cut and Price in Two-Layer Network Design*  
COFIN-Matheon-Workshop „Advances in Telecommunication Network Optimization“, Villa Vigoni, Italien

**27.09.2006** *Ideas for a branch-and-cut-and-price approach in two-layer telecommunication network design*  
Seminarvortrag, LIX, Ecole Polytechnique, Palaiseau, Frankreich

### Olaf Paetsch

**10.11.2006** *Feature Extraction in Amira*  
ZKI-Tagung AK Grafik & Multimedia, Universität zu Köln

### Kathrin Peter

**18.05.2006** *Verwaltung von Dateien und Datenbanken im Grid mit SRB und OGSA-DAI*  
DGrid 2. Datenmanagement Workshop, Berlin

**19.10.2006** *Flexible Definition of Data and Redundancy Layout for Storage Systems*  
6th European Dependable Computing Conference (EDCC-6), Portugal

### Marc Pfetsch

**12.01.2006** *Optimizing Discrete Morse Functions*  
10th International Workshop on Combinatorial Optimization, Aussois, Frankreich

**04.05.2006** *Linienplanung im Öffentlichen Nahverkehr*  
Workshop über Strategische Planung im ÖPNV, ViP Verkehrsbetrieb Potsdam GmbH, Potsdam

**29.06.2006** *Orbitopes*  
ZIB-Optimierungsseminar, Berlin

**25.08.2006** *Orbitopes*  
X Encuentro de Matemática y sus Aplicaciones, Quito, Ecuador

**31.07.2006** *Optimizing Discrete Morse Functions*  
International Symposium on Mathematical Programming 2006, Rio de Janeiro, Brasilien

**20.09.2006** *Symmetry Reduction in Graph Coloring Via Orbitopes*  
DMV-Jahrestagung, Bonn

**27.09.2006** *Line Planning*  
ARRIVAL/MATHEON Fall School 2006 on Timetabling and Line Planning, Dabendorf

### Jan Pomplun

**16.03.2006** *FEM Investigation of Light Propagation in Hollow Core Photonic Crystal Fibers*  
DPG-Frühjahrstagung 2006, Frankfurt

### Steffen Prohaska

**06.04.2006** *Interaktive Visualisierung und Datenanalyse: Herausforderungen durch wachsende Datenmengen*  
GeoVis, Geoforschungszentrum Potsdam



**Christian Raack**

**08.06.2006** *Modellierung von Multilayer-Netzen*

BMBF-Verbundvorhaben Efficient Integrated Backbone (EIBONE), Statusseminar, T-Systems Berlin

**27.07.2006** *Flow-Cut Inequalities and Mixed-Integer Rounding*

ZIB-Optimierungsseminar, Berlin

**21.09.2006** *Employing Mixed-Integer Rounding in Telecommunication Network Design*

DMV-Studentenkonferenz, Bonn

**Isabel Reinecke**

**25.05.2006** *Mathematical Modeling of the Human Menstrual Cycle*

Präsentation im Rahmen der McGill Summer School "Systems Biology Dynamics", Centre for Nonlinear Dynamics in Physiology and Medicine, McGill University, Montreal

**Alexander Reinefeld**

**16.03.2006** *Managing Distributed Data and Services*

Google, Zürich

**07.09.2006** *Supporting Multi-Attribute Range Queries in P2P Networks*

Seminar-Kolloquium, Carleton-University, Ottawa, Kanada

**03.10.2006** *Multi-Dimensional Range Queries in Overlay Networks*

University of Manitoba, Winnipeg, Kanada

**05.10.2006** *Multi-Dimensional Range Queries in Overlay Networks*

University of Alberta, Edmonton, Kanada

**28.10.2006** *On the Usefulness of Consistent Hashing in Structured Peer-to-Peer Networks*

eingeladener Vortrag, MEMICS-Workshop, Masaryk University, Brünn, Tschechien

**Thomas Röblitz**

**30.08.2006** *On the Placement of Reservations into Job Schedules*

Euro-Par 2006, Dresden

**1.12.2006** *Co-Reservation of Resources in the Grid*

CoreGRID short visit an der Faculté Polytech Mons, Belgien

**11.12.2006** *Co-Reservation of Resources in the Grid*

BBGrid-Workshop, TU Berlin

**Robert Roggenbuck**

**19.09.2006** *Web Site-Erstellung – was leisten Content-Management-Systeme?*

Jahrestagung der DMV 2006, Bonn

**Beate Rusch**

**13.02.2006** *Reiche Kataloge, arme Kataloge: Datenanreicherung in OPACS*

KOBV-Workshop „Verbesserung des Retrievals“, ZIB, Berlin

**04.09.2006** *IGeLU organization: Relation to National User Groups (zusammen mit P. Busby)*

1st IGeLU Conference, International Conference of the International Group of Ex Libris Users, Stockholm, Schweden

**04.09.2006** *IGeLU organization: Newsletters*

1st IGeLU Conference, International Conference of the International Group of Ex Libris Users, Stockholm, Schweden

**12.10.2006** *Was Sie schon immer über Nationallizenzen wissen wollten, sich aber nie zu fragen trauten: Zahlen, Fakten, Hintergründe*

KOBV-Workshop: Nationallizenzen, ZIB, Berlin

**12.10.2006** *Nationallizenzen als neue Perspektive für das KOBV-Portal*

KOBV-Workshop: Nationallizenzen, ZIB, Berlin

### Carlos Saro

- 27.01.2006** *Online-Plattform für kontrolliertes Vokabular (gemeinsam mit Regine Stein)*  
Tagung der Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund, Leipzig

### Achim Schädle

- 04.07.2006** *Domain Decomposition for Maxwell's equations: scattering off periodic structures*  
17th International Conference on Domain Decomposition Methods, Strobel/St. Wolfgang, Österreich
- 26.07.2006** *Fast Runge-Kutta approximation of inhomogeneous parabolic differential equations*  
Conference on Applied Linear Algebra, Düsseldorf
- 05.09.2006** *Fast and oblivious convolution*  
NUMDIFF-11 Numerical Solution of Differential and Differential-Algebraic Equations, Halle

### Anton Schiela

- 30.03.2006** *The control reduced interior point method*  
GAMM 2006, Berlin
- 15.06.2006** *The control reduced interior point method*  
Karl-Franzens Universität Graz, Österreich
- 04.07.2006** *The control reduced interior point method*  
TU Dresden
- 01.11.2006** *Nichtlineare Approximationstheorie und adaptive Algorithmen*  
Disputationsvortrag, ZIB, Berlin

### Florian Schintke

- 11.05.2006** *C3-Grid: The Collaborative Climate Community Data and Processing Grid*  
2nd Black Forest Grid Workshop, Freiburg

### Thomas Schlechte

- 17.01.2006** *Der schnellste Weg zum Ziel: Mathematik in Transport und Verkehr*  
1. Zittauer Tage der Computerorientierten Wirtschaftsmathematik, FH Zittau/Görlitz
- 06.04.2006** *Das Trassenallokationsproblem*  
IVU Traffic Technologies AG, Berlin
- 14.07.2006** *Optimal Track Allocation*  
Workshop on Pricing and Combinatorial Auctions, TU Berlin
- 06.09.2006** *Models for the Track Allocation Problem*  
Symposium über Operations Research 2006, Universität Karlsruhe
- 23.10.2006** *A Column Generation Approach to Auction based Railway Slot Allocation*  
Workshop on Network Optimization, Lambrecht (Pfalz)

### Frank Schmidt

- 16.06.2006** *Computation of Leaky Modes by the Pole Condition Approach*  
Mathematics of Finite Elements and Applications (MAFELAP) 2006, The Brunel Institute of Computational Mathematics, Uxbridge, Vereinigtes Königreich
- 05.09.2006** *Numerical Simulation of Scattering and Resonance Problems by the Pole Condition Method*  
ETH Zürich, Schweiz
- 03.07.2006** *Simulationen in der Nano-Optik: Zwischen Quantenwelt und Astronomie*  
ZIB, Berlin
- 31.07.2006** *Key Technology Optics: Mathematics, Numerics and Applications*  
Workshop Nano Optics, ZIB Berlin
- 24.09.2006** *Rigorous FEM-Simulation of EUV-Masks: Influence of Shape and Material Parameters*  
Photomask Technology 2006, Monterey, USA
- 13.11.2006** *Modellierung optischer 3D-Strukturen*  
PTB Berlin-Adlershof

**Johannes Schmidt-Ehrenberg**

- 29.03.2006** *Molecules in Motion, Sprecher: Christof Schütte (FU Berlin)*  
Public Lecture, GAMM Annual Meeting 2006, TU Berlin
- 25.07.2006** *Application and Extension of Generalized Partial Procrustes Analysis for the Visualization of Molecular Conformations*  
Joint GAMM-SIAM Conference on Applied Linear Algebra, Düsseldorf
- 27.09.2006** *Set-Oriented Dimension Reduction: Localizing Principal Component Analysis via Hidden Markov Models*  
Second International Symposium on Computational Life Sciences, Cambridge, Vereinigtes Königreich
- 16.11.2006** *Tanz der Moleküle, Sprecherin: Caroline Lasser (FU Berlin)*  
Matheon-Fest der Mathematik, TU Berlin
- 05.12.2006** *Visualisierung in den Computational Life Sciences – Status und Perspektiven, Sprecher: Hans-Christian Hege*  
4. Treffpunkt Bioinformatik in Berlin-Brandenburg, Berlin

**Thorsten Schütt**

- 18.05.2006** *Structured Overlay without Consistent Hashing: Empirical Results*  
Sixth Workshop on Global and Peer-to-Peer Computing (GP2PC 2006), Singapore

**Heiko Seim**

- 02.11.2006** *The Zuse Institute Berlin and its role within the DeSSOS project*  
DeSSOS-Projekttreffen, Universität Saragossa, Spanien

**Wolfram Sperber**

- 26.04.2006** *10 Jahre Math-Net – ein Konzept im Umbruch*  
Frühjahrsworkshop „Wissenschaftsvernetzung – Konzepte, Erfahrungen, Perspektiven“ der AG IuK des Netzwerks Technikfolgenabschätzung, Berlin
- 15.08.2006** *Automatic classification of mathematical papers*  
Communicating Mathematics in the Digital Era, Aveiro, Portugal
- 19.09.2006** *Kann man automatisch klassifizieren? Probleme und Ansätze automatischer Klassifikation*  
Jahrestagung der DMV 2006, Bonn
- 13.12.2006** *Die Expertendatenbank und der WebSiteMaker*  
Statusseminar des BMBF-Mathematikprogramms, Jülich

**Regine Stein**

- 27.01.2006** *Online-Plattform für kontrolliertes Vokabular*  
Tagung der Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund, Leipzig
- 10.05.2006** *Das Portal [www.museumsvokabular.de](http://www.museumsvokabular.de) – kontrolliertes Vokabular zur Nutzung in deutschen Museen*  
Jahrestagung des Deutschen Museumsbundes am Stadtgeschichtlichen Museum, Leipzig
- 18.05.2006** *Das Portal [museumsvokabular.de](http://museumsvokabular.de) für kontrolliertes Vokabular*  
Tagung „Museums and the Internet“, Berlinische Galerie, Berlin
- 17.10.2006** *Vom CDWA-Lite zu museumdat – ein Harvesting-Format für Museumsdaten*  
Berliner Herbsttreffen zur Museumsdokumentation, ZIB, Berlin
- 17.10.2006** *[www.museumsvokabular.de](http://www.museumsvokabular.de) – der nächste Schritt*  
Berliner Herbsttreffen zur Museumsdokumentation, ZIB, Berlin

**Thomas Steinke**

- 22.03.2006** *Zugriffsrechte und Zugriffskontrolle für feingranulare Daten*  
D-Grid Sicherheits-Workshop, Göttingen
- 11.05.2006** *Experiences with High-Level-Programming of FPGAs on Cray XD1*  
CUG 2006, Lugano, Schweiz

- 01.06.2006** *MediGRID: Ressourcenfusion für Medizin und Lebenswissenschaften*  
ITeG, Frankfurt/Main
- 26.06.2006** *FPGA „Programming“ with Mitrion-C on Cray XD1*  
ITI, Lübeck
- 28.06.2006** *Collaborative Paths forward: OpenFPGA*  
ISC 2006, Dresden
- 29.06.2006** *Experiences with High-Level-Programming of FPGA*  
ISC 2006, Dresden
- 29.08.2006** *ZIB Structure Prediction Pipeline: Composing a Complex Biological Workflow Through Web Services*  
Euro-Par 2006, Dresden
- 24.11.2006** *Interplay of Bioinformatics and IT Technology: From Chips to Grids*  
BCB-Symposium, Berlin

### Rüdiger Stephan

- 23.02.2006** *Das Polytop der längenbeschränkten gerichteten Kreise*  
Optimierungsseminar, ZIB, Berlin
- 20.05.–27.05.2006**  
Gastaufenthalt an der Carnegy Mellon University, Pittsburgh, USA
- 07.09.2006** *Facets of the cycle polytope unrelated to the traveling salesman polytope*  
Symposium on Operations Research 2006, Universität Karlsruhe

### Hinnerk Stüben

- 11.03.06** *Die bizarre Welt der Quantenpunkte*  
Tag des Supercomputing, CeBIT, Hannover
- 05.10.06** *A7: Dissemination Activities*  
I3HP Dissemination Board Meeting, Frascati, Italien
- 06.10.06** *A7: Status Report*  
I3HP Collaboration Committee Meeting, Frascati, Italien
- 10.11.06** *API: Data Management – Metadata Catalogue*  
HEPCG Workshop, Wuppertal
- 28.11.06** *Introduction to ILDG, the LatFor Datagrid, and I3HP Transnational Access*  
Lattice Practices '06, Zeuthen
- 01.12.06** *Machines and Physics Plans in Germany*  
9th ILDG Workshop, weltweiter Video-Workshop
- 05.12.06** *Scaling BQCD*  
Blue Gene/L Scaling Workshop, Jülich

### Gerd Teschke

- 15.01.2006** *Nonlinear Inverse Problems & Sparsity: Multi Frame Based “Shrinkage” Iterations*  
SIAM/AMS Annual Meeting 2006, San Antonio, USA
- 24.01.2006** *Nonlinear Inverse Problems & Sparsity*  
HASSIP Workshop “Recent Progress in Wavelet Analysis and Frame Theory 2006”, Bremen
- 03.02.2006** *Inverse Problems & Sparsity*  
Universität Gießen
- 15.06.2006** *A new intermittent clutter filtering algorithm for Radar Wind Profile*  
ISTP 06, Boulder, USA
- 21.06.2006** *Inverse Problems, Sparsity, Convergence Rates*  
RICAM, Linz, Österreich
- 03.08.2006** *Inverse Problems & Frames & Sparsity*  
Workshop “Mathematical Methods in Tomography”, Oberwolfach
- 09.08.2006** *Where Wavelets Improve Medical Imaging*  
1st International Summer School in Biomedical Engineering, Erfurt

- 13.09.2006** *Inverse Problems and Wavelets in Image Processing*  
HASSIP Workshop, München
- 13.09.2006** *Sparse Approximation*  
PACM Workshop, Princeton University, USA
- 21.11.2006** *Iterative Strategies in Image and Signal Processing*  
University of Basel, Schweiz
- 15.12.2006** *Iterative Methods for Inverse & Ill-posed Problems*  
Erwin-Schrödinger-Institut Wien, Österreich

### Andreas Tuchscherer

- 12.01.2006** *The Online Target Date Assignment Problem*  
10th International Workshop on Combinatorial Optimization, Aussois, Frankreich
- 12.10.2006** *Laserschweißen im Karosseriebau*  
Workshop „Mathematik und Automobile“, TU München

### Marcus Weber

- 15.02.2006** *Algebraische Statistik – ein junges Forschungsgebiet*  
Disputation am Fachbereich Mathematik der FU Berlin
- 26.07.2006** *Robust Perron Cluster Analysis in Conformation Dynamics*  
Minisymposium, GAMM-SIAM-Tagung in Düsseldorf
- 22.09.2006** *Well-conditioned Computation of Probability Densities for Metastable Conformations*  
Workshop “Methods of Molecular Simulation 2006”, Interdisciplinary Center for Scientific Computing (IWR), Universität Heidelberg

### Tino Weinkauff

- 07.09.2006** *Topological Structures in Two-Parameter-Dependent 2D-Vector Fields*  
Eurographics 2006, Wien, Österreich
- 29.09.2005** *A Unified Feature Extraction Architecture*  
Active-Flow-Control-Konferenz 2006, Berlin
- 31.10.2006** *Ingredients of a Virtual Topology Lab*  
Tutoriumsvortrag auf der IEEE Visualization 2006, Baltimore, USA
- 06.11.2006** *Ingredients of a Virtual Topology Lab*  
Gastvortrag am Center for Computation & Technology, Louisiana State University, Baton Rouge, USA

### Martin Weiser

- 27.02.2006** *Interior point aspects in PDE optimization*  
Conference Numerical Techniques for Optimization Problems with PDE Constraints, Oberwolfach
- 15.06.2006** *Affine conjugate Newton methods for nonconvex minimization*  
Conference Mathematics of Finite Elements and Applications (MAFELAP) 2006, The Brunel Institute of Computational Mathematics, Uxbridge, Vereinigtes Königreich
- 20.06.2006** *Continuous Interior Point Methods for Optimal Control Problems and their Discretization*  
TU Dresden
- 03.07.2006** *Continuous Interior Point Methods for Optimal Control Problems and their Discretization*  
RICAM, Linz, Österreich
- 24.07.2006** *Preconditioning Interior Point Methods for PDE optimization*  
GAMM/SIAM Conference on Applied Linear Algebra, Düsseldorf

### Roland Wessály

- 27.09.2006** *Optimization in Telecommunications*  
Business School, Fribourg, Schweiz

## Stefan Zachow

- 01.03.2006** *Computergestützte Planung in der Kopfchirurgie*  
Kolloquiumsvorlesung an der Medizinischen Hochschule Hannover, Klinik und Poliklinik für Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie
- 06.03.2006** *Bilder aus der Wissenschaft – Visualisierung am ZIB*  
3D-Präsentation für die Arbeitsgruppe „Das Technische Bild“ des Hermann-von-Helmholtz-Zentrums für Kulturtechnik, ZIB, Berlin
- 29.06.2006** *CFD simulation of nasal airflow: Treatment planning for functional rhinosurgery*  
10. Annual Conference of the Int. Society for Computer Aided Surgery (ISCAS/CARS), Osaka, Japan
- 30.06.2006** *Is the course of the mandibular nerve deducible from the shape of the mandible?*  
12. Computed Maxillofacial Imaging Congress (CMI/CARS), Osaka, Japan
- 31.08.2006** *CFD simulation of nasal airflow: Treatment planning for functional rhinosurgery*  
Vortrag an der HNO-Klinik des Karolinska Hospitals in Stockholm, Schweden
- 14.10.2006** *Planung und Simulation in der funktionellen Rhinochirurgie*  
AK-MedVis-Treffen im Rahmen der Curac an der Medizinischen Hochschule Hannover
- 14.10.2006** *Die Bedeutung der Qualität von 3D-Geometrie, Rechengitter und Visualisierung für die Aussagekraft der numerischen Simulation der Strömung durch die Nase*  
16. Jahrestreffen der Arbeitsgemeinschaft Klinische Immunologie, Allergologie und Umweltmedizin der Deutschen Gesellschaft für Hals-Nasen-Ohren-Heilkunde, Kopf- und Hals-Chirurgie, AG Respiratorische Funktion der Nase an der Charité, Campus Virchow-Klinikum
- 04.11.2006** *Statistical 3D-Shape Analysis and Applications in Medicine*  
Vortrag im Rahmen des Aschauer Soirées der Deutschen Gesellschaft für Auxologie
- 22.11.2006** *Computergestützte Therapieplanung in der Kopfchirurgie*  
Kolloquiumsvorlesung an der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Medizinische Computervisualistik, Institut für Simulation und Graphik

## Lin Zschiedrich

- 24.01.2006** *Advanced FEM analysis of Nano-Resonators*  
Photonics West 2006, San Jose, USA
- 25.04.2006** *Efficient 3D Finite Element Simulation of Fiber-Chip Coupling*  
OSA IPRA/Nano 2006, Uncasville, USA
- 14.06.2006** *Adaptive FEM/PML Method for Resonances in Optical Devices*  
Mathematics of Finite Elements and Applications (MAFELAP) 2006, The Brunel Institute of Computational Mathematics, Uxbridge, Vereinigtes Königreich

## B2: Vorlesungen und Seminare

### Wolfgang Baumann: TU Berlin

- WS 05/06** *Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP* (Integrierte Veranstaltung, zusammen mit Hinnerk Stüben)
- WS 06/07** *Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP* (Integrierte Veranstaltung, zusammen mit Hinnerk Stüben)

### Ralf Borndörfer: TU Berlin

- WS 06/07** *ARRIVAL/MATHEON Fall School 2006 on Timetabling and Line Planning* (Blockseminar)
- WS 06/07** *INFRATRRAIN Autumn School 2006, TU Berlin* (Blockseminar)
- WS 06/07** *Ganzzahlige Optimierung im öffentlichen Verkehr* (Vorlesung, zusammen mit Christian Liebchen und Marc Pfetsch)
- WS 06/07** *Geometrische Varianten kombinatorischer Optimierungsprobleme* (Seminar)

**Ralf Borndörfer: EPN Quito, Ecuador**

SS 06 *Optimization in Transportation* (Blockseminar)

**Manfred Brandt: HU Berlin**

SS 06 *Funktionentheorie II* (Vorlesung)

**Peter Deuffhard: FU Berlin**

WS 05/06, SS 06 *Oberseminar Numerische Mathematik/Scientific Computing*

(zusammen mit Herbert Gajewski (FUB/WIAS), Rupert Klein (FUB/PIK/ZIB), Ralf Kornhuber (FUB), Roswitha März (HU), Christoph Schütte (FUB), J. Sprekels (HU/WIAS), F. Tröltzsch (TUB))

WS 05/06, SS 06 *Seminar für Diplomanden und Doktoranden*

(zusammen mit Rupert Klein (FUB/PIK/ZIB), Ralf Kornhuber (FUB), Christoph Schütte (FUB))

WS 05/06 *Seminar Modellierung und Simulation in Medizin und Biologie*

(zusammen mit Ralf Kornhuber (FUB))

WS 05/06 *Seminar Numerische Lineare Algebra*

(zusammen mit Ralf Kornhuber (FUB))

SS 06 *Seminar Homogenisierung – Analysis und Numerik*

(zusammen mit Reinhard Hochmuth (TU Bergakademie Freiberg/U Kassel))

**Martin Grötschel: TU Berlin**

WS 05/06 *Spieltheorie in der Telekommunikation* (Blockseminar, ZIB, Berlin)

SS 06 *Graphen- und Netzwerkalgorithmen (ADM I)* (Vorlesung)

SS 06 *Sommerakademie der Studienstiftung des Deutschen Volkes* (Blockkurs, Fachhochschule Zittau-Görlitz, Görlitz)

SS 06 *Combinatorial Optimization at Work*

(Blockkurs, Peking, VR China)

WS 06/07 *Linear and Integer Programming (ADM II)* (Vorlesung)

WS 06/07 *Geometrische Varianten kombinatorischer Optimierungsprobleme* (Blockseminar/Vorbereitungstreffen)

**Hans-Christian Hege: Hochschule für Digitale Medienproduktion, Elstal**

WS 05/06 *Wissenschaftliche Visualisierung und Simulation* (Blockkurs)

SS 06 *Wissenschaftliche Visualisierung und Simulation* (Blockkurs)

SS 06/07 *Wissenschaftliche Visualisierung und Simulation* (Blockkurs)

**Hans-Christian Hege: Universidad Pompeu Fabra, Barcelona, Spanien**

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))

**Benjamin Hiller: FHW Berlin, Fachbereich Berufsakademie**

WS 06/07 *Graphentheorie* (Vorlesung, zusammen mit Andreas Tukscherer)

**Volker Kaibel: TU Berlin**

SS 06 *Analysis II für Ingenieure* (Vorlesung)

WS 06/07 *Lineare Algebra II* (Vorlesung)

**Arie M. C. A. Koster: TU Berlin**

WS 05/06 *Mathematical Tools for Engineers and Management II (GPE)* (Vorlesung)

- WS 05/06 *Mathematical Tools for Engineers and Management II (GPE)* (Übung)  
SS 06 *Mathematical Tools for Engineers and Management I (GPE)* (Vorlesung)  
SS 06 *Mathematical Tools for Engineers and Management I (GPE)* (Übung)  
WS 06/07 *Mathematical Tools for Engineers and Management II (GPE)* (Vorlesung)  
WS 06/07 *Mathematical Tools for Engineers and Management II (GPE)* (Übung)

**Monika Kuberek: HU Berlin**

- WS 05/06 *Bibliothekarische Verbände* (Seminar)  
WS 06/07 *Bibliothekarische Verbände* (Seminar)

**Marc Pfetsch: TU Berlin**

- SS 06 *Analysis II für Ingenieure* (Vorlesung)  
SS 06 *ARRIVAL/MATHEON Fall School 2006 on Timetabling and Line Planning* (Blockkurs)  
WS 06/07 *Ganzzahlige Optimierung im öffentlichen Verkehr* (Vorlesung, zusammen mit Ralf Borndörfer und Christian Liebchen)

**Marc Pfetsch: EPN Quito**

- SS 06 *Optimization in Transportation* (Blockkurs)

**Alexander Reinefeld: HU Berlin**

- WS 06/07 *Praktische Informatik 1 in Bachelor-Studiengängen* (Vorlesung und Übungen, durchgeführt von Tobias Langhammer, Kathrin Peter und Florian Schintke)  
WS 06/07 *Parallele und Verteilte Systeme* (Forschungsseminar)

**Achim Schädle: FU Berlin**

- SS 06 *Spektralmethoden* (Seminar)  
WS 06/07 *Numerische lineare Algebra für Bioinformatiker* (Vorlesung)

**Frank Schmidt: FU Berlin**

- WS 06/07 *Computational Photonics* (Vorlesung)

**Rüdiger Stephan: TU Berlin**

- SS 06 *Graphen- und Netzwerkalgorithmen* (Übung)  
WS 06/07 *Linear and Integer Programming* (Übung)

**Hinnerk Stüben: TU Berlin**

- WS 05/06 *Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP* (Integrierte Veranstaltung, zusammen mit Wolfgang Baumann)  
WS 06/07 *Einführung in die parallele Programmierung mit MPI und OpenMP* (Integrierte Veranstaltung, zusammen mit Wolfgang Baumann)  
WS 06/07 *Hochleistungsrechnen für Naturwissenschaftler* (Vorlesung)

**Gerd Teschke: Freie Universität Berlin**

- SS 06 *Mathematische Methoden der Bildverarbeitung* (Vorlesung)  
WS 06/07 *Inverse Probleme und Wavelet Analysis* (Vorlesung)

**Andreas Tuchscherer: FHW Berlin, Fachbereich Berufsakademie**

- WS 06/07 *Graphentheorie* (Vorlesung, zusammen mit Benjamin Hiller)



**Marcus Weber: FU Berlin**

**WS 05/06** *Algorithmische Bioinformatik: Kraftfeldmethoden I+II* (Vorlesungseinheiten)

**SS 06** *Polymer Therapeutics: Computational Drug Design I-III* (Vorlesungseinheiten)

**B3: Mitveranstalter auswärtiger Tagungen****Artur Andrzejak**

**16.01.–17.01.2006** *2nd CoreGRID Workshop on GRID and P2P Systems Architecture (Konferenzleitung)*, LIAFA, Université Paris 7, Paris, Frankreich

**Ralf Borndörfer**

**20.–22.02.2006** *Multikonferenz Wirtschaftsinformatik 2006*, Passau

**Wolfgang Dalitz**

**19.–20.09.2006** *Minisymposium „Mathematik und Internet“ der Fachgruppe Information und Kommunikation (IuK) bei der Jahrestagung 2006 der DMV*, Bonn

**Peter Deuffhard**

**22.–24.09.2005** 7<sup>th</sup> *Hellenic European Research on Computer Mathematics and its Applications (HERCMA) Conference* (Mitglied des Scientific Programme Committees), Athen

**Andreas Eisenblätter**

**08.–11.05.2006** *COFIN-MATHEON Workshop “Advances in Telecommunications Network Optimization and Provisioning”* (Co-Organisator), Villa Vigoni, Menaggio, Italien

**Martin Grötschel**

**24.–25.01.2006** *Begutachtung des MATHEON*, TU Berlin

**03.03.2006** *MATHEON AA B Industry Day*, TU Berlin

**08.05.–11.05.2006** *Workshop: Advances in Telecommunication, Network Optimization*, Villa Vigoni, Menaggio, Italien

**16.–18.07.2006** *Treffen des Wissenschaftlichen Beirates des MATHEON*, TU Berlin

**18.–19.08.2006** *IMU General Assembly*, Santiago de Compostela, Spanien

**22.–30.08.2006** *ICM 2006 und Rahmenveranstaltungen*, Madrid, Spanien

**16.11.2006** *MATHEON-Festveranstaltung* anlässlich des Beginns der 2. Förderperiode, TU Berlin

**Hans-Christian Hege**

**30.01.–03.02.2006** *Int. Conf. on Computer Graphics, Visualization and Computer Vision 2006 (Member of the Scientific Programme Committee)*, Plzen, Tschechien

**02.–03.03.2006** *Simulation and Visualization 2006 (Member of the Scientific Programme Committee)*, Magdeburg

**08.–10.05.2006** *Eurographics/IEEE-VGTC Symposium on Visualization (Member of the Scientific Programme Committee)*, Lissabon, Portugal

**19.–21.06.2006** *International Workshop on Combinatorial Image Analysis 2006 (Member of the Scientific Programme Committee)*, Berlin

**26.–28.06.2006** *Eurographics Symposium on Geometry Processing 2006 (Member of the Scientific Programme Committee)*, Cagliari, Italien

**29.–30.07.2006** *IEEE/EG Symposium on Point-Based Graphics 2006 (Member of the Scientific Programme Committee)*, Boston, USA

- 30.–31.07.2006** *IEEE/EG Int. Workshop on Volume Graphics 2006 (Member of the Scientific Programme Committee)*, Boston, USA
- 27.–29.09.2006** *2nd Int. Symp. on Computational Life Science (Area Chair Scientific Visualization)*, Cambridge, Vereinigtes Königreich
- 29.10.–03.11.2006** *IEEE Visualization 2006 (Member of the Scientific Programme Committee)*, Baltimore, USA
- 13.–13.11.2006** *Workshop on Ultra-Scale Visualization (Co-Organizer)*, Tampa, USA

### **Arie M. C. A. Koster**

- 20.–24.03.2006** *ADONET/COST293 Spring School on Combinatorial Optimization and Communication Networks (Mitglied im Organizing and Program Committee)*, Budapest, Ungarn
- 21.–23.03.2006** *5th COST 293 Management Committee meeting*, Budapest, Ungarn
- 30.03.–01.04.2006** *The Eighth INFORMS Telecommunications Conference (Mitglied Program Committee)*, Dallas, TX, USA
- 08.–11.05.2006** *COFIN-Matheon workshop “Advances in Telecommunications Network Optimization and Provisioning” (Co-Organisator)*, Villa Vigoni, Menaggio, Italien
- 19.–21.06.2006** *6th COST 293 Management Committee meeting and 1st Annual GRAAL workshop on Graphs and Algorithms for Communication Networks*, Nottingham, Großbritannien
- 22.–24.06.2006** *32nd International Workshop on Graph-Theoretic Concepts in Computer Science (WG 2006, Mitglied Program Committee)*, Bergen, Norwegen
- 08.–10.09.2006** *7th COST 293 Management Committee meeting and Discussion Workshop*, Zürich, Schweiz

### **Alexander Reinefeld**

- 29.08.–01.09.2006** *Grid and Cluster Computing: Models, Middleware and Architectures*, Europar Topic 6, Dresden

### **Wolfram Sperber**

- 19.–20.09.2006** *Minisymposium „Mathematik und Internet“ der Fachgruppe Information und Kommunikation (IuK) bei der Jahrestagung 2006 der DMV*, Bonn

### **Thomas Steinke**

- 28.06.2006** *Is Reconfigurable Computing the Next Generation Supercomputing?*, BoF-Session, ISC 2006, Dresden

### **Gerd Teschke**

- 22.–27.01.2006** *Co-Organizer: HASSIP Conference Recent Progress in Wavelet Analysis and Frame Theory*, Bremen
- 11.–14.09.2006** *Scientific Committee: HASSIP Conference Multiscale Methods, Sparse Decompositions and Parsimonious Statistics*, Neuherberg bei München

## Anhang C: Tagungen und Gäste am ZIB

### C1: Gastvorträge

- 25.01.2006** Angelika Wiegele (Universität Klagenfurt):  
*Mixing semidefinite and polyhedral relaxations in a Branch and Bound framework for solving the Max-Cut problem*
- 13.02.2006** Jens Mittelbach, Michaela Probst (FU Berlin):  
*Automatische Indexierung: Intelligent Capture/Milos*
- 13.02.2006** Manfred Walter (FHTW Berlin):  
*Intelligent Capture – Praxisbericht aus der FHTW*
- 02.03.2006** Nikola Milanovic (HU Berlin):  
*Architectural Support for Automatic Service Composition*
- 18.04.2006** Steffen Staab (Universität Koblenz-Landau):  
*Semantic Clustering*
- 27.04.2006** Nam Dung Hoang (ZIB-Stipendiat, Hanoi, Vietnam):  
*Dirichlet Feedback Control for the Stabilization of Unstable Parabolic Systems: Application to Heat Transfer Control in Fluid Flow*
- 13.05.2006** Andreas Langenhan, Oliver Grzegorski (IVU Traffic Technologies AG, Berlin):  
*Nahverkehrsplanung und -optimierung mit MICROBUS*
- 22.05.2006** Anders Adamson (Technische Universität Darmstadt, Fachbereich Informatik):  
*Point Sampled Cell Complexes*
- 02.06.2006** Aslak Tveito (Simula Research Laboratory, Lysaker, Norwegen):  
*Numerical simulation of atrial fibrillation and radiofrequency ablation*
- 03.07.2006** Ronald Holzlöhner (European Southern Observatory):  
*Hollow Core Photonic Crystal Fibers for Laser Guide Stars*
- 05.07.2006** Gitta Kutyniok (Justus-Liebig-Universität Giessen):  
*Shearlets: Geometrical image processing using a wavelet-based approach*
- 10.07.2006** Leif Kobbelt (RWTH Aachen, Computer Graphics & Multimedia):  
*Augmentation of 3D Models*
- 15.08.2006** Marc Pouget (INRIA):  
*Extraction of Ridges and Umbilics on Surfaces*
- 30.08.2006** Maarten van Steen (Vrije Universiteit Amsterdam):  
*Some thoughts on supporting high-available services in XtremOS*
- 25.09.2006** Mario Botsch (ETH Zürich):  
*PriMo: Coupled Prisms for Intuitive Surface Modeling*
- 12.10.2006** Barbara Block (GBV, Göttingen):  
*Als wäre es katalogisiert von uns – Konvertierungen von Verlagsdaten*
- 12.10.2006** Andreas Heise (SDB, SBB SPK, Berlin):  
*Virtuelle Siegel aus einer virtuellen Leihverkehrsregion und was es damit auf sich hat – Erschließung von Nationallizenzen in der Zeitschriftendatenbank*
- 12.10.2006** Remco van Capelleveen (FU Berlin):  
*Volltexte, Nationallizenzen, E-Books – Ja bitte!*
- 18.10.2006** Gunnar Dolling (DFG-Forschungszentrum CFN, Universität Karlsruhe):  
*Negativ brechende Metamaterialien werden „sichtbar“*
- 19.10.2006** Uwe Bandelow (WIAS Berlin):  
*Modellierung und Simulation optoelektronischer Komponenten für die Datenkommunikation*
- 19.10.2006** Michael Hetterich (DFG-Forschungszentrum CFN, Universität Karlsruhe):  
*Development of pyramidal and pillar type optical cavities*

- 19.10.2006** Wolfgang Löffler (DFG-Forschungszentrum CFN, Universität Karlsruhe):  
*Quantuminformationsverarbeitung mit Halbleiterquantenpunkten und Cavities*
- 26.10.2006** Balazs Dezsö (Eötvös Loránd University of Sciences, Budapest, Ungarn):  
*LEMON – Library of Efficient Models and Optimization in Networks*
- 06.11.2007** Peter Schröder (California Institute of Technology):  
*Discrete Conformal Mappings via Circle Patterns*
- 14.11.2006** Steffen Hauth (Universität Kaiserslautern):  
*Unified Notation for Spline Representations*
- 22.11.2006** Nam Dung Hoang (ZIB-Stipendiat, Hanoi, Vietnam):  
*Cost-sharing problem*
- 22.11.2006** Andreas Sabisch (FU Berlin):  
*Electronic Resource Management mit Verde – Erfahrungen der Einführung*
- 30.11.2006** László Végh (Eötvös Loránd University of Sciences, Budapest, Ungarn):  
*Connectivity Augmentation Algorithms*

## Anhang C2: Gastaufenthalte

- Jon Scouten** (Institut für Strömungstechnik und Technische Akustik, TU Berlin)  
01.01.2006–28.02.2006
- Akiyoshi Shioura** (Tohoku University, Sendai City, Japan)  
01.01.–29.09.2006
- Reinhard Schneider** (European Molecular Biology Laboratory, Heidelberg)  
19.01.2006
- Fanie Terblanche** (School for Computer, Statistical and Mathematical Sciences North-West University, Potchefstroom, Südafrika)  
21.01.–11.02.2006
- Annegret Wagler** (Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg)  
06.–08.02.2006
- Ingo Dahm, Olaf Grauschmitt** (Microsoft Deutschland GmbH)  
07.02.2006
- Jens Mittelbach** (FU Berlin)  
13.02.2006
- Michaela Probst** (FU Berlin)  
13.02.2006
- Stefan Winkler** (BSZ Baden-Württemberg)  
21.02.2006
- Marc A. Scheidler** (TU Berlin)  
22.02.2006
- Derrick Kondo** (INRIA Futurs, Paris Sud, Frankreich)  
01.–07.03.2006
- Markus Reuther** (Hochschule Mittweida)  
06.03.–22.07.2006
- Yuri Faenza** (Università degli Studi di Roma „Tor Vergata“, Rom, Italien)  
27.03.–08.09.2006
- Nam Dung Hoang** (Hanoi, Vietnam)  
31.03.–31.12.2006
- Yun Huang** (University of California, San Diego, USA)  
01.04.–12.06.2006
- Marc Steinbach** (Leibniz-Universität Hannover)  
01.04.–31.08.2006
- Adrian Zymolka** (atesio GmbH, Berlin)  
01.04.–31.12.2006

- Steffen Staab** (Universität Koblenz-Landau)  
18.–19.04.2006
- Brigitte Lutz-Westphal** (TU Berlin)  
01.05.–30.09.2006
- Jingdi Zeng** (Universita della Calabria, Italien)  
19.05.–23.06.2006
- Aslak Tveito** (Simula Research Laboratory, Lysaker, Norwegen)  
01.–03.06.2006
- Frank Bauer** (Universität Göttingen)  
05.–06.06.2006
- Kai-Henning Gerlach** (Bowker Company, Berlin)  
13.06.2006
- Thomas Wolf (ZIB-Fellow)** (Brock University, St. Catharines, Kanada)  
19.–24.06.2006
- Horst Simon** (National Energy Research Scientific Computing Division, Lawrence Berkely National Laboratory, Berkeley, USA)  
24.–27.06.2006
- Wolfram Büttner** (OneSpin Solutions GmbH, M<sup>n</sup>chen)  
25.–27.06.2006
- Thomas Liebling** (Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), Schweiz)  
25.–27.06.2006
- Ehrhard Winter** (E-Plus Mobilfunk GmbH, Düsseldorf)  
25.–27.06.2006
- Alfred Louis** (Universität des Saarlandes, Saarbrücken)  
26.–27.06.2006
- Joachim Römel** (Bayer HealthCare AG, Leverkusen)  
26.–27.06.2006
- Jeremie Szeftel** (Université Bordeaux 1, France)  
26.–30.06.2006
- Ronald Holzlöhner** (European Southern Observatory, München)  
03.07.2006
- Gitta Kutyniok** (Justus-Liebig-Universität Giessen)  
04.–05.07.2006
- Seif Haridi** (Swedish Institute of Computer Science, Schweden)  
06.–28.07.2006
- Gregor Karbstein** (TU Berlin)  
01.08.–31.10.2006
- Juan Carlos De los Reyes** (Escuela Politécnica Nacional, Quito, Ekuador)  
14.08. und 23.08.2006
- Rolf Krause** (Universität Bonn)  
24.–30.08.2006
- Thorsten Hohage** (Institut für Numerische und Angewandte Mathematik, Georg-August-Universität Göttingen)  
29.08.–02.09.2006
- Lothar Nannen** (Institut für Numerische und Angewandte Mathematik, Georg-August-Universität Göttingen)  
29.08.–02.09.2006
- Tobias Achterberg** (ILOG)  
01.09.–31.12.2006
- Atsuyuki Hara** (Graduate School of Library, Information and Media Studies, University of Tsukuba, Japan)  
08.09.2006
- Yukiko Sakai** (Shinanomachi Media Center/Keio University, Japan)  
08.09.2006

- Susanne Maier** (Staatsbibliothek zu Berlin Preußischer Kulturbesitz)  
18.–22.09.2006
- Andreas Junghanns** (Daimler-Chrysler)  
21.09.2006
- Jonathan Schaeffer** (University of Alberta, Edmonton, Kanada)  
21.09.2006
- Rolf Krause** (Universität Bonn)  
25.–26.09.2006
- Barbara Block** (GBV, Göttingen)  
12.10.2006
- Remco van Capelleveen** (FU Berlin)  
12.10.2006
- Seif Haridi** (Swedish Institute of Computer Science, Schweden)  
12.–13.10.2006
- Peter van Roy** (Catholic University of Louvain, Belgium)  
12.–13.10.2006
- Andreas Heise** (ZDB, SBB SPK, Berlin)  
12.10.2006
- Uwe Bandelow** (WIAS, Berlin)  
18.–19.10.2006
- Gunnar Dolling** (DFG-Forschungszentrum CFN, Universität Karlsruhe)  
18.–19.10.2006
- Michael Hetterich** (DFG-Forschungszentrum CFN, Universität Karlsruhe)  
18.–20.10.2006
- Wolfgang Löffler** (DFG-Forschungszentrum CFN, Universität Karlsruhe)  
18.–20.10.2006
- Thora Gylfadóttir** (National and University Library of Iceland, Reykjavík, Island)  
19.10.2006
- Sigrún Hauksdóttir** (Consortium of Icelandic Libraries, Reykjavík, Island)  
19.10.2006
- Balazs Dezsö** (Eötvös Loránd University of Sciences, Budapest, Ungarn)  
23.–29.10.2006
- Ramiro Torres** (Escuela Politécnica Nacional, Quito, Ekuador)  
01.11.–29.12.2006
- László Végh** (Eötvös Loránd University of Sciences, Budapest, Ungarn)  
03.11.–02.12.2006
- Dietrich Braess** (Ruhr Universität Bochum)  
16.–17.11.2006
- Gitta Kutyniok** (Justus-Liebig-Universität Giessen)  
14.–15.11.2006
- Xuan Phu Hoang** (Institute of Mathematics, Vietnamese Academy of Science and Technology (VAST), Hanoi, Vietnam)  
15.–18.11.2006
- Günter Steinmeyer** (Max-Born-Institut)  
20.11.2006
- Peter Stone** (BHP Billiton, Melbourne, Australien)  
21.–22.11.2006
- Andreas Sabisch** (FU Berlin)  
22.11.2006
- Luca Pavarino** (Università di Milano, Italien)  
27.11.–03.12.2006
- Ali Ghodsi** (Swedish Institute of Computer Science, Schweden)  
29.11.–01.12.2006

**Reinhard Schneider** (European Molecular Biology Laboratory, Heidelberg)  
13.12.2006

**Jörg Sack** (Carleton University, Ottawa, Kanada)  
19.–20.12.2006

## Anhang C3: Tagungen und Veranstaltungen

**26.01.2006** KOBV-Workshop „Fernleihe“  
Veranstalter: KOBV-Zentrale

**13.02.2006** KOBV-Workshop „Verbesserung des Retrievals“  
Veranstalter: Lavinia Hodoroba, Andres Imhof, Monika Kuberek, Beate Rusch

**21.02.2006** KOBV-Workshop „Virtuelle Auskunft“  
Veranstalter: KOBV-Zentrale

**24.–26.02.2006** Meeting of the Committee on Electronic Information and Communication (CEIC)  
Veranstalter: Martin Grötschel

**26.–28.02.2006** EC Meeting of the International Mathematical Union  
Veranstalter: Martin Grötschel

**26.04.2006** AstroGrid-D-Workshop  
Veranstalter: Mikael Höggqvist, Thomas Röblitz, Alexander Reinefeld, Florian Schintke

**18.–19.05.2006** DGrid 2. Datenmanagement-Workshop  
Veranstalter: Mikael Höggqvist, Tobias Langhammer, Daniel Mauter, Kathrin Peter, Alexander Reinefeld, Florian Schintke

**12.10.2006** KOBV-Workshop „Nationallizenzen“  
Veranstalter: KOBV-Zentrale

**16.10.–18.10.2006** Berliner Herbsttreffen zur Museumsdokumentation  
Veranstalter: Fachgruppe Dokumentation im Deutschen Museumsbund, Institut für Museumsforschung der Staatlichen Museen zu Berlin, ZIB Berlin, <http://www.museumsbund.de/cms/index.php?id=625&L=0>

**08.11.2006** HLRN-Telekolloquium  
Veranstalter: Hubert Busch

**21.12.2006** Optimierungstag  
Veranstalter: Abteilung Optimierung

## Anhang C4: Ausstellungen und Softwaredemonstrationen

**24.01.2006** „Strategic Planning in Public Transport“  
Veranstalter: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt B1

**24.01.2006** „Service Planning in Public Transport“  
Veranstalter: DFG-Forschungszentrum MATHEON, Projekt B15

**22.02.2006** Physikerinnen und Physiker in Industrie und Forschung: Computational Nano-Optics  
Veranstalter: ZIB, Berlin

**21.03.2006** 95. Deutscher Bibliothekartag, Dresden, Demonstration des KOBV-Portals  
Veranstalter: Hildegard Franck, Andres Imhoff, Monika Kuberek, Stefan Lohrum, Beate Rusch

**13.06.2006** Präsentation der Firma Bowker, Berlin, „Syndetic Solutions – Catalog Enrichment Services“  
Veranstalter: KOBV-Zentrale, Kai-Henning Gerlach (Repräsentant der Bowker Company)

**18.–19.09.2006** SPIE Photomask Technology, San Jose, USA, Präsentation des Softwareprogramms JCM-harmony  
Veranstalter: Sven Burger, Frank Schmidt

## Anhang C5: Mathematik und Informatik für die Öffentlichkeit

Das ZIB und seine Arbeitsbereiche erfreuen sich seit Jahren eines ständig steigenden Interesses bei Schüler- und Studentengruppen. Dies zeigt die Vielzahl von Führungs- und Vortragsveranstaltungen, die von Mitarbeitern des ZIB sowohl im Haus als auch extern durchgeführt werden.

Der Interessenschwerpunkt des Publikums liegt dabei auf den Anwendungen der Mathematik einerseits und der Informationstechnik bzw. den Hochleistungsrechnern andererseits. An beispielhaften Projekten werden mathematische Methoden, ihre Umsetzung in spezielle Algorithmen und die Bearbeitung auf Rechnern der verschiedenen Leistungsklassen demonstriert. Weiterhin werden aktuelle Forschungsarbeiten aus der Informatik und die vorhandenen Systeme im Rechner- und Datenraum mit den roboterbedienten Bandsilos vorgestellt. Während Rechner und Informatik auf ohnehin vorhandenes breites Interesse bei Schülern und Studenten stoßen, ist der Einsatzbereich der Mathematik nicht immer offensichtlich. Die Veranstaltungen tragen zur Aufklärung darüber bei, in welchen Bereichen und mit welchen Methoden die Mathematik überall eine Rolle spielt.

- 19.01.2006** Besuch einer Schülergruppe der Käthe-Kollwitz-Oberschule, Berlin  
 Veranstalter: Daniel Baum, Frank Cordes, Peter Deuffhard, Bernd Kallies, Olaf Paetsch, Thomas Schlechte, Johannes Schmidt-Ehrenberg
- 15.02.2006** Vortrag zum High Performance Computing und Besichtigung der Hochleistungsrechner, Besuch von Studenten der TU Berlin  
 Veranstalter: Wolfgang Baumann
- 15.02.2006** Mathematik beflügelt die gelben Engel, Schülervortrag, Kopernikus-Gymnasium, Blankenfelde  
 Veranstalter: Andreas Tuchscherer
- 16.02.2006** Mathematik für die Müllabfuhr: das Chinesische Postbotenproblem, Heinrich-Hertz-Gymnasium Berlin  
 Veranstalter: Brigitte Lutz-Westphal
- 16.02.2006** Mathematik ist überall – insbesondere in der Medizin, Kopernikus-Gymnasium Blankenfelde  
 Veranstalter: Martin Weiser
- 22.02.2006** Besuch von Physikstudenten der TU, die sich über Arbeitsmöglichkeiten am ZIB informieren möchten  
 Veranstalter: Sven Burger, Peter Deuffhard, Bernd Kallies, Olaf Paetsch, Jan Pomplun
- 24.02.2006** Wo steckt die Mathematik im Telefon?, Jahrestag des Georg-Christoph-Lichtenberg-Gymnasiums, Berlin  
 Veranstalter: Andreas Eisenblätter
- 25.02.2006** Maler, Mörder, Mathematiker, Vortrag an der Berlin-Brandenburgischen Akademie der Wissenschaften  
 Veranstalter: Peter Deuffhard
- 09.03.2006** Der Fußball und das Geld, Vortrag vor dem Profilkurs Mathematik der Lilly-Braun-Oberschule Spandau, ZIB Berlin  
 Veranstalter: Volker Kaibel, Bernd Kallies, Olaf Paetsch
- 24.04.2006** Komplexität – untersuchen, beschreiben, beherrschen, Vortrag an der Urania Berlin  
 Veranstalter: Martin Grötschel
- 26.04.2006** „Quadratschädel: Von der Mund-Kiefer-Gesichtschirurgie zum virtuellen Smiley“, „Verborgenes sichtbar machen“ und „Übungen zur Elastomechanik in NetLogo“, Besuch von hochbegabten Schülern der 8. bis 10. Klasse des Sächsischen Landesgymnasiums Sankt Afra, Meissen  
 Veranstalter: Daniel Baum, Sven Burger, Peter Deuffhard, Hans-Christian Hege, Ralf Götz, Bernd Kallies, Anja Kuß, Sebastian Orłowski, Anton Schiela, Martin Weiser
- 28.04.2006** Kollidierende Schwarze Löcher, Zukunftstag 2006 am MPI für Gravitationsphysik  
 Veranstalter: Ralf Kähler
- 06.05.2006** Von Alcuins Transportproblemen zur Verkehrsoptimierung, 11. Berliner Tag der Mathematik, TU Berlin  
 Veranstalter: Ralf Borndörfer
- 06.05.2006** Mathematik in Hollywood, 11. Berliner Tag der Mathematik, TU Berlin  
 Veranstalter: Peter Deuffhard
- 18.05.2006** Besuch von Leistungskurs-Schülern der Lily-Braun-Oberschule im ZIB  
 Veranstalter: Wolfgang Baumann, Volker Kaibel, Olaf Paetsch



**19.05.2006** Sudokus, Internet und Nahverkehr, Abend-Vortrag, Urania Berlin  
Veranstalter: Volker Kaibel

**30.05.2006** Mathematik nach dem Studium, TU-Infotage 2006, TU Berlin  
Veranstalter: Ralf Borndörfer

**13.05.2006** Ein wichtiger Termin für die Außendarstellung des ZIB ist die jährliche Teilnahme an der „Langen Nacht der Wissenschaften“.

Die Besucherzahlen 2006 sind, verglichen mit dem Vorjahr, zurückgegangen und haben sich auf ein Normalmaß von ca. 800 Personen eingependelt. Geboten wurden unter anderem: 3D-Wissenschaftskino mit Visualisierungen aus naturwissenschaftlichen und medizinischen Anwendungsprojekten des ZIB, Beiträge aus den Bereichen Nano-Optik, Wegeoptimierung, Suchmaschinen im Web, Mathematik in der Wettervorhersage sowie Führungen zur Besichtigung der Hochleistungsrechner und des Datenroboters. Die Supercomputerführungen zogen 170 Besucher an.

Mit Vorträgen waren an der Langen Nacht der Wissenschaften beteiligt:

- Maro Bader: 3-D-Wissenschaftskino
- Wolfgang Baumann: Besichtigung von Supercomputer und Datenroboter
- Ralf Borndörfer: Der schnellste Weg zum Ziel
- Hubert Busch: Besichtigung von Supercomputer und Datenroboter
- Malte Clasen: 3-D-Wissenschaftskino
- Hans-Christian Hege: 3-D-Wissenschaftskino
- Volker Kaibel: Der Fußball und das Geld
- Bernd Kallies: Besichtigung von Supercomputer und Datenroboter
- Hans Lamecker: Frösche und Prinzen: In eine Form gepresst
- Olaf Paetsch: Kinderprogramm
- Christoph Petz: 3-D-Wissenschaftskino
- Marc Pfetsch: Der schnellste Weg zum Ziel
- Kai Pöthkow: TSP-Gesichter
- Markus Reuther: LNdW-Wegeoptimierung
- Frank Schmidt: Vom Regenbogen zur Nanooptik
- Wolfram Sperber: Alles Google oder was – ein Ausflug in die Welt der Suchmaschinen
- Thomas Steinke: Supercomputer und Datenroboter
- Hinnerk Stüben: Besichtigung von Supercomputer und Datenroboter
- Gerd Teschke: Mathematik oder wie das Wetter besser wird
- Bertram Wölk: TSP-Gesichter
- Stefan Zachow: Kinderprogramm, Frösche und Prinzen: In eine Form gepresst

Erstmals beteiligten sich Firmen als externe Kooperationspartner des ZIB mit eigenen Ständen und Vorträgen:

- IVU Traffic Technologies AG
- Lufthansa Systems Berlin
- Lenné3D Software Solutions for Vegetation & Landscapes

**18.05.2006** Besuch von Leistungskurs-Schülern der Lily-Braun-Oberschule im ZIB  
Veranstalter: Wolfgang Baumann, Volker Kaibel, Olaf Paetsch

**20.06.2006** Besuch der Studenten des FB Computational Science der TU Chemnitz  
Veranstalter: Daniel Baum, Sven Burger, Hans-Christian Hege, Peter Deuffhard, Bernd Kallies, Olaf Paetsch, Martin Weiser

**22.06.2006** 3D-Visualisierung und Datenanalyse, Präsentation für Mathematik-Studenten der Universität Hamburg  
Veranstalter: Hans-Christian Hege, Hans Lamecker, Johannes Schmidt-Ehrenberg

**29.06.2006** Sudokus, Internet und Nahverkehr, Vortrag vor Studierenden der Universität Leipzig (Institut für Kommunikations- und Medienwissenschaft), TU Berlin  
Veranstalter: Volker Kaibel

- 29.06.2006** Besuch einer Schülergruppe des Schulzentrums SII Utbremen (Leistungskurs Mathematik/Informationstechnik), Bremen  
Veranstalter: Florian Schintke
- 03.07.2006** Besuch einer Schülergruppe des Werner-von-Siemens-Gymnasiums, Berlin  
Veranstalter: Timm Baumeister, Bernd Kallies, Olaf Paetsch, Steffen Prohaska, Frank Schmidt, Johannes Schmidt-Ehrenberg
- 12.07.2006** Visualisierung in der Allgemeinen Relativitätstheorie, Sommeruniversität am MPI für Gravitationsphysik  
Veranstalter: Ralf Kähler
- 14.07.2006** Was ist Integer Programming?, Vortrag beim MATHEON-Nachwuchswochenende, Schloss Trebnitz  
Veranstalter: Volker Kaibel
- 20.07.2006** Sudokus, Internet und Nahverkehr, Vortrag beim „Wissenschaftssommer“, München  
Veranstalter: Volker Kaibel
- 17.08.2006** Bilder aus Daten: Wissenschaftliche Visualisierung, FU-Sommeruni 2006, FU Berlin  
Veranstalter: Olaf Paetsch
- 06.09.2006** „Strategische Linienplanung im Öffentlichen Nahverkehr“, „3D-Visualisierung“, Leistungskurs Physik der David-Roentgen-Schule, Neuwied  
Veranstalter: Vincent Jasper Dercksen, Hans-Christian Hege, Bernd Kallies, Olaf Paetsch, Christoph Petz, Marc Pfetsch, Martin Weiser
- 14.09.2006** „Angebotsplanung im öffentlichen Nahverkehr“, „Mathematik in der Therapieplanung“, „Mythologien, Morphing, Mathe und Medizin“, MATHEredakTION – Presstreff für Schülerzeitungsredakteure  
Veranstalter: Hans-Christian Hege, Marika Neumann, Martin Weiser
- 14.09.2006** Medizinische Visualisierung und Planung – Forschung am ZIB  
Veranstalter: Vortrag im Rahmen des Besuchs des MATHEON durch Philips Research, Hamburg Hans-Christian-Hege
- 27.09.2006** Besuch von Leistungskurs-Mathematik-Schülern des Vogelsang-Gymnasiums Solingen  
Veranstalter: Wolfgang Baumann, Peter Deuffhard, Hans Lamecker, Olaf Paetsch, Marcus Weber, Stefan Zachow
- 18.-20.10.2006** Minisymposium Nano Optics  
Veranstalter: Arbeitsgruppe Computational Nano-Optics
- 23.10.2006** Strategische Linienplanung im Öffentlichen Nahverkehr, Schülergruppe Albert-Schweitzer-Gymnasiums Eisenhüttenstadt  
Veranstalter: Peter Deuffhard, Bernd Kallies, Marc Pfetsch, Marcus Weber, Stefan Zachow
- 27.10.2006** Mathematik: Schlüsselwissenschaft für Schlüsseltechnologien, MATHEON-Schulvortrag, TU Berlin  
Veranstalter: Ralf Borndörfer
- 23.11.2006** Komplexität, was ist das?, Wissenschaftstage am von Saldern-Gymnasium, Brandenburg  
Veranstalter: Martin Grötschel
- 06.12.2006** Wissenschaftliche Visualisierung – berechnete Ästhetik?, Vortrag für Studenten der Hochschule für Gestaltung Karlsruhe  
Veranstalter: Hans-Christian Hege
- 13.12.2006** Vortrag über das MATHEON, Vortrag für Schüler des Georg-Cantor-Gymnasiums Halle  
Veranstalter: Martin Grötschel
- 13.12.2006** Sudokus, Internet und Nahverkehr, Vortrag vor Schülern des Georg-Cantor Gymnasiums Halle, TU Berlin  
Veranstalter: Volker Kaibel
- 21.12.2006** Vortrag zum High Performance Computing und Besichtigung der Hochleistungsrechner, Besuch von Studenten der FHTW Berlin im ZIB  
Veranstalter: Wolfgang Baumann