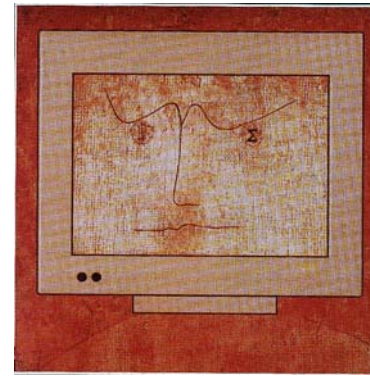
GWDG-Bericht Nr. 69

Kurt Kremer, Volker Macho (Hrsg.)

Forschung und wissenschaftliches Rechnen

Beiträge zum Heinz-Billing-Preis 2005



Gesellschaft für wissenschaftliche Datenverarbeitung mbH Göttingen

Forschung und
wissenschaftliches Rechnen

Titelbild:
Logo nach Paul Klee „Der Gelehrte“, Modifizierung durch I. Tarim,
Max-Planck-Institut für Psycholinguistik, Nijmegen.

GWDG-Bericht Nr. 69

Kurt Kremer, Volker Macho (Hrsg.)

Forschung und wissenschaftliches Rechnen

Beiträge zum Heinz-Billing-Preis 2005

Gesellschaft für wissenschaftliche Datenverarbeitung
Göttingen

2006

Die Gesellschaft für wissenschaftliche Datenverarbeitung mbH Göttingen ist eine gemeinsame Einrichtung der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e. V. und des Landes Niedersachsen. Die Max-Planck-Gesellschaft hat diesen Bericht finanziell gefördert.

Redaktionelle Betreuung:
Volker Macho (Max-Planck-Institut fuer Polymerforschung, Mainz)

Satz:
Gesellschaft für wissenschaftliche Datenverarbeitung mbH Göttingen,
Am Faßberg, D-37077 Göttingen

Druck: klartext GmbH, D-37073 Göttingen, www.kopie.de

ISSN: 0176-2516

Inhalt

Weitere Beiträge für den Heinz-Billing-Preis 2005

Vorwort

Der vorliegende Band der Reihe „Forschung und wissenschaftliches Rechnen“ enthält alle Beiträge, welche für den Heinz-Billing-Preis des Jahres 2005 eingereicht wurden sowie zwei rückblickende Artikel von Heinz Billing über die Anfänge des wissenschaftlichen Rechnens.

Der Hauptpreis ging in diesem Jahr an Patrick Jöckel und Rolf Sander vom Max-Planck-Institut für Chemie für ihre Arbeit „The Modular Earth Submodel System (MESSy) – A new approach towards Earth System Modeling“. MESSy ermöglicht die Simulation von geophysikalischen Erdsystemmodellen, in denen Prozesse sowohl in den Ozeanen, in der Luft und im Wasser berücksichtigt werden und deren Rückkopplungsmechanismen erfasst werden müssen. Mit MeSSy wird das Ziel verfolgt, ein umfassendes Modellierungstool zu erstellen, welches sämtliche hierzu relevanten Submodell-Programme miteinander verbinden kann. Geschrieben wurde das Programm in Fortran-90.

Auf den zweiten Platz kam der Beitrag „Geometric Reasoning with polymake“ von Ewgenij Gawrilow vom Institut für Mathematik der TU Berlin sowie von Michael Joswig vom Fachbereich Mathematik der TU Darmstadt. Polymake ist ein mathematisches Programmpaket zur Darstellung von Polytopen und zur Berechnung ihrer Eigenschaften. Auch dieses Programm ist in erster Linie ein Interface für eine Reihe anderer Programme, welche Teilaspekte in Zusammenhang mit Polytopen behandeln.

Der dritte Platz ging an den Beitrag „PyBioS – ein Modellierungs- und Simulationssystem für komplexe biologische Prozesse“ von Christoph Wierling vom Max-Planck-Institut für Molekulare Genetik in Berlin, der hiermit ein in Python geschriebenes, objektorientiertes und Web-basieren-

des Programmpaket vorstellt, welches für die Modellierung, Analyse und Simulation von biologischen Reaktionsnetzwerken im Bereich der Systembiologie Verwendung findet.

Zu guter Letzt möchten wir einige persönliche Erinnerungen von Prof. Heinz Billing abdrucken, in denen er aus seiner Sicht die Entstehungsgeschichte der so genannten „Göttinger Rechenmaschinen G1, G2 und G3“ sowie die Erfindung des Trommelspeichers beschreibt. Veröffentlicht sind diese Erinnerungen in dem Buch „Die Vergangenheit der Zukunft“, herausgegeben von Friedrich Genser und Johannes Hähnike. Der Nachdruck erfolgt mit freundlicher Genehmigung des Autors und der Herausgeber.

Bedanken wollen wir uns ganz herzlich bei Günter Koch, GWDG, für die Umsetzung der eingesandten Manuskripte in eine kompatible Druckvorlage. Besonderer Dank gebührt Dr. Theo Plesser, der uns die Lebenserinnerungen von Prof. Heinz Billing zusammen mit Abbildungen zur Verfügung gestellt hat. Dank auch an die Pressestelle der MPG für die Überlassung von Fotos.

Die Vergabe des Preises wäre ohne Sponsoren nicht möglich. Wir danken der Firma IBM Deutschland, welche auch 2005 als Hauptsponsor aufgetreten ist, für ihre großzügige Unterstützung.

Die hier abgedruckten Arbeiten sind ebenfalls im Internet unter der Adresse

www. billingpreis.mpg.de

zu finden.

Kurt Kremer, Volker Macho

Der Heinz-Billing-Preis 2005

Ausschreibung des Heinz-Billing-Preises 2005 zur Förderung des wissenschaftlichen Rechnens

Im Jahre 1993 wurde zum ersten Mal der Heinz-Billing-Preis zur Förderung des wissenschaftlichen Rechnens vergeben. Mit dem Preis sollen die Leistungen derjenigen anerkannt werden, die in zeitintensiver und kreativer Arbeit die notwendige Hard- und Software entwickeln, die heute für neue Vorstöße in der Wissenschaft unverzichtbar sind.

Der Preis ist benannt nach Professor Heinz Billing, emeritiertes wissenschaftliches Mitglied des Max-Planck-Institutes für Astrophysik und langjähriger Vorsitzender des Beratenden Ausschusses für Rechenanlagen in der Max-Planck-Gesellschaft. Professor Billing stand mit der Erfindung des Trommelspeichers und dem Bau der Rechner G1, G2, G3 als Pionier der elektronischen Datenverarbeitung am Beginn des wissenschaftlichen Rechnens.

Der Heinz-Billing-Preis zur Förderung des wissenschaftlichen Rechnens steht unter dem Leitmotiv

„EDV als Werkzeug der Wissenschaft“.

Es können Arbeiten eingereicht werden, die beispielhaft dafür sind, wie die EDV als methodisches Werkzeug Forschungsgebiete unterstützt oder einen neuen Forschungsansatz ermöglicht hat.

Folgender Stichwortkatalog mag als Anstoß dienen:

- Implementierung von Algorithmen und Softwarebibliotheken
- Modellbildung und Computersimulation
- Gestaltung des Benutzerinterfaces
- EDV-gestützte Messverfahren
- Datenanalyse und Auswerteverfahren
- Visualisierung von Daten und Prozessen

Die eingereichten Arbeiten werden referiert und in der Buchreihe „Forschung und wissenschaftliches Rechnen“ veröffentlicht. Die Jury wählt einen Beitrag für den mit € 3000,- dotierten Heinz-Billing-Preis 2005 zur Förderung des wissenschaftlichen Rechnens aus. Für die Beiträge auf den Plätzen 2 und 3 werden jeweils 300,- Euro vergeben. Die Beiträge zum Heinz-Billing-Preis, in deutscher oder englischer Sprache abgefasst, müssen keine Originalarbeiten sein und sollten möglichst nicht mehr als fünfzehn Seiten umfassen.

Da zur Bewertung eines Beitrages im Sinne des Heinz-Billing-Preises neben der technischen EDV-Lösung insbesondere der Nutzen für das jeweilige Forschungsgebiet herangezogen wird, sollte einer bereits publizierten Arbeit eine kurze Ausführung zu diesem Aspekt beigefügt werden.

Der Heinz-Billing-Preis wird jährlich vergeben. Die Preisverleihung findet anlässlich des 22. EDV-Benutzertreffens der Max-Planck-Institute am 17. November 2005 in Göttingen statt.

Beiträge für den Heinz-Billing-Preis 2005 sind bis zum 30. Juni 2005 einzureichen.

Heinz-Billing-Preisträger

1993: Dr. Hans Thomas Janka, Dr. Ewald Müller, Dr. Maximilian Ruffert
Max-Planck-Institut für Astrophysik, Garching
Simulation turbulenter Konvektion in Supernova-Explosionen in massereichen Sternen

1994: Dr. Rainer Goebel
Max-Planck-Institut für Hirnforschung, Frankfurt
- Neurolator - Ein Programm zur Simulation neuronaler Netzwerke

1995: Dr. Ralf Giering
Max-Planck-Institut für Meteorologie, Hamburg
AMC: Ein Werkzeug zum automatischen Differenzieren von Fortran Programmen

1996: Dr. Klaus Heumann
Max-Planck-Institut für Biochemie, Martinsried
Systematische Analyse und Visualisierung kompletter Genome am Beispiel von S. cerevisiae

1997: Dr. Florian Mueller
Max-Planck-Institut für molekulare Genetik, Berlin
ERNA-3D (Editor für RNA-Dreidimensional)

1998: Prof. Dr. Edward Seidel
Max-Planck-Institut für Gravitationsphysik, Albert-Einstein-Institut, Potsdam
Technologies for Collaborative, Large Scale Simulation in Astrophysics and a General Toolkit for solving PDEs in Science and Engineering

1999: Alexander Pukhov
Max-Planck-Institut für Quantenoptik, Garching
High Performance 3D PIC Code VLPL:
Virtual Laser Plasma Lab

2000: Dr. Oliver Kohlbacher
Max-Planck-Institut für Informatik, Saarbrücken
BALL – A Framework for Rapid Application Development in Molecular Modeling

2001: Dr. Jörg Haber
Max-Planck-Institut für Informatik, Saarbrücken
MEDUSA, ein Software-System zur Modellierung und Animation von Gesichtern

2002: Daan Broeder, Hennie Brugman und Reiner Dirksmeyer
Max-Planck-Institut für Psycholinguistik, Nijmegen
NILE: Nijmegen Language Resource Environment

2003: Roland Chrobok, Sigurður F. Hafstein und Andreas Pottmeier
Universität Duisburg-Essen
OLSIM: A New Generation of Traffic Information Systems

2004: Markus Rampp, Thomas Soddemann
Rechenzentrum Garching der Max-Planck-Gesellschaft, Garching
A Work Flow Engine for Microbial Genome Research

2005: Patrick Jöckel, Rolf Sander
Max-Planck-Institut für Chemie, Mainz
The Modular Earth Submodel System (MESSy)

Das Kuratorium des Heinz-Billing-Preises

Prof. Dr. Heinz Billing
Emeritiertes Wissenschaftliches Mitglied des Max-Planck-Institut für Astrophysik, Garching

Prof. Dr. Friedel Hossfeld
Forschungszentrum Jülich GmbH, Jülich

Prof. Dr. K. Ulrich Mayer
Max-Planck-Institut für Bildungsforschung, Berlin

Prof. Dr. Stefan Müller
Max-Planck-Institut für Mathematik in den Naturwissenschaften, Leipzig

Prof. Dr. Jürgen Renn
Max-Planck-Institut für Wissenschaftsgeschichte, Berlin

Prof. Dr. H. Wolfgang Spiess
Max-Planck-Institut für Polymerforschung, Mainz

Patrick Jöckel und Rolf Sander,
Max-Planck-Institut für Chemie, Mainz

erhalten den

Heinz-Billing-Preis 2005

zur Förderung

des wissenschaftlichen Rechnens

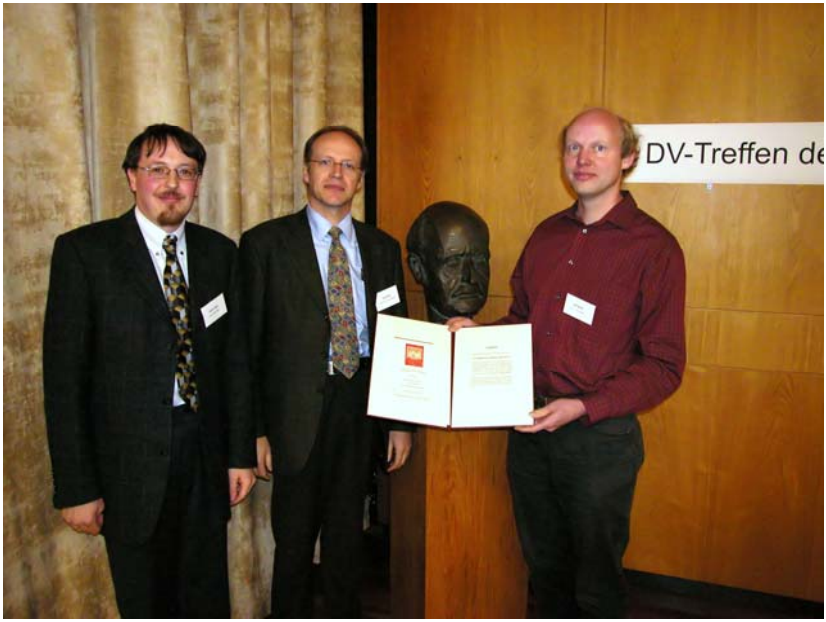
als Anerkennung für ihre Arbeit

The Modular Earth Submodel System (MESSy)

Laudatio

Der Heinz-Billing-Preis des Jahres 2005 wird für das Programmsystem Th*e Modular Earth Submodel System (MESSy)* verliehen. Es handelt sich hierbei um die Entwicklung einer modular strukturierten Softwareumgebung, welche es gestattet, eine große Zahl von Modellen zur Beschreibung von physikalischen und chemischen Prozessen der Atmosphäre zu integrieren. Die enge raumzeitliche Kopplung luftchemischer und meteorologischer Prozesse macht eine enge Verknüpfung der weltweit vorhandenen unterschiedlichen Programmmodule erforderlich um eine effiziente Simulation durchführen zu können.

Mit MESSy ist es nun möglich, Rückkopplungen zwischen den einzelnen Prozessen zu untersuchen. Dies ist ein wichtiger Schritt zu einem geophysikalischen Erdsystemmodell, in dem Prozesse sowohl im Ozean, an Land und in der Luft in ihrer Wechselbeziehung effizient untersucht werden können.



Verleihung des Heinz-Billing-Preises 2005 durch Prof. Kurt Kremer an Patrick Jöckel (links) und Rolf Sander (rechts)

The Modular Earth Submodel System (MESSy) — A new approach towards Earth System Modeling

Patrick Jöckel & Rolf Sander
Air Chemistry Department
Max-Planck Institute of Chemistry, Mainz, Germany

Abstract

The development of a comprehensive Earth System Model (ESM) to study the interactions between chemical, physical, and biological processes requires coupling of the different domains (land, ocean, atmosphere, ...). One strategy is to link existing domain-specific models with a universal coupler, i.e. with an independent standalone program organizing the communication between other programs. In many cases, however, a much simpler approach is more feasible. We have developed the Modular Earth Submodel System (MESSy). It comprises (1) a modular interface structure to connect submodels to a base model, (2) an extendable set of such submodels for miscellaneous processes, and (3) a coding standard. In MESSy, data is exchanged between a base model and several submodels within one comprehensive executable. The internal complexity of the submodels is controllable in a transparent and user friendly way. This provides remarkable new possibilities to study feedback mechanisms by two-way coupling. The vision is to ultimately form a comprehensive ESM which includes a large set of submodels, and a base model which contains only a central clock and runtime control. This goal can be reached stepwise, since each process can be included independently. Starting from an existing model, process submodels can be reimplemented according to the MESSy standard. This procedure guarantees the availability of a state-of-the-art model for scientific applications at any time of the development. In principle, MESSy can be implemented into any kind of model, either global or regional. So far, the MESSy concept has been applied to the general circulation model ECHAM5 and a number of process boxmodels.

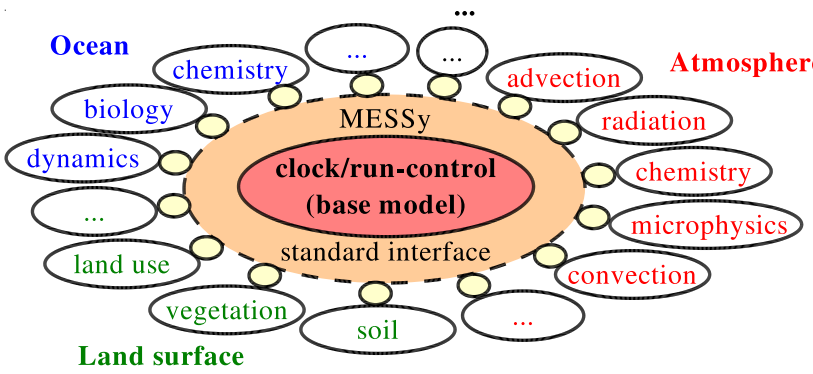


Fig. 1: Process-oriented approach to establish an ESM. Each physical process is coded as a modular entity connected via a standard interface to a common base model. The base model can be for instance an atmosphere or ocean general circulation model (GCM), etc. At the final development state, the base model contains hardly more than a central clock and the run control for all modularized processes. All processes and the base model together form one comprehensive executable. Data exchange between all processes is possible via the standard interface.

1 Introduction

The importance of environmental issues like climate change and the ozone hole has received increased attention during the past decades. It has been shown that the Earth (including the land, the oceans, and also the atmosphere) is an extremely complex system. One powerful tool to investigate natural cycles as well as potential anthropogenic effects is computer modeling. In the early phase of the development most of the "historically grown" models have been designed to address a few very specific scientific questions. The codes have been continuously developed over decades, with steadily increasing complexity. Additional processes were taken into consideration, so that the computability was usually close to the limits of the available resources. These historically grown model codes are now in a state associated with several problems (see also Post and Votta, 2005):

- The code has mostly been developed by scientists, who are not necessarily well-trained programmers. In principle every contribution follows its developer's unique style of programming. Coding conventions (e.g. `http://www.meto.gov.uk/research/nwp/numerical/fortran90/f90_standards.html`) only help when strictly adhered to and when code reviews are performed on a regular basis.
- The code has not been written to be easily extendable and adaptable to new scientific questions.
- There has been little motivation for writing high quality code, since the

scientific aim had to be reached quickly. Well structured, readable code has usually received low priority.
- Documentation lines within the code are often rare or absent.
- The code has been developed to run in a few specific configurations only, e.g. in a particular vertical and horizontal resolution, and parameterizations are resolution dependent.
- The code contains "hard-coded" statements, e.g. parameters implemented explicitely as numerical values. Changes for sensitivity studies always require recompilation.
- In many cases code developers (e.g. PhD students) are no longer available for support and advice. If insurmountable obstacles occur, the code has to be rewritten completely.
- Outdated computer languages (mostly Fortran77 or older) limit the full exploitation of available hardware capacities. Therefore, the codes have been "optimized" for specific hardware architectures, using non-standard, vendor-specific language extensions. As a consequence, these codes are not portable to other platforms.
- Compilers have been highly specific and error tolerant. Some even allowed divisions by zero. Although this may seem an advantage, it must be stressed that potentially serious code flaws are masked, which makes error tracing extremely difficult.

The result is often a highly unreadable, undocumented "spaghetti-code", which inhibits an efficient further development. The same problems have to be solved time and again. Transfering the code to a different environment requires in many cases incommensurate efforts. Even worse than this development aspect is the fact that those complex, non-transparent computer programs elude more and more understanding, apart from a small, indispensable group involved from the beginning.

2 Objectives

Any Earth System Model in general must fulfill several conditions to be consistent, physically correct, flexible, sustainable, and extendable. To reach these aims simultaneously, we define the following framework for the specific implementation of MESSy:

- Modularity: Each specific process is coded as a separate, independent entity, i.e. as a submodel, which can be switched on/off individually. This is the consistent application of the operator splitting, which is implemented in the models anyway.
- Standard interface: A so-called base model provides the framework to which all submodels are connected. At the final state of development the

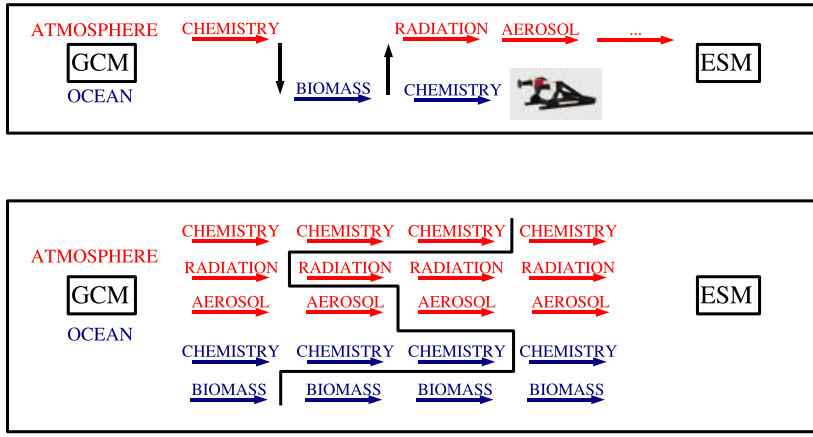


Fig. 2: Concepts of extending a GCM into a comprehensive ESM. The upper diagram shows that in the "classical" way of development the code is handed over to the subsequent contributor after a specific part has been finished. Parallel developments usually run into a dead end, since different codes based on the same origin are usually no longer compatible. Furthermore, the slowest contribution in the chain determines the overall progress. The lower diagram shows that the new structure allows the development of all contributions in parallel, with the advantage that the overall progress is NOT determined by the slowest contribution. At any time during the development, a comprehensive state-of-the-art model is available (as indicated by the black line).

base model should not contain more than a central clock for the time control (time integration loop) and a flow control of the involved processes (=submodels). This ultimate aim can be reached stepwise. For instance one could start from an existing general circulation model (GCM) and connect new processes via the standard interface. At the same time, it is possible to modularize processes which are already part of the GCM, and reconnect them via the standard interface. In many cases this requires only a slightly modified reimplementation based on the existing code.

- Self-consistency: Each submodel is self-consistent, the submodel output is uniquely defined by its input parameters, i.e., there are no interdependencies to other submodels and/or the base model.
- Resolution independence: The submodel code is independent of the spatial (grid) and temporal resolution (time step) of the base model. If applicable and possible, the submodels are also independent of the dimensionality (0-D (box), 1-D (column), 2-D, 3-D) and the horizontal (regional, global) and vertical extent of the base model. Each process is coded for the smallest applicable entity (box, column, column-vector, . . .).
- Data flow: Exchange of data between the submodels and also between a

submodel and the base model is standardized.
- Soft-coding: The model code does not contain "hard-coded" specifications which require a change of the code and recompilation after the model domain or the temporal or spatial resolution is changed. A prominent example is to use height or pressure for parameterizations of vertical profiles, instead of level indices, as the latter have to be changed if the vertical resolution of the base model is altered.
- Portability: All submodels are coded according to the language standard of Fortran95 (ISO/IEC-1539-1). The code is free of hardware or vendor-specific language extensions. In the rare cases where hardware specific code is unavoidable (e.g. to circumvent compiler deficiencies), it is encapsulated in preprocessor directives. MESSy allows for a flexible handling on both, vector- and scalar- architectures. Compiler capabilities like automatic vectorization (vector blocking) and inlining can be applied straightforwardly. Last but not least, for an optimization, vector and scalar code of the same process can coexist and switched on/off depending on the architecture actually used.
- Multi-developer: The model system can be further developed by more than one person at the same time without interference (see Fig. 2).

To meet the objectives described above, we have developed the Modular Earth Submodel System (MESSy). It consists of:

1. a generalized **interface structure** for coupling processes coded as so-called submodels to a so-called base model
2. an extendable set of processes coded as **submodels**
3. a **coding standard**

3 MESSy Interface Structure

The MESSy interface connects the submodels to the base model via a standard interface. As a result, the complete model setup is organized in four layers, as shown in Fig. 3:

1. The Base Model Layer (BML): At the final development state, this layer comprises only a central time integration management and a run control facility for the processes involved. In the transition state (at present) the BML is the domain specific model with all modularized parts removed. For instance, in case of an atmospheric model it can be a GCM.
2. The Base Model Interface Layer (BMIL), which comprises basically three functionalities:
   - The central submodel management interface allows the base model to control (i.e. to switch and call) the submodels.

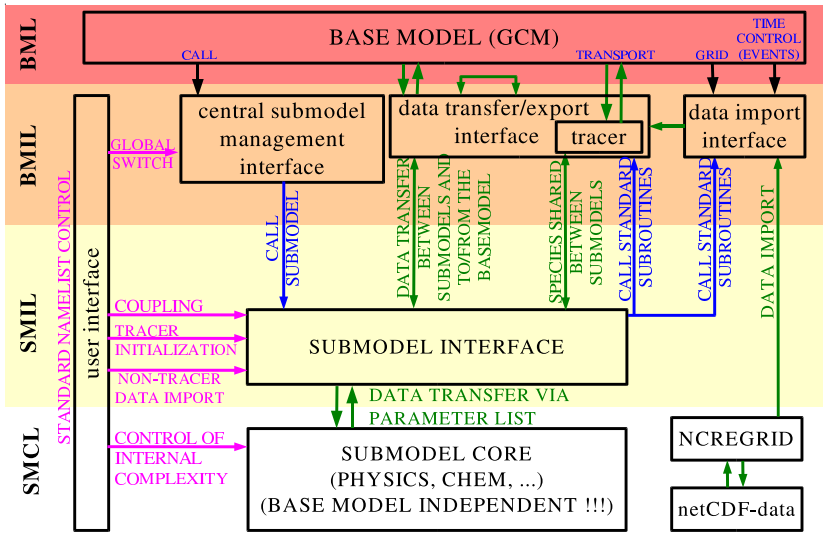


Fig. 3: The 4 layers of the MESSy interface structure (see Sect. 3 for a detailed description).

- The data transfer/export interface organizes the data transfer between the submodels and the base model and between different submodels. It is furthermore responsible for the output of results (export). Based on the requirements of the model setup, the data can be classified according to their use, e.g. as physical constants, as time varying physical fields, and as tracers (i.e. chemical compounds).
- The data import interface is used for flexible (i.e. grid independent) import of gridded initial and time dependent boundary conditions.

The BMIL therefore comprises the whole MESSy infrastructure which is organized in so called generic submodels.

3. The Submodel Interface Layer (SMIL): This layer is a submodel-specific interface, which collects all relevant information/data from the BMIL, transfers them via parameter lists to the Submodel Core Layer (SMCL, see below), calls the SMCL routines, and distributes the results from the parameter lists back to the BMIL. Since this layer performs the data exchange for the submodel, also the coupling between different submodels is managed within this layer.
4. The Submodel Core Layer (SMCL): This layer comprises the self-consistent core routines of a submodel (e.g. chemical integrations, physics, parameterizations, diagnostic calculations), which are independent of the implementation of the base model. Information exchange is solely performed

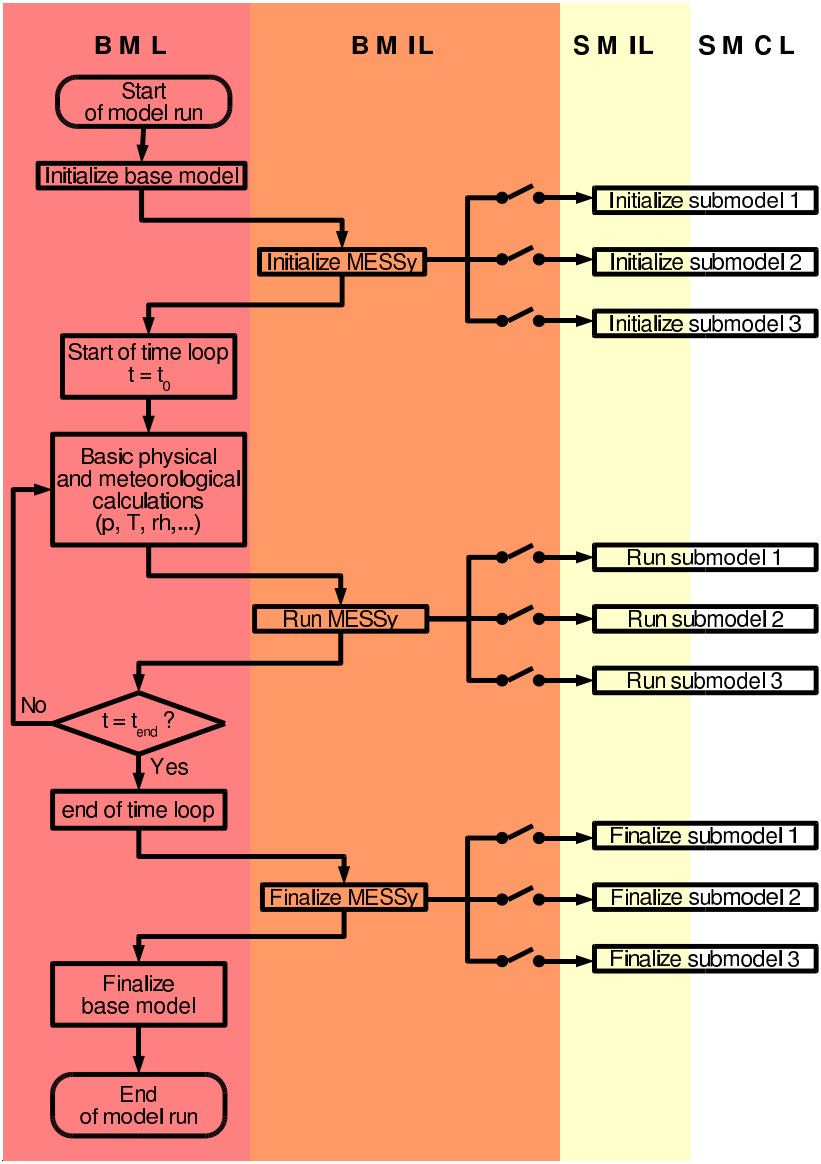


Fig. 4: Idealized flow chart of a typical MESSy setup (see Sect. 3 for details) consisting of three submodels connected to the base model via the MESSy interface. The model simulation can be subdivided into three phases: initialization phase, time integration phase, finalizing phase.

via parameter lists of the subroutines.

The user interface is implemented by using the Fortran95 namelist constructs, and is connected to the three layers BMIL, SMIL, and SMCL.

The global switches to turn the submodels on and off are located in the BMIL. These switches for all submodels are set by the run script.

Submodel-specific data initialization (e.g. initialization of chemical species (=tracers)), and import of data within the time integration (e.g. temporally changing boundary conditions) using the data import interface are handled by the SMIL. Within the SMIL, also the coupling options from the user interface are evaluated and applied, which control the coupling of the submodel to the base model and to other submodels. For instance, the user has the choice to select the submodel input from alternative sources, e.g. from results calculated online by other submodels, or from data provided offline. Therefore, this interface allows a straightforward implementation and management of feedback mechanisms between various processes.

The control interface is located within the SMCL and manages the internal complexity (and with this also the output) of the submodel. It comprises, for instance, changeable parameter settings for the calculations, switches for the choice of different parameterizations, etc.

A model simulation of a typical base model/MESSy setup can be subdivided into three phases (initialization phase, time integration phase, finalizing phase), as shown by the simplified flow chart in Fig. 4. The main control (time integration and run control) is hosted by the base model, and therefore the base model is also responsible for the flow of the three phases. After the initialization of the base model, the MESSy infrastructure with the generic submodels is initialized. At this stage the decision is made which submodels are switched on/off.

Next, the active MESSy submodels are initialized sequentially. This initialization is divided into two parts (not explicitly shown in Fig. 4). First, the internal setup of all active submodels is initialized, and second the potential coupling between all active submodels is performed. After the initialization phase the time integration (time loop) starts, which is controlled by the base model. All MESSy submodels are integrated sequentially according to the operator splitting concept. At the end of the time integration, the MESSy submodels and the MESSy infrastructure are finalized before the base model terminates.

4 MESSy Submodels

Many submodels are now available within the MESSy system. Some of them are completely new code whereas others have been adapted to MESSy based

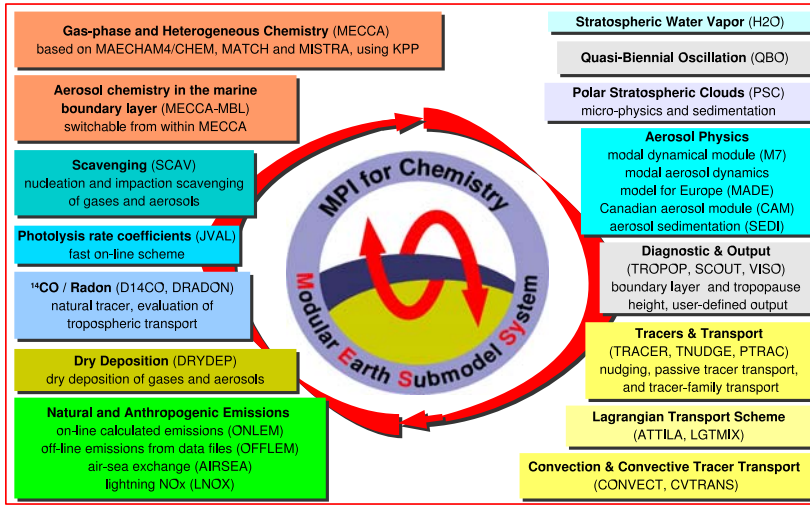


Fig. 5: Overview of submodels currently available within MESSy

on pre-existing code. An overview of the submodels is shown in Fig. 5. In this section we briefly present the submodels. For detailed information, please contact the submodel maintainers. The submodel MECCA is explained in more detail since it is the central part for the calculation of atmospheric chemistry. Most submodels have been developed by us and by several colleagues at our institute in Mainz. However, there are also several submodels resulting from collaborations with other institutes. External contributions are from:

DLR:	Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt, Institut für Physik der Atmosphäre, Oberpfaffenhofen
ECMWF:	European Centre for Medium-Range Weather Forecasts, Reading, Great Britain
FFA:	Ford Forschungszentrum, Aachen
JRC:	Joint Research Centre, Ispra, Italy
LSCE:	Laboratoire des Sciences du Climat et de l'Environnement, France
MPI-BG:	Max-Planck Institute for Biogeochemistry, Jena
MPI-MET:	Max-Planck Institute for Meteorology, Hamburg
MSC:	Meteorological Service of Canada
UNI-MZ:	University of Mainz
UU:	University of Utrecht, The Netherlands

4.1 AIRSEA

MAINTAINER: Andrea Pozzer
DESCRIPTION: This submodel calculates the emission (or deposition) of various organic compounds. It is based on the two layer model for exchange at the marine surface, with a pre-defined function for the sea water concentration and an air concentration calculated in the model. In order to increase the quality of the simulation, only the function for the concentrations in the sea water has to be changed.

4.2 ATTILA

MAINTAINER: Patrick Jöckel, Michael Traub
ORIGINAL CODE: Christian Reithmeier (DLR), Volker Grewe (DLR), Robert Sausen (DLR)
CONTRIBUTIONS: Volker Grewe (DLR), Gabriele Erhardt (DLR), Patrick Jöckel
DESCRIPTION: The Lagrangian model ATTILA (Atmospheric Tracer Transport In a Lagrangian Model) has been developed to treat the global-scale transport of passive trace species in the atmosphere within the framework of a general GCM. ATTILA runs online within a GCM and uses the GCM-produced wind fields to advect the centroids of constant mass air parcels into which the model atmosphere is divided. Each trace constituent is thereby represented by a mixing ratio in each parcel. ATTILA contains state-of-the-art parameterizations of convection and turbulent boundary layer transport.

4.3 CAM

MAINTAINER: Astrid Kerkweg
ORIGINAL CODE: Sunling Gong (MSC)
DESCRIPTION: The Canadian Aerosol Module (CAM) is a size-segregated model of atmospheric aerosol processes for climate and air quality studies by Gong et al. (2003). It is planned to integrate it into MESSy during the second half of 2005.

4.4 CONVECT

MAINTAINER: Holger Tost
ORIGINAL CODE: M. Tiedtke (ECMWF), T. E. Nordeng (ECMWF)
DESCRIPTION: This submodel calculates the process of convection. It consists of an interface to choose different convection schemes and the calculations themselves. By now there are implemented the original ECHAM5 con-

vection routines with all three closures (Nordeng, Tiedtke, Hybrid) including an update for positive definite tracers. Further schemes (ECMWF operational scheme, Zhang-McFarlane-Hack, Bechtold) are currently being tested.

4.5 CVTRANS

MAINTAINER: Holger Tost
ORIGINAL CODE: Mark Lawrence
DESCRIPTION: The Convective Tracer Transport submodel calculates the transport of tracers due to convection. It uses a monotonic, positive definite and mass conserving algorithm following the bulk approach.

4.6 D14CO

MAINTAINER: Patrick Jöckel
DESCRIPTION: The cosmogenic isotope ^{14}C in its early state as ^{14}CO (carbon monoxide) provides a natural atmospheric tracer, which is used for the evaluation of the distribution and seasonality of the hydroxyl radical (OH) and/or the strength, localization, and seasonality of the stratosphere to troposphere exchange (STE) in 3-dimensional global atmospheric chemistry transport models (CTMs) and general circulation models (GCMs).

4.7 DRADON

MAINTAINER: Patrick Jöckel
DESCRIPTION: This submodel uses ^{222}Rn as a tracer for diagnosing the transport in and out of the boundary layer.

4.8 DRYDEP

MAINTAINER: Astrid Kerkweg
ORIGINAL CODE: Laurens Ganzeveld
CONTRIBUTIONS: Philip Stier (MPI-MET)
DESCRIPTION: This submodel calculates gas phase and and aerosol tracer dry deposition according to the big leaf approach.

4.9 H2O

MAINTAINER: Christoph Brühl
ORIGINAL CODE: Christoph Brühl, Patrick Jöckel
DESCRIPTION: The H2O submodel defines H_2O as a tracer, provides its initialization in the stratosphere and the mesosphere from satellite data, and controls the consistent feedback with specific humidity of the base model.

This submodel further accounts for the water vapor source of methane oxydation in the stratosphere (and mesosphere), either by using the water vapor tendency of a chemistry submodel (e.g. MECCA), or by using a satellite climatology (UARS/HALOE) of methane together with monthly climatological conversion rates.

4.10 JVAL

MAINTAINER: Rolf Sander
ORIGINAL CODE: Jochen Landgraf, Christoph Brühl, Wilford Zdunkowski (UNI-MZ)
CONTRIBUTIONS: Patrick Jöckel
DESCRIPTION: This submodel is for fast online calculation of J-values (photolysis rate coefficients) using cloud water content and cloudiness calculated by the base model and/or climatological ozone and climatological aerosol. A delta-twostream-method is used for 8 spectral intervals in UV and visible together with precalculated effective cross-sections (sometimes temperature and pressure dependent) for more than 50 tropospheric and stratospheric species. If used for the mesosphere, also Ly-α radiation is included. Only the photolysis rates for species present are calculated. Optionally, the UV-C solar heating rates by ozone and oxygen are calculated.

4.11 LGTMIX

MAINTAINER: Patrick Jöckel
DESCRIPTION: Lagrangian Tracer Mixing in a semi-Eulerian approach.

4.12 LNOX

MAINTAINER: Patrick Jöckel
ORIGINAL CODE: Volker Grewe (DLR)
CONTRIBUTIONS: Laurens Ganzeveld, Holger Tost
DESCRIPTION: Parameterization of NO_x (i.e. the nitrogen oxides NO and NO_2) produced by lightning

4.13 M7

MAINTAINER: Astrid Kerkweg
ORIGINAL CODE: Julian Wilson (JRC), Elisabetta Vignati (JRC)
CONTRIBUTIONS: Philip Stier (MPI-MET)
DESCRIPTION: M7 is a dynamical aerosol model that redistributes number and mass between 7 modes and from the gas to the aerosol phase (for each mode), by nucleation, condensation and coagulation.

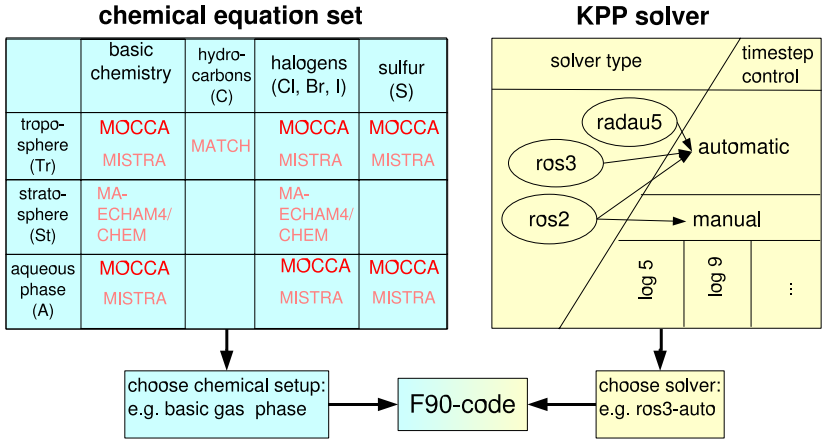


Fig. 6: Selecting a chemical equation set and a numerical solver for KPP. See Sect. 4.15 for further details.

4.14 MADE

MAINTAINER: Axel Lauer (DLR)
ORIGINAL CODE: Ingmar Ackermann et al. (FFA)
DESCRIPTION: The Modal Aerosol Dynamics model for Europe (MADE) has been developed by Ackermann et al. (1998) as an extension to mesoscale chemistry transport models to allow a more detailed treatment of aerosol effects in these models. In MADE, the particle size distribution of the aerosol is represented by overlapping lognormal modes. Sources for aerosol particles are modelled through nucleation and emission. Coagulation, condensation, and deposition are considered as processes modifying the aerosol population in the atmosphere. The adaptation of MADE to the MESSy standard is currently under construction.

4.15 MECCA

MAINTAINER: Rolf Sander, Astrid Kerkweg
CONTRIBUTIONS: Rolf von Kuhlmann, Benedikt Steil, Roland von Glasow
DESCRIPTION: The Module Efficiently Calculating the Chemistry of the Atmosphere (MECCA) by Sander et al. (2005) calculates tropospheric and stratospheric chemistry. Aerosol Chemistry in the marine boundary layer is also included. The main features of MECCA are:

Chemical flexibility: The chemical mechanism contains a large number of reactions from which the user can select a custom-designed subset. It is easy to adjust the mechanism, e.g. according to the latest kinetics insights.

Numerical flexibility: The numerical integration method can be chosen according to individual requirements of the stiff set of differential equations (efficiency, stability, accuracy, precision).

In the current version of MECCA, five previously published chemical mechanisms have been combined and updated. Tropospheric hydrocarbon chemistry is adopted from the MATCH model by von Kuhlmann et al. (2003). The chemistry of the stratosphere is based on MAECHAM4/CHEM by Steil et al. (1998) and the Mainz Chemical Box Model (Meilinger, 2000). Tropospheric halogen chemistry is taken from MOCCA by Sander and Crutzen (1996) and from MISTRA by von Glasow et al. (2002). The current mechanism contains 116 species and 295 reactions in the gas phase, and 91 species and 258 reactions in the aqueous phase. The rate coefficients are updated according to Sander et al. (2003), Atkinson et al. (2004), and other references. A detailed listing of reactions, rate coefficients, and their references can be found in the electronic supplement of Sander et al. (2005). It is both possible and desirable to add reactions to the mechanism in the near future. However, for computational efficiency, it is normally not required to integrate the whole mechanism. Therefore we have implemented a method by which the user can easily create a custom-made chemical mechanism. Each reaction has several labels to categorize it. For example, the labels *Tr* and *St* indicate reactions relevant in the troposphere and the stratosphere, respectively. These labels are not mutually exclusive. Many reactions need to be considered for both layers. There are also labels for the phase in which they occur (gas or aqueous phase) and for the elements that they contain (e.g. *Cl*, *Br*, and *I* for reactions of the halogen species). It is also possible to create new labels for specific purposes. For example, all reactions with the label *Mbl* are part of a reduced mechanism for the marine boundary layer. Using a Boolean expression based on these labels, it is possible to create custom-made subsets of the comprehensive mechanism. The main advantage of maintaining a single comprehensive mechanism is that new reactions and updates of rate coefficients need to be included only once so that they are immediately available for all subsets.

Once a subset of the full mechanism has been selected as described above, the kinetic preprocessor (KPP) software (Sandu and Sander, manuscript in preparation, 2005) is used to transform the chemical equations into Fortran95 code. From a numerical point of view, atmospheric chemistry is a challenge due to the coexistence of very stable (e.g. CH_4) and very reactive species, e.g. $O(^1D)$. To overcome the stiffness issue, associated with the large range of timescales within a single set of differential equations, robust numerical solvers are necessary. KPP provides several solvers with either manual or

automatic time step control. Although computationally more demanding, the latter are best suited for the most difficult stiffness problems e.g. associated with multiphase chemistry. For each individual application, it is necessary to balance the advantages and disadvantages regarding efficiency, stability, accuracy, and precision. We found that for most of our chemical mechanisms, the Rosenbrock solvers of 2nd or 3rd order (ros2 and ros3) work best. However, we stress that it may be necessary to test other solvers as well (e.g. radau5) to achieve the best performance for a given set of equations. Fortunately, switching between solvers is easy with KPP and does not require any reprogramming of the chemistry scheme. The selection of a chemical equation set and a numerical solver is shown in Fig. 6.

4.16 OFFLEM

MAINTAINER: Patrick Jöckel
DESCRIPTION: This submodel reads input data from files for two-dimensional emission fluxes (i.e. surface emissions in $\mathrm{molecules}/(\mathrm{m}^2\mathrm{s})$) and three-dimensional emission fluxes (aircraft emissions in $\mathrm{molecules}/(\mathrm{m}^3\mathrm{s})$) and updates the tracer tendencies (gridpoint- and Lagrangian) accordingly.

4.17 ONLEM

MAINTAINER: Astrid Kerkweg
CONTRIBUTIONS: Yves Balkanski (LSCE), Ina Tegen (MPI-BG), Philip Stier (MPI-MET), Sylvia Kloster (MPI-MET), Laurens Ganzeveld, Michael Schulz (LSCE)
DESCRIPTION: This submodel calculates two-dimensional emission fluxes for gas-phase tracers (i.e. surface emissions in $\mathrm{molecules}/(\mathrm{m}^2\mathrm{s})$) and updates the tracer tendencies accordingly. In addition, aerosol source functions are calculated.

4.18 PSC

MAINTAINER: Joachim Buchholz
ORIGINAL CODE: Ken Carslaw, Stefanie Meilinger, Joachim Buchholz
DESCRIPTION: The Polar Stratospheric Cloud (PSC) submodel simulates micro-physical processes that lead to the formation of super-cooled ternary solutions (STS), nitric acid trihydrate (NAT), and ice particles in the polar stratosphere as well as heterogeneous chemical reactions of halogens and dinitrogen pentoxide on liquid and solid aerosol particles. Denitrification and dehydration due to sedimenting solid PSC particles are calculated for each grid box depending on particle size, pressure and temperature.

4.19 PTRAC

MAINTAINER: Patrick Jöckel
DESCRIPTION: This submodel uses user-defined initialized passive tracers to test mass conservation, monotonicity, and positive definiteness of Eulerian and Lagrangian advection algorithms.

4.20 QBO

MAINTAINER: Maarten van Aalst (UU)
ORIGINAL CODE: Marco Giorgetta (MPI-MET)
CONTRIBUTIONS: Patrick Jöckel
DESCRIPTION: This submodel is for assimilation of QBO zonal wind observations.

4.21 SCAV

MAINTAINER: Holger Tost
DESCRIPTION: The Scavenging submodel simulates the processes of wet deposition and liquid phase chemistry in precipitation fluxes. It considers gas-phase and aerosol species in large-scale as well as in convective clouds and precipitation events.

4.22 SCOUT

MAINTAINER: Patrick Jöckel
DESCRIPTION: The submodel 'Selectable Column Output' generates high-frequency output of user-defined fields at arbitrary locations.

4.23 SEDI

MAINTAINER: Astrid Kerkweg
DESCRIPTION: This submodel calculates sedimentation of aerosol particles and their components.

4.24 TNUDGE

MAINTAINER: Patrick Jöckel
DESCRIPTION: The submodel 'Tracer Nudging' is used for nudging user-defined tracers with arbitrary user-defined data sets.

4.25 TRACER

MAINTAINER: Patrick Jöckel
DESCRIPTION: Tracers are chemical species that are transported in the atmosphere according to the model-calculated wind fields and other processes. This generic submodel handles the data and metadata associated with tracers. It also provides the facility to transport user-defined subsets of tracers together inside a tracer family.

4.26 TROPOP

MAINTAINER: Patrick Jöckel
CONTRIBUTIONS: Michael Traub, Benedikt Steil
DESCRIPTION: This submodel calculates the position of the tropopause. Two definitions are implemented: A potential vorticity iso-surface (usually used at high latitudes) and the thermal tropopause according to the definition of the World Meteorological Organization (WMO), usually used in the tropics).

4.27 VISO

MAINTAINER: Patrick Jöckel
DESCRIPTION: 'Values on horizontal (Iso)-Surfaces' is a submodel for user-defined definition of horizontal iso-surfaces and output of user-defined data on horizontal surfaces (tropopause, boundary layer height, iso-surfaces, ...).

5 MESSy Coding Standard

As stated above, strict adherence to a coding standard is an absolutely necessary prerequisite for the maintenance of a very comprehensive Earth System Models. The full MESSy coding standard has been published in Jöckel et al. (2005). Here, we only briefly summarize the main points.

For the implementation of the MESSy interface, all changes to the base model are coded with "keyhole surgery". This means that changes to the base model are only allowed if they are really needed, and if they are as small as possible. Changes to the base model code are encapsulated in preprocessor directives:

```
#ifndef MESSY
  <original code>
# else
  <changed code for MESSy>
```

```
#endif
```

Likewise, additional code is encapsulated as

```
#ifdef MESSY
  <new MESSy code>
#endif
```

Overall, code development obeys the following rules:

- Each process is represented by a separate submodel.
- Every submodel has a unique name.
- A submodel is per default switched OFF and does nothing unless it has been switched on (`USE_<submodel>=T`) by the user via a unique namelist switch in the run script `xmessy`.
- Several submodels for the same process (e.g. different parameterizations) can coexist.
- Each submodel consists of two modules (two layers):
  1. submodel core layer (SMCL): A completely self-consistent, base model independent Fortran95 core-module to/from which all required quantities are passed via parameters of its subroutines. Self-consistent means that there are neither direct connections to the base model, nor to other submodels. The core-module provides `PUBLIC` subroutines which are called by the interface-module, and `PRIVATE` subroutines which are called internally.
  2. submodel interface layer (SMIL): An interface-module which organizes the calls and the data exchange between submodel and base model. Data from the base model is preferably accessed via the generic submodel SMIL "main_data". The interface module provides a set of `PUBLIC` subroutines which constitute the main entry-points called from the MESSy central submodel control interface.
- The core module must be written to run as the smallest possible entity (e.g. box, column, column-vector (2-D), global) on one CPU in a parallel environment (e.g. MPI). Therefore, `STOP`-statements must be omitted and replaced by a status flag (`INTENT(OUT)`) which is 0, if no error occurs. In the same way, `WRITE`- and `PRINT`-statements must only occur in the part of the code which is exclusively executed by a dedicated I/O processor. This is controlled in the SMIL.
- Data transfer between submodels is performed exclusively within the interface layer. Direct `USE`-statements to other submodels are not allowed.
- The internal application flow of a submodel is controlled by switches and parameters in the `CTRL`-namelist; coupling to the base model and/or other submodels is defined via switches and parameters in the `CPL`-namelist.
- The filename of each MESSy file identifies submodel, layer, and type: `messy_<submodel>[_<subsubmodel>]`

`[_mem][_<smil>].f90` where `[...]` means "optional", `<...>` means a specific name, `mem` indicates "memory"-files, and `<smil>` the interface layer modules. Each Fortran module must have the same name as the file it resides in, however with the suffix `.f90` removed.

- If the complexity of a submodel requires separation into two or more files per layer (core or interface), shared type-, variable- and parameter-declarations can be located in `*_mem.f90` files (or `*_mem_<smil>.f90` files, respectively) which can be `USE`d by the submodel files within the respective layer. These memory-modules must be used by more than 1 file within the relevant layer, and must not contain any subroutine and/or function.
- MESSy-submodels are independent of the specific base model resolution in space and time. If this is not possible (e.g., for specific parameterizations) or not yet implemented, the submodel needs to terminate the model in a controlled way (via the status flag), if the required resolution has not been chosen by the user.
- A submodel can host sub-submodels, e.g. for different various parameterizations, sub-processes, etc.
- The smallest entities of a submodel, i.e. the subroutines and functions, must be as self-consistent as possible according to:
  - `USE`-statements specific for a certain subroutine or function must be placed where the `USE`d objects are needed, not into the declaration section of the module.
  - `IMPLICIT NONE` is used for all modules, subroutines and functions.
  - If a function or subroutine provides an internal consistency check, the result must be returned via an `INTEGER` parameter (status flag), which is 0, if no error occurs, and identifies the problem otherwise.
- `PRIVATE` must be the default for every module, with the exception of memory-files. The `PUBLIC` attribute must explicitely used only for those subroutines, functions, and variables that must be available outside of the module.
- Variables must be defined (not only declared!). The best way to define a variable is within its declaration line, e.g.:

  ```
  INTEGER :: n = 0
  ```

- Pointers need to be nullified, otherwise, the pointer's association status will be initially undefined. Pointers with undefined association status tend to cause trouble. According to the Fortran95 standard even the test of the association status with the intrinsic function `ASSOCIATED` is not allowed. Nullification of a pointer is preferably performed at the declaration

  ```
  REAL, DIMENSION(:,:), POINTER :: &
    ptr => NULL()
  ```

  or at the beginning of the instruction block with

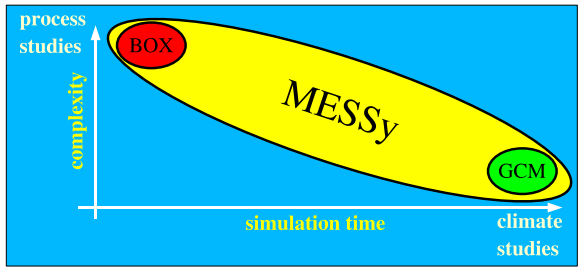


Fig. 7: MESSy can be used for the whole range from box models to global GCMs. See Sect. 6 for details.

`NULLIFY(ptr)`

- Wherever possible, `ELEMENTAL` and/or `PURE` functions and subroutines must be used.
- Numeric precision is controlled within the code by specifying the `KIND` parameters. Compiler switches to select the numeric precision (e.g. "-r8") must be avoided.
- Since the dependencies for the build-process are generated automatically, obsolete, backup- or test-files must not have the suffix `.f90`. Instead, they must be renamed to `*.f90-bak` or something similar.
- Any `USE` command must be combined with an `ONLY` statement. This makes it easier to locate the origin of non-local variables. (Exception: A MESSy-core module may be used without `ONLY` by the respective MESSy-interface module.)

6 Application

A box model often contains a highly complex mechanism. It is integrated for a relatively short simulation time only (e.g. days or weeks). A GCM simulation usually covers several years, but contains a much less complex description of individual atmospheric processes. The MESSy system can be used for the whole range from box models to GCMs (see Fig. 7). Although most submodels are mainly written for the inclusion into larger regional and global models (e.g. GCMs), the MESSy structure supports and also encourages their connection to a box model, whereby "box model" is defined here as the smallest meaningful entity for a certain process which is running independently of the comprehensive ESM. We have applied the MESSy structure to miscellaneous box models.

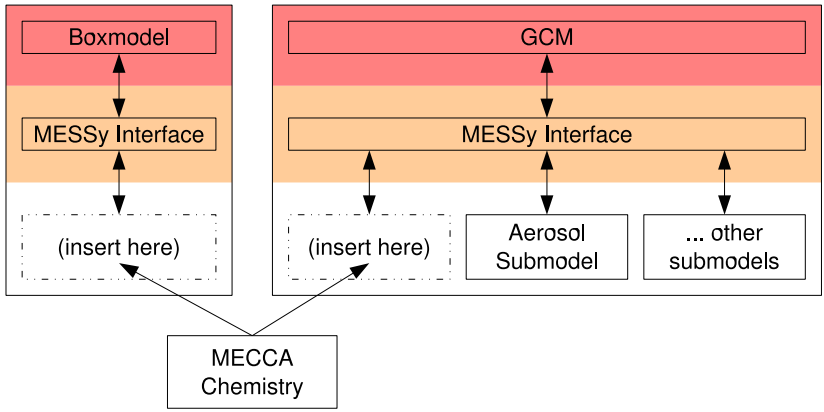


Fig. 8: A MESSy submodel (here MECCA is shown as an example for atmospheric chemistry integrations) can be coupled to several base models without modifications. The submodel core layer, as indicated by the separated box, is always independent of the base model. Note that at the final development state of MESSy, also the second layer from below (submodel interface layer (SMIL), pale yellow area) is likewise independent of the base model, since it solely makes use of the MESSy infrastructure, for instance the data transfer and export interface. Last but not least, the base model dependence of the second layer from above (base model interface layer, BMIL) is minimized by extensive usage of the MESSy infrastructure. Only well defined connections (as indicated by arrows between BML and BMIL in Figure 3) are required.

As an example, Fig. 8 shows how the atmospheric chemistry submodel MECCA can be connected to either a simple box model, or to a complex GCM. Note that exactly the same files of the chemistry submodel are used in both cases. Therefore, box models are an ideal environment for debugging and evaluating a submodel. While developing the submodel, it can be tested in fast box model runs without the need for expensive global model simulations. Once the submodel performs well, it can directly be included into the GCM without any further changes.

The MESSy interface has also been successfully connected to the general circulation model ECHAM5 (Roeckner et al., The atmospheric general circulation model ECHAM 5. PART I: Model description, MPI-Report, 349, 2003), thus extending it into a fully coupled chemistry-climate model. This provides exciting new possibilities to study feedback mechanisms. Examples include stratosphere-troposphere coupling, atmosphere-biosphere interactions, multi-component aerosol processes, and chemistry-climate interactions.

MESSy also provides an important tool for model intercomparisons and process studies. As an example, aerosol-climate interactions could be investigated in two model runs in which two different aerosol submodels are

switched on. For processes without feedbacks to the base model, it is even possible to run several submodels for the same process simultaneously. For example, the results of two photolysis schemes could be compared while ensuring that they both receive exactly the same meteorological and physical input from the GCM.

7 Conclusions

The transition from General Circulation Models (GCMs) to Earth System Models (ESMs) requires the development of new software technologies and a new software management, since the rapidly increasing model complexity needs a transparent control. The Modular Earth Submodel System (MESSy) provides a generalized interface structure, which allows unique new possibilities to study feedback mechanisms between various bio-geo-chemical processes. Strict compliance with the ISO-Fortran95 standard makes it highly portable to different hardware platforms. The modularization allows for uncomplicated connection to various base models, as well as the co-existence of different algorithms and parameterizations for the same process, e.g. for testing purposes, sensitivity studies, or process studies. The coding standard provides a multi-developer environment, and the flexibility enables a large number of applications with different foci in many research topics referring to a wide range of temporal and spatial scales.

MESSy is an activity that is open to the scientific community following the "open source" philosophy. We encourage collaborations with colleague modelers, and aim to efficiently achieve improvements. The code is available at no charge. For details, we refer to Jöckel et al. (2005) and our web-site `http://www.messy-interface.org`.

Additional submodels and other contributions from the modeling community will be highly appreciated. We encourage modelers to adapt their code according to the MESSy-standard and we look forward to receiving interesting contributions from the geosciences modeling community.

References

Ackermann, I. J., Hass, H., Memmesheimer, M., Ebel, A., Binkowski, F. S., and Shankar, U.: Modal aerosol dynamics model for Europe: development and first applications, Atmos. Environ., 32, 2981–2999, 1998.

Atkinson, R., Baulch, D. L., Cox, R. A., Crowley, J. N., Hampson, R. F., Hynes, R. G., Jenkin, M. E., Rossi, M. J., and Troe, J.: Evaluated kinetic and photochemical data for atmospheric chemistry: Volume I – gas phase reactions of O_x, HO_x, NO_x and SO_x species, Atmos. Chem. Phys., 4, 1461–1738, 2004.

Gong, S. L., Barrie, L. A., Blanchet, J.-P., von Salzen, K., Lohmann, U., Lesins, G., Spacek, L., Zhang, L. M., Girard, E., Lin, H., Leaitch, R., Leighton, H., Chylek, P., and Huang, P.: Canadian Aerosol Module: A size-segregated simulation of atmospheric aerosol processes for

climate and air quality models 1. Module development, J. Geophys. Res., 108D, doi:10.1029/2001JD002002, 2003.
Jöckel, P., Sander, R., Kerkweg, A., Tost, H., and Lelieveld, J.: Technical Note: The Modular Earth Submodel System (MESSy) – a new approach towards Earth System Modeling, Atmos. Chem. Phys., 5, 433–444, 2005.
Meilinger, S. K.: Heterogeneous Chemistry in the Tropopause Region: Impact of Aircraft Emissions, Ph.D. thesis, ETH Zürich, Switzerland, `http://www.mpch-mainz.mpg.de/~smeili/diss/diss_new.ps.gz`, 2000.
Post, D. E. and Votta, L. G.: Computational science demands a new paradigm, Physics Today, pp. 35–41, 2005.
Sander, R. and Crutzen, P. J.: Model study indicating halogen activation and ozone destruction in polluted air masses transported to the sea, J. Geophys. Res., 101D, 9121–9138, 1996.
Sander, R., Kerkweg, A., Jöckel, P., and Lelieveld, J.: Technical Note: The new comprehensive atmospheric chemistry module MECCA, Atmos. Chem. Phys., 5, 445–450, 2005.
Sander, S. P., Finlayson-Pitts, B. J., Friedl, R. R., Golden, D. M., Huie, R. E., Kolb, C. E., Kurylo, M. J., Molina, M. J., Moortgat, G. K., Orkin, V. L., and Ravishankara, A. R.: Chemical Kinetics and Photochemical Data for Use in Atmospheric Studies, Evaluation Number 14, JPL Publication 02-25, Jet Propulsion Laboratory, Pasadena, CA, 2003.
Steil, B., Dameris, M., Brühl, C., Crutzen, P. J., Grewe, V., Ponater, M., and Sausen, R.: Development of a chemistry module for GCMs: First results of a multiannual integration, Ann. Geophys., 16, 205–228, 1998.
von Glasow, R., Sander, R., Bott, A., and Crutzen, P. J.: Modeling halogen chemistry in the marine boundary layer, 1. Cloud-free MBL, J. Geophys. Res., 107D, 4341, doi:10.1029/2001JD000942, 2002.
von Kuhlmann, R., Lawrence, M. G., Crutzen, P. J., and Rasch, P. J.: A model for studies of tropospheric ozone and nonmethane hydrocarbons: Model description and ozone results, J. Geophys. Res., 108D, doi:10.1029/2002JD002893, 2003.

Nominiert für den Heinz-Billing-Preis 2005

Geometric Reasoning with `polymake`

Ewgenij Gawrilow
Institut für Mathematik, MA 6-1, TU Berlin
Michael Joswig
Fachbereich Mathematik, AG 7, TU Darmstadt

Abstract

The mathematical software system `polymake` provides a wide range of functions for convex polytopes, simplicial complexes, and other objects. A large part of this paper is dedicated to a tutorial which exemplifies the usage. Later sections include a survey of research results obtained with the help of `polymake` so far and a short description of the technical background.

1 Introduction

The computer has been described as *the* mathematical machine. Therefore, it is nothing but natural to let the computer meet challenges in the area where its roots are: mathematics. In fact, the last two decades of the 20th century saw the ever faster evolution of many mathematical software systems, general and specialized. Clearly, there are areas of mathematics which are more apt to such an approach than others, but today there is none which the computer could not contribute to.

In particular, polytope theory which lies in between applied fields, such as optimization, and more pure mathematics, including commutative algebra and toric algebraic geometry, invites to write software. When the `polymake`

project started in 1996, there were already a number of systems around which could deal with polytopes in one way or another, e.g., convex hull codes such as `cdd` [10], `lrs` [3], `porta` [7], and `qhull` [6], but also visualization classics like `Geomview` [1]. The basic idea to `polymake` was —and still is— to make interfaces between any of these programs and to continue building further on top of the combined functionality. At the same time the gory technical details which help to accomplish such a thing should be entirely hidden from the user who does not want to know about it. On the outside `polymake` behaves somewhat similar to an expert system for polytopes: The user once describes a polytope in one of several natural ways and afterwards he or she can issue requests to the system to compute derived properties. In particular, there is no need to program in order to work with the system. On the other hand, for those who do want to program in order to extend the functionality even further, `polymake` offers a variety of ways to do so.

The modular design later, since version 2.0, allowed `polymake` to treat other mathematical objects in the same way, in particular, finite simplicial complexes For the sake of brevity, however, this text only covers `polymake`'s main application which is all about polytopes.

We explain the organization of the text. It begins with a quite long tutorial which should give an idea of how the system can be used. The examples are deliberately chosen to be small enough that it is possible to verify all claims while reading. What follows is an overall description of the key algorithms and methods which are available in the current version 2.1. The subsequent Section 6 contains several brief paragraphs dedicated to research in mathematics that was facilitated by `polymake`.

Previous reports on the `polymake` system include the two papers [11, 12]; by now they are partially outdated. `polymake` is open source software which can be downloaded from `http://www.math.tu-berlin.de/polymake` for free.

2 What Are Polytopes and Why Are They Interesting?

A *polytope* is defined as the convex hull of finitely many points in Euclidean space. If one thinks of a given finite number of points as very small balls, with fixed positions, then wrapping up all these points as tightly as possible into one large "gift" yields the polytope generated by the points. In fact, there are algorithms which follow up this gift-wrapping idea quite closely in order to obtain a so-called *outer description* of the polytope. A 2-dimensional polytope is just a planar convex polygon.

Polytopes are objects which already fascinated the ancient Greeks. They were particularly interested in highly symmetric 3-dimensional polytopes.

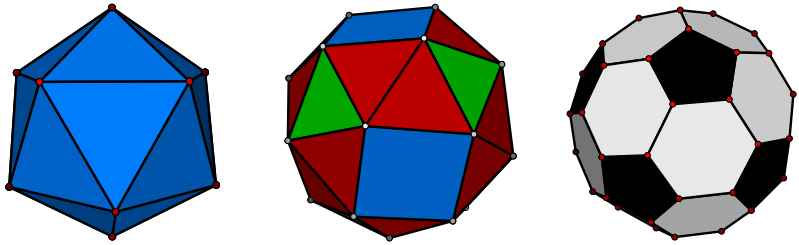


Fig. 1: One Platonic and Two Archimedean Solids: icosahedron, snub cube, and truncated icosahedron (soccer ball).

Today polytopes most frequently show up as the sets of admissible points of linear programs. Linear programming is about optimizing a linear objective function over a domain which is defined by linear inequalities. If this domain is bounded then it is a polytope; otherwise it is called an *unbounded polyhedron*. Linear programs are at the heart of many optimization problems in scientific, technical, and economic applications.

But also within mathematics polytopes play their role. For instance, in the seventies of the twentieth century it became apparent that they are strong ties between algebraic geometry and the theory of polytopes via the concept of a *toric variety*. For this and other reasons in the sequel it became interesting to investigate metric and combinatorial properties of polytopes in much gerater depth than previously; see the monograph of Ewald [9]. The purpose of the `polymake` system is to facilitate this kind of research.

3 A `polymake` Tutorial

This tutorial tries to give a first idea about `polymake`'s features by taking a look at a few small examples. We focus on computations with convex polytopes. For definitions, more explanations, and pointers to the literature see the subsequent Section 4.

The text contains commands to be given to the `polymake` system (preceded by a '`>`') along with the output. As the environment a standard UNIX shell, such as `bash`, is assumed. Commands and output are displayed in `typewriter type`.

Most of the images shown are produced via `polymake`'s interface to `JavaView` [22] which is fully interactive.

3.1 A very simple example: the 3-cube

Suppose you have a finite set of points in the Euclidean space $\mathbb{R}^d$. Their convex hull is a polytope P. Now you want to know how many facets P has. As mentioned previously, polytopes can also be described as the set of points satisfying a finite number of linear inequalities. The *facets* correspond to the (uniquely determined) set of non-redundant linear inequalities.

As an example let the set S consist of the points $(0,0,0)$, $(0,0,1)$, $(0,1,0)$, $(0,1,1)$, $(1,0,0)$, $(1,0,1)$, $(1,1,0)$, $(1,1,1)$ in R^3. Clearly, S is the set of vertices of a cube; and its facets are the six quadrangular faces. Employing your favorite word processor produce an ASCII text file, say `cube.poly`, containing precisely the following information.

```
POINTS
1 0 0 0
1 0 0 1
1 0 1 0
1 0 1 1
1 1 0 0
1 1 0 1
1 1 1 0
1 1 1 1
```

We have the keyword `POINTS` followed by eight lines, where each line contains the coordinates of one point. The coordinates in $\mathbb{R}^3$ are preceded by an additional 1 in the first column; this is due to the fact that `polymake` works with *homogeneous coordinates*. The solution of the initial problem can now be performed by `polymake` as follows. Additionally, we want to know whether P is simple, that is, whether each vertex is contained in exactly 3 facets (since $\dim P = 3$).

```
> polymake cube.poly N_FACETS SIMPLE
```

While `polymake` is searching for the answer, let us recall what `polymake` has to do in order to obtain the solution. It has to compute the convex hull of the given point set in terms of an explicit list of the facet describing inequalities. Then they have to be counted, which is, of course, the easy part. Nonetheless, `polymake` decides on its own what has to be done, before the final —admittedly trivial— task can be performed. Checking simplicity requires to look at the vertex facet incidences. In the meantime, `polymake` is done. Here is the answer.

```
N_FACETS
6

SIMPLE
1
```

Simplicity is a boolean property. So the answer is either "yes" or "no", encoded as 1 or 0, respectively. The output says that P is, indeed, simple.

As a matter of fact, `polymake` knows quite a bit about standard constructions of polytopes. So you do have to type in your 3-cube example. You can use the following command instead. The trailing argument 0 indicates a cube with $0/1$-coordinates.

```
> cube cube.poly 3 0
```

3.2 Visualizing a Random Polytope

But let us now try something else. How does a typical polytope look like? To be more precise: Show me an instance of the convex hull of 20 randomly distributed points on the unit sphere in R^3. This requires one command to produce a `polymake` description of such a polytope and a second one to trigger the visualization. Again there is an implicit convex hull computation going on behind the scenes. On the way a complete combinatorial description of the polytope is obtained.

```
> rand_sphere random.poly 3 20
> polymake random.poly VISUAL
```

`polymake`'s standard tool for interactive visualization is `JavaView` by Polthier and others [22] For instance, it allows you to rotate or zoom into your polytope. Here is a sequence of snapshots.

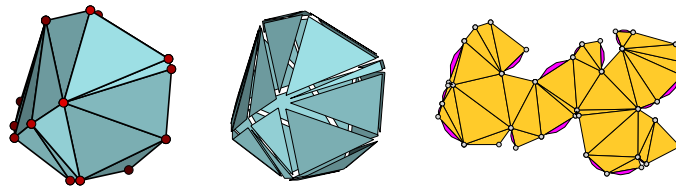


Fig. 2: Interactive visualization of a random polytope with `JavaView`: Three snapshots.

3.3 Linear programming

Polytopes most naturally appear as sets of feasible solutions of linear programs. Consider the following example.

A linear inequality $a_0 + a_1x_1 + \ldots a_dx_d \geq 0$ is encoded as the inward pointing normal vector to the corresponding affine hyperplane (of suitable length). This is what `polymake` uses: the former inequality is represented as the vector $(a_0, a_1, \ldots, a_d)$. Our linear program in `polymake`'s format

Maximize

$$x_1 + x_2 + x_3$$

subject to

$$0 \leq x_1, x_2, x_3 \leq 1$$
$$x_1 + x_2 + x_3 \leq 5/2$$
$$x_1 - 17x_2 \leq 8$$

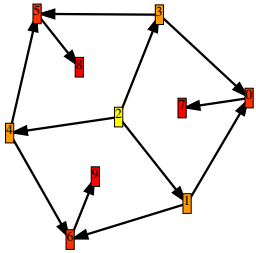


Fig. 3: Small linear program and a visualization.

looks as given below. Note that we do not decide beforehand, whether we want to minimize or maximize.

```
LINEAR_OBJECTIVE
 0     1   1   1

INEQUALITIES
 0     1   0   0
 0     0   1   0
 0     0   0   1
 1    -1   0   0
 1     0  -1   0
 1     0   0  -1
5/2   -1  -1  -1
 8    -1  17   0
```

People working in optimization usually prefer other file formats (such as `CPLEX`'s LP file format), where it is also possible to keep the names of the variables. `polymake` is aware of this. LP format files can be converted by calling the command `lp2poly`.

It is not difficult to determine the polytope forming the solution space. Assume the file `linear_program.poly` contains the description given above.

```
> polymake linear_program.poly MAXIMAL_VALUE
MAXIMAL_VALUE
5/2
```

This is the kind of behavior one would expect from a linear solver. Of course, usually it is also interesting to obtain a point attaining the maximum. And, in fact, `polymake` calls `cdd`'s implementation of the Simplex Method (with exact rational arithmetic). With `polymake` you can go one step further. It visualizes for you the polytope with directed edges. Instead of relying

on the interactive JavaView visualization this time we produce postscript output directly; see Figure 3.

```
> polymake linear_program.poly postscript \
    "VISUAL_GRAPH->DIRECTED_GRAPH->VERTEX_COLORS"
```

The directed edges (whose orientation is induced by the given linear objective function) are drawn as arrows. The colors of the vertices indicate the level of height with respect to the objective function. The numbering of the vertices corresponds to the order of the vertices in the file.

It is an essential feature of polytope theory that it is possible to define a polytope in one of two equivalent ways: either as the convex hull points or as the intersection of half-spaces. This is reflected in polymake: All functions can directly be applied to all polytopes regardless of how they were initially described.

3.4 A More Detailed Look

Let us compute the volume of a polytope. And we want to know what polymake actually does in order to obtain the result. Adding the -v or -vv flag to the polymake command line call asks for (very) verbose information. We omit a couple of lines at the beginning of the output, where the system tells about its rule base.

The output below corresponds to computing the VOLUME directly from the INEQUALITIES description. It looks different if you solved that linear optimization problem before.

```
> polymake -vv linear_program.poly VOLUME
polymake: reading rules from ...
polymake: minimum weight rule chain constructed ...
polymake: applying rule cdd.convex_hull.dual:
  VERTICES, POINTED, FEASIBLE :
  FACETS | INEQUALITIES
polymake: applying rule BOUNDED : VERTICES | POINTS
polymake: applying rule PRECONDITION: BOUNDED
 ( default.volume:
   VOLUME : VERTICES, TRIANGULATION )
polymake: applying rule
 beneath_beyond.convex_hull.primal, ...:
 FACETS, AFFINE_HULL, VERTICES_IN_FACETS,
   DUAL_GRAPH, TRIANGULATION, ESSENTIALLY_GENERIC :
 VERTICES
polymake: applying rule default.volume:
  VOLUME : VERTICES, TRIANGULATION
VOLUME
47/48
```

The program which finally produces the volume is very simple-minded: It takes any triangulation and adds up the volumes of the simplices. But before that, `polymake` does the following: From the rule base, the system infers that it should first obtain the vertices from the inequalities via a (dual) convex hull computation. Then it checks whether the input polyhedron is bounded, that is, to check whether the volume is finite; otherwise `polymake` would abort the computation. As a third step `polymake` constructs a triangulation, which, in fact, is obtained from calling a second convex hull code (this time in primal mode), which differs from the first one in that it additionally produces a triangulation.

An important feature of `polymake` is that all intermediate data which are computed are stored into the polytope file. Asking the program a second time for the same thing, or, for something else which had been computed before, gives an immediate answer. The result is read from the file.

```
> polymake -vv linear_program.poly VOLUME
polymake: reading rules from ...
VOLUME
47/48
```

`polymake` employs a special transaction model in order to assert the consistency of the polytope data. It relies on its rule base in the sense that rules whose execution terminates properly are expected to produce valid output. Moreover, `polymake` has a powerful error recovery mechanism which automatically looks for an alternative way to find the answer to a user's question in case of the failure of some external program.

4 What Can We Do With Polytopes?

As it was shown in the tutorial section above the system's behavior is driven by rules. In fact, the part of the system which takes care of applying rules to answer user requests is entirely independent of the mathematical objects and the algorithms. Each class of objects comes with its own set of rules. We survey the more technical aspects in Section 7. Here we focus on the mathematics.

A convex polytope is the convex hull of finitely many points in $\mathbb{R}^d$; this is its *V-description*. A basic result in this area says that this notion coincides with those intersections of finitely many affine halfspaces in $\mathbb{R}^d$ which are bounded (*H-description*). This is sometimes referred to as the *Main Theorem on convex polytopes*. For an introduction to the theory, see Grünbaum [13] or Ziegler [26].

Convex polytopes arise in many mathematical fields as diverse as linear and combinatorial optimization, combinatorial topology, commutative alge-

bra and algebraic geometry. All these areas, in their modern form, pursue algorithmic questions, and this is where `polymake` proved to be useful. The Section 6 discusses some of these applications in more detail.

In order to deal with polytopes algorithmically often a first step is to apply an effective version of the "Main Theorem". While a polytope may naturally be given in its H-description (such as in linear programs) it is essential to also obtain a V-representation if one is interested in combinatorial properties. Algorithms which solve this problem are *convex hull algorithms*. Many such algorithms are known an implemented. The running-time that a particular algorithm/implementation requires is known to vary strongly with the class of polytopes which it is applied to; see Avis, Bremner, and Seidel [4] and also [15]. Therefore, `polymake` offers three different convex hull algorithms for the user to choose. There is one which is built into the system and two more, `cdd` [10] and `lrs` [3], respectively, which are accessible via interfaces. Actually, there also interfaces to `porta` [7] and `qhull` [6] available, but these are disabled by default. For each call it is possible to specify which algorithm to choose; additionally, the system can freely be configured to generally prefer one algorithm over another.

Convex polytopes have a metric geometry look as well as a combinatorial one. Both views are supported by `polymake`. What follows first is a list of metric properties which can be computed with the software.

- Gale transformations
- Steiner points
- projective linear transformations
- triangulations
- Voronoi diagrams and Delaunay cell decompositions in arbitrary dimension

Combinatorial properties include:

- fast face lattice construction algorithm; due to Kaibel and Pfetsch [18]
- f-vector, h-vector, flag-f-vector, and cd-index
- various graph-theoretic properties of the vertex-edge graph
- Altshuler determinant

In addition to these features there is a wide range of standard constructions and visualization functions; e.g., see Figure 4. There is also an interface to `Geomview` [1].

5 Where Polytopes Also Show Up

The power of mathematical abstraction becomes particularly visible when certain concepts shop up in places where they may not be expected. Here

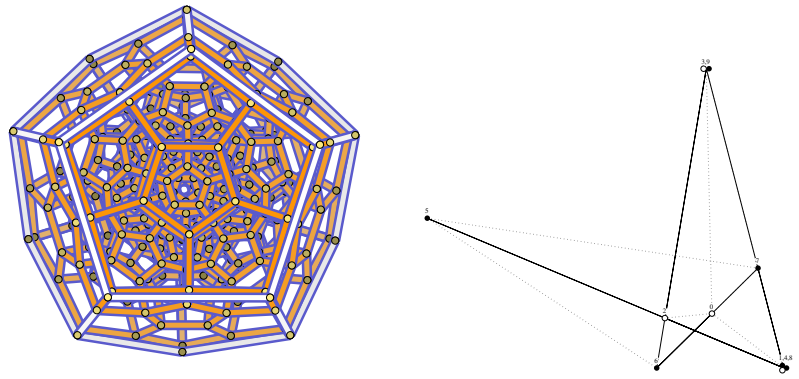


Fig. 4: Schlegel diagram of the regular 120*-cell (left) and a Gale diagram of a random* 6*-dimensional* 01*-polytope with* 10 *vertices (right).*

we briefly mention two topics which are related to polytope theory in a more indirect way. `polymake`'s capabilities can be applied.

5.1 Tight Spans of Finite Metric Spaces

Every tree T with non-negative weights on the edges defines a metric on the nodes of T. Conversely, it is easy to reconstruct the tree from such a *tree-like* metric. The *phylogenetic problem* in computational biology boils down to the task to derive *a* sufficiently close tree from any given finite metric space. It is obvious that sometimes there is no tree at all which fits a given metric. Dress and his co-authors devised *tight spans* as geometric objects which can be assigned to any finite metric space and which capture the deviation from a tree-like metric; see [8] for a survey. Since tight spans can be described as bounded subcomplexes of unbounded polyhedra, `polymake`'s features can be exploited. See Figure 5 for an example.

Sturmfels and Yu [25] recently used `TOPCOM` [23] and `polymake` to classify tight spans of metric spaces with at most six points.

5.2 Curve Reconstruction

If a sufficiently well distributed finite set S of points on a sufficiently smooth planar curve K is given, then it is possible to obtain a polygonal reconstruction of K. Amenta, Bern, and Eppstein [2] obtained a curve reconstruction procedure via an iterated Voronoi diagram computation. This beautiful algorithm is implemented in `polymake`; see Figure 6.

	Athens	Berlin	Lisboa	London	Paris	Rome
Athens	0	1535	2815	1988	1827	1522
Berlin		0	1864	727	677	926
Lisboa			0	1442	1114	1672
London				0	280	1125
Paris					0	870
Rome						0

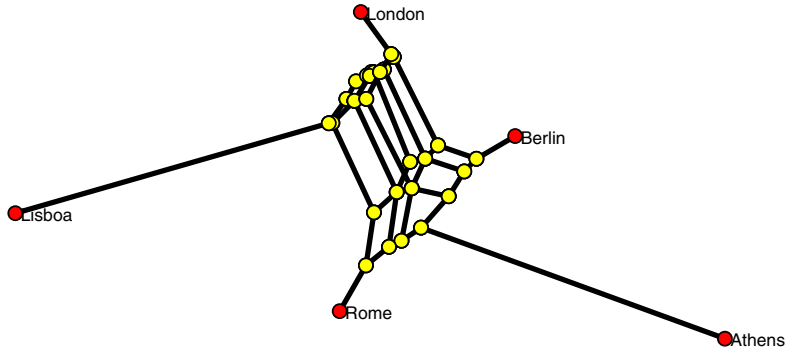


Fig. 5: Distances (in kilometers) among six European cities and a 3-dimensional visualization of their tight span, which lives in $\mathbb{R}^6$.

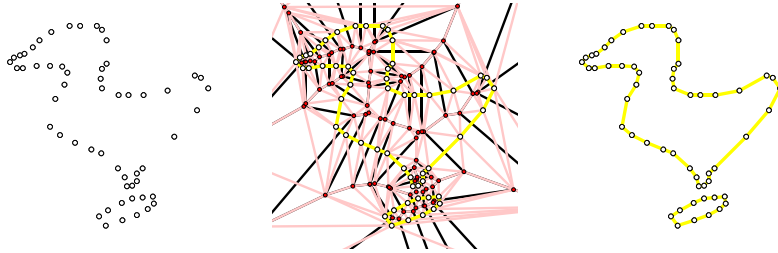


Fig. 6: Planar curve(s) reconstructed from given points via the crust method of Amenta, Bern, and Eppstein [2].

6 Selected Research Projects Using `polymake`

We survey some projects for which `polymake` proved to be useful.

6.1 Extremal Combinatorial Properties of Polytopes

What originally inspired the development of the `polymake` system was the investigation of combinatorial properties of convex polytopes and, in particular, the construction of interesting examples. Over the years `polymake` experiments helped to settle a number of previously open questions. We list a few of them.

6.1.1 Cubical Polytopes and Spheres

A *cubical* polytope has only (combinatorial) cubes as its faces. Such objects naturally arise in computational geometry (hexahedral meshes) as well as differential geometry (via normal crossing immersions of hypersurfaces into spheres).

Algorithm complexity questions make it desirable to find out what the cubical polytopes with the most number of faces with a given number of vertices are. The main result of [17] is the construction of so-called *neighborly cubical polytopes* which are more complex in this respect than previously expected. A second paper on the same subject gives deeper insight and it also describes more general constructions [16].

Schwarz and Ziegler [24] construct a cubical 4-polytope with an odd number of facets. This solves a previously open question.

6.1.2 f-Vectors of 4-Polytopes

A classical result, due to Steinitz, characterizes all those triplets (f_0, f_1, f_2) of natural numbers for which there is a 3-dimensional polytope with exactly f_0 vertices, f_1 edges, and f_2 facets. The corresponding question for higher dimensional polytopes is wide open. In a series of papers Ziegler et al. recently made progress as far as the understanding of such *f-vectors* of 4-polytopes is concerned. This progress, once again, is due to the construction of special classes of 4-polytopes, most of which were obtained with the help of `polymake`. See the survey [27] for an overview.

6.2 Representation Theory of Groups

Any representation $\nu : G \to \mathrm{GL}(\mathbb{R}^n)$ of a finite group G yields a *representation polytope* $P(\nu)$ as the convex hull of the image in $\mathbb{R}^{n^2}$. This notion is introduced and studied in Guralnick and Perkinson [14]. It turns out that

combinatorial properties of $P(\nu)$ are related to properties of the action of $\nu(G)$ on $\mathbb{R}^n$. For instance, it is shown [14, Corollary 3.7] that if ν is a transitive permutation representation then the diameter of the vertex-edge graph of $P(G)$ is bounded by two. This is a far generalization of previous results on the Birkhoff polytopes due to Padberg and Rao [20].

6.3 Gröbner fans

A key task in algorithmic commutative algebra is the computation of Gröbner bases for a given ideal in a polynomial ring. From the theoretical as well from the practical viewpoint it is essential that the resulting (reduced) Gröbner basis depends on a monomial ordering. For deeper structural investigations it is often useful to be able to understand the set of all Gröbner bases for a given ideal. The Gröbner fan is a polyhedral fan which gives a geometric structure to this set. Bahloul and Takayama [5] used `polymake` in their quest to extend the technique of Gröbner fans to ideals in other rings, in particular, the ring of formal power series and the homogenized ring of analytic differential operators.

6.4 Secondary Polytopes

Triangulations of polytopes are interesting for various reasons. For instance, they are instrumental in solving certain systems of algebraic equations, via the theory of toric varieties and sparse resultants. The set of all triangulations of a fixed polytope P itself is endowed with the structure of a (typically quite large) polytope, the *secondary polytope* of P.

Pfeifle and Rambau report [21] on an implementation for the construction of secondary polytopes based on `TOPCOM` [23] and `polymake`.

6.5 Computational Biology

A standard problem in computational biology is to deduce the optimal alignment of two given DNA sequences. Algorithms to solve this problem are known for some time. However, the biologically correct parameters which define what "optimal" means are usually not available. This is a serious obstacle on the way to biologically meaningful results. Typically the computations have to rely on estimates. Thus it had been suggested to keep the parameters "indeterminate" and to compute with the resulting algebraic expressions which then represent probabilities in the underlying statistical models. The impact of various choices of the parameter choices can then be studied in a post-processing step.

While this naturally requires more complicated algorithms, it turns out by work of Pachter and Sturmfels that methods from polyhedral geometry and `polymake`, in particular, can be employed. This approach is comprehensively covered in the book [19].

7 Software Design

Since its first version from 1997 `polymake` was —at least partially— rewritten several times. In spite of the many changes on the way, the core ideas always remained the same. The first goal was to have a flexible interface structure such that it is possible to interface to as many existing polytope processing software components (developed by other people) as possible. The second goal was scalability in the sense that the system should be useful both for programmers and mere users, and also both for students and expert scientists.

Feeling that one language is not enough for this, this resulted in an object-oriented hybrid design based on the two programming languages `C++` and `Perl`. The borderline is roughly defined as follows: The `Perl` side takes care of all the object management and their interfaces, while the `C++` half harbors the mathematical algorithms. Information exchange between both worlds is subject to a client-server scheme, `Perl` being the language of the server.

Convex polytopes are represented in the system as a class of objects which are defined by an extendible list of properties. In the current distributed version there are already more than one hundred of these properties defined; they range from the vertices (`VERTICES`) and facets (`FACETS`) of a polytope to the list of Steiner points on all the faces (`STEINER_POINTS`) and the information whether or not the polytope is `SIMPLICIAL` or `CUBICAL`.

The client perspective (on the `C++` side) is very restricted: The client asks the server for properties of some polytope object and leaves it entirely to the server to decide how these should be obtained. The `Perl`-written server has a list of rules which specify how to compute properties from the already known ones. For instance, there is a rule which explains how the facets can be computed for a polytope which was initially specified as the convex hull of finitely many points; that is, there is a convex-hull algorithm rule which computes `FACETS` from `POINTS`. Actually, as in this case it is the fact, there may be several competing rules computing the same. It is the task of the server to compile admissible sequences of rules (via a Dijkstra type algorithm for determining shortest weighted paths) to fulfill the user's (or the client's) requests from the information initially given.

It is fundamental to the design that the set of rules as well as the list of properties known to the system can be expanded and modified. Moreover, the

object management is abstract, too; this way it is possible to define entirely new classes of objects and rule bases for them. For instance, simplicial complexes are objects different from polytopes (which actually includes pointed unbounded polyhedra), while tight spans are specializations of polytope objects since they can be described as the bounded subcomplexes of certain unbounded polyhedra; see Section 5.1.

8 Technical Requirements

`polymake` can be used on UNIX systems only. It has been successfully tested on Linux, Sun Solaris, FreeBSD, MacOS X, IBM AIX and Tru64 Unix. Depending on the size of your objects `polymake` can run on small machines with, say, 128 MB of RAM. Only to compile the system from the source code at least 512MB of RAM is required.

Our website at `http://www.math.tu-berlin.de/polymake` offers the full source code as well as several precompiled versions for download.

Acknowledgements

Over the time many people made small and large contributions to the code. Most notably, Thilo Schröder and Nikolaus Witte are members of the development team since 2002.

Partial funding for the initial period of 1996–1997 of the `polymake` project came from the German-Israeli Foundation for Scientific Research and Development, grant I-0309-146.06/93 of Gil Kalai, Peter Kleinschmidt, and Günter M. Ziegler. Later the Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) partially supported `polymake` within projects of the Sonderforschungsbereich 288 "Differentialgeometrie und Quantenphysik" and the DFG-Forschungszentrum Matheon.

References

[1] *GeomView, Version 1.8.1*, 2002, `http://www.geomview.org`.

[2] Nina Amenta, Marshall Bern, and David Eppstein, *The crust and the beta-skeleton: combinatorial curve reconstruction*, Graphical Models and Image Processing **60** (1998), no. 2:2, 125–135.

[3] David Avis, *lrslib, Version 4.2*, 2005, `http://cgm.cs.mcgill.ca/~avis/C/lrs.html`.

[4] David Avis, David Bremner, and Raimund Seidel, *How good are convex hull algorithms?*, Comput. Geom. **7** (1997), no. 5-6, 265–301, 11th ACM Symposium on Computational Geometry (Vancouver, BC, 1995). MR MR1447243 (98c:52017)

[5] Rouchdi Bahloul and Nobuki Takayama, *Local Gröbner fan: polyhedral and computational approach*, 2004, `arXiv:math.AG/0412044`.

[6] C.B. Barber, D.P. Dobkin, and H.T Huhdanpaa, *qhull, Version 2003.1*, 2003, `http://www.qhull.org`.

[7] Thomas Christof and Andreas Löbel, *PORTA - POlyhedron Representation Transformation Algorithm, Version 1.4.0*, 2004, `http://www.zib.de/Optimization/Software/Porta/`.

[8] Andreas Dress, Vincent Moulton, and Werner Terhalle, *T-theory. An overview*, Sém. Lothar. Combin. **34** (1995), Art. B34b, approx. 23 pp. (electronic). MR 97i:57002

[9] Günter Ewald, *Combinatorial convexity and algebraic geometry*, Graduate Texts in Mathematics, vol. 168, Springer-Verlag, New York, 1996. MR MR1418400 (97i:52012)
[10] Komei Fukuda, *cddlib, Version 0.93d*, 2005, `http://www.ifor.math.ethz.ch/~fukuda/cdd_home/cdd.html`.
[11] Ewgenij Gawrilow and Michael Joswig, *polymake: a framework for analyzing convex polytopes*, Polytopes—combinatorics and computation (Oberwolfach, 1997), DMV Sem., vol. 29, Birkhäuser, Basel, 2000, pp. 43–73. MR MR1785292 (2001f:52033)
[12] ———, *polymake: an approach to modular software design in computational geometry*, Proceedings of the 17th Annual Symposium on Computational Geometry, ACM, 2001, June 3-5, 2001, Medford, MA, pp. 222–231.
[13] Branko Grünbaum, *Convex polytopes*, Pure and Applied Mathematics, vol. 16, Interscience Publishers, London, 1967, Second edition (Volker Kaibel, Victor Klee, and Günter M. Ziegler, eds.), Graduate Texts in Mathematics **221**. Springer-Verlag, New York, NY, 2003.
[14] Robert Guralnick and David Perkinson, *Permutation polytopes and indecomposable elements in permutation groups*, 2005, `arXiv:math.CO/0503015`.
[15] Michael Joswig, *Beneath-and-beyond revisited*, Algebra, geometry, and software systems, Springer, Berlin, 2003, pp. 1–21. MR MR2011751 (2004k:68169)
[16] Michael Joswig and Thilo Schröder, *Neighborly Cubical Polytopes and Spheres*, 2005, `arXiv:math.CO/0503213`.
[17] Michael Joswig and Günter M. Ziegler, *Neighborly cubical polytopes*, Discrete Comput. Geometry **24** (2000), 325–344.
[18] Volker Kaibel and Marc E. Pfetsch, *Computing the face lattice of a polytope from its vertex-facet incidences*, Comput. Geom. **23** (2002), no. 3, 281–290. MR MR1927137 (2003h:52019)
[19] Lior Pachter and Bernd Sturmfels (eds.), *Algebraic statistics for computational biology*, Cambdrige University Press, 2005.
[20] Manfred W. Padberg and M. R. Rao, *The travelling salesman problem and a class of polyhedra of diameter two*, Math. Programming **7** (1974), 32–45. MR MR0353997 (50 #6479)
[21] Julian Pfeifle and Jörg Rambau, *Computing triangulations using oriented matroids*, Algebra, geometry, and software systems, Springer, Berlin, 2003, pp. 49–75. MR MR2011753 (2004i:68233)
[22] Konrad Polthier, Klaus Hildebrandt, Eike Preuß, and Ulrich Reitebuch, *JavaView - interactive 3D geometry and visualization, version 3.90*, 1999–2005, `http://www.javaview.de/`.
[23] Jörg Rambau, *TOPCOM, Version 0.13.2*, 2004, `http://www.uni-bayreuth.de/departments/wirtschaftsmathematik/rambau/TOP%COM/`.
[24] Alexander Schwartz and Günter M. Ziegler, *Construction techniques for cubical complexes, odd cubical* 4*-polytopes, and prescribed dual manifolds*, Experimental Mathematics **13** (2004), 385–413.
[25] Bernd Sturmfels and Josephine Yu, *Classification of six-point metrics*, Electron. J. Combin. **11** (2004), Research Paper 44, 16 pp. (electronic). MR MR2097310
[26] Günter M. Ziegler, *Lectures on polytopes*, Graduate Texts in Mathematics, vol. 152, Springer-Verlag, New York, NY, 1995, Revised edition, 1998.
[27] ———, *Convex polytopes: Extremal constructions and f-vector shapes*, Park City Mathematical Institute (PCMI 2004) Lecture Notes (Ezra Miller, Victor Reiner, and Bernd Sturmfels, eds.), 2005, With an Appendix by Thilo Schröder and Nikolaus Witte, 73 pages.

PyBioS – ein Modellierungs- und Simulationssystem für komplexe biologische Prozesse

Christoph Wierling
Max-Planck-Institut für Molekulare Genetik, Berlin

Zusammenfassung

Mathematische Modellierung und Simulationstechniken sind wichtige Instrumente, die wesentlich zum Verständnis komplexer biologischer Systeme beitragen. In dieser Arbeit stelle ich das in der Programmiersprache Python geschriebene, objektorientierte und Web-basierte System PyBioS vor, das für die Modellierung, Simulation und Analyse biologischer Reaktionsnetzwerke im Bereich der Systembiologie konzipiert ist. Die Ontologie des Systems definiert verschiedene Klassen, die den wesentlichen zellulären und molekularen Komponenten, wie Zelle, Kompartiment, Gen, Protein, Enzym, Metabolit, usw. entsprechen. Dadurch können hierarchisch strukturierte Modelle, die sich an zytologischen und molekularen Strukturen orientieren, erstellt werden. Durch eine flexible, generalisierte Schnittstelle ist es möglich, verschiedene Datenbanken und Datenquellen direkt für die Modellierung nutzbar zu machen. Dies umfasst Datenbanken, die Informationen zu biochemischen Reaktionen, Signaltransduktionswegen, Transportprozessen, Genregulationen oder anderen zellulären Prozessen enthalten. Derzeit existieren Schnittstellen zu den Datenbanken KEGG, Reactome und Transpath. Durch die direkte Datenbankanbindung unterstützt PyBioS auf diese Weise den Benutzer gerade auch bei der Erstellung, Simulation und Analyse großer Modelle. Anhand des objektorientierten Modells, das Informationen der Reaktionen und ihrer Kinetiken beinhaltet, kann PyBioS automatisch ein entsprechendes gewöhnliches Differentialgleichungssystem erstellen und dieses ggf. anhand von Erhaltungsbedingungen vereinfachen. Das mathematische Modell wird dann wiederum für Simulationen oder Analyse-Verfahren, wie dem Parameter-Scanning, verwendet. Das mathematische Modell kann zudem als Python-Programm exportiert und weiter extern genutzt werden. Die hierarchisch organisierten Modelle werden in einer objektorientierten Datenbank, welche zudem auch als Modell-Repositorium dient, gespeichert. Durch Export/Import Möglichkeiten für das XML-basierte Format SBML (*Systems Biology Markup Language*) besteht Kompatibilität zu anderen Plattformen.

1 Einleitung

Lebende Systeme weisen ein hohes Maß an Komplexität auf. Sie bestehen aus einer Vielzahl von Komponenten, die in einer hochgradig organisierten Weise miteinander interagieren. Baustein aller lebenden Systeme ist die Zelle, deren Genom die Informationen aller Komponenten enthält, die für die Aufrechterhaltung der zellulären Funktionen, wie Stoffwechsel, Regulation, Struktur und Differenzierung erforderlich sind. Das konzertierte Zusammenspiel all dieser Komponenten ist Grundlage für das Funktionieren des Organismus. Kommt es zu einer Störung des Systems, z.B. aufgrund eines Gendefekts oder anormaler Faktoren, so treten häufig Krankheiten oder Fehlentwicklungen auf, sofern die Störung nicht kompensiert werden kann. Eine neue Teildisziplin der Biologie, die Systembiologie, versucht nun, anhand von Modellen dieser Systeme, die eine Vielzahl der Systemkomponenten und deren Interaktionen beinhalten, diese genauer zu verstehen. Viele Eigenschaften von komplexen Systemen ergeben sich nämlich erst durch die Interaktion verschiedenster Systemkomponenten und lassen sich nicht direkt aus den einzelnen Teilen ableiten.

Biologische Systeme haben viele unterschiedliche Komponenten, die recht verschiedene Eigenschaften aufweisen. Zudem ist deren Interaktionsnetzwerk oft stark verzweigt. So ist z.B. die Glykolyse nicht ausschließlich die Umsetzung von Glukose in Pyruvat unter Energiegewinn, in Form von ATP und Reduktionsäquivalenten, sondern viele Zwischenprodukte dieses Stoffwechselweges fließen auch in andere Wege, wodurch das zelluläre Reaktionsnetzwerk stark verzweigt ist.

Abb. 1 verdeutlicht wesentliche Abläufe eines zellulären Reaktionsnetzwerks, wie es sich in eukaryotischen Zellen finden lässt. Viele Informationen zu biochemischen Reaktionen, Stoffwechselwegen, Signaltransduktionswegen, Genregulationen, Transportvorgängen usw. sind in der Fachliteratur verfügbar. Das Erstellen gerade großer mathematischer Modelle anhand von Literaturdaten ist jedoch recht mühsam und fehleranfällig. Daher ist es sinnvoll, Datenbanken, die entsprechende Informationen bereitstellen, für diesen Zweck zu nutzen. Primäres Ziel dieser Datenbanken ist es häufig, Informationen einzelner Gene, die z.B. ein Biologe bei Expressionsanalysen als differentiell exprimiert findet, in ihren funktionalen Kontext zu setzen, d.h. unmittelbare Zusammenhänge aufzuzeigen und diese ggf. auch zu visualisieren oder geeignet darzustellen. Dies können z.B. Informationen darüber sein, welche biochemischen Reaktionen das Genprodukt katalysiert, welche anderen Gene

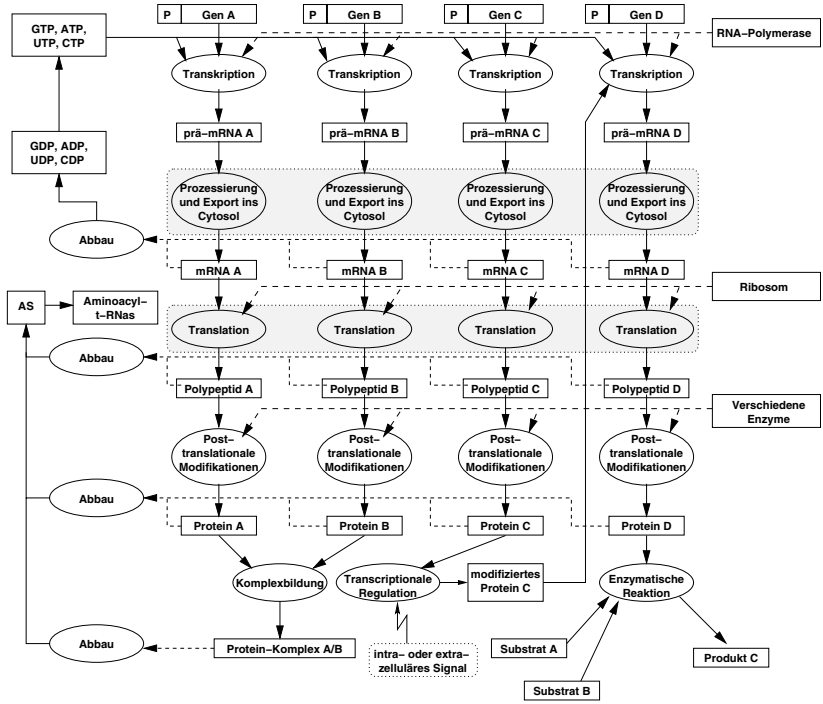


Abb. 1: ***Wichtige Prozesse des eukaryotischen zellulären Reaktionsnetzwerks.*** *Die in der DNA gespeicherte genetische Information wird in prä-mRNA transkribiert, anschließend prozessiert, wobei nicht-kodierende Sequenzen herausgeschnitten werden, und schließlich wird die mRNA, katalysiert von Ribosomen, in Aminosäuresequenzen, den Polypeptiden, translatiert. Letztere, üblicherweise bezeichnet man sie auch als Proteine, erfahren teilweise noch posttranslationale Modifikationen, wie Glykosylierungen, und gelangen letztlich dann an ihren Wirkort, wo sie häufig durch Komplexierung mit anderen Molekülen in Interaktion treten. Am Wirkort erfüllen sie dann vielfältige Funktionen: So agieren sie z.B. als Enzyme, die spezifische biochemische Reaktionen des Metabolismus katalysieren, oder sie übernehmen Transportfunktionen, fungieren als Signalmoleküle oder als Transkriptionsfaktoren, die die Expression anderer Gene beeinflussen.*

oder Proteine dieses Gen als Transkriptionsfaktor oder Cofaktor beeinflußt oder durch welche es unmittelbar beeinflußt wird oder in welchem Umfeld innerhalb des Genoms das Gen liegt. Zudem zeigen diese Datenbanken auch die Position eines Gens im zellulären Reaktionsnetzwerk, z.B. an welchen Stoffwechsel- oder Signaltransduktionswegen es beteiligt ist oder in welchen Kompartimenten das Genprodukt vorkommt. Was diese Datenbanken natürlich nicht können, ist, die Einflüsse einer oder mehrerer Komponenten auf das Verhalten des gesamten Systems abzubilden.

Hierfür ist es erforderlich das dynamische Verhalten des Systems zu betrachten. Die dazu erforderlichen topologischen Daten stehen in den oben genannten Datenbanken zur Verfügung. Desweiteren sind für die deterministische mathematische Modellierung kinetische Gesetze und entsprechende Parameter erforderlich. Hierfür gibt es derzeit noch wenige Datenbanken, die man für die Automatisierung der Modellierung nutzen kann. Daher muss man häufig auf Literaturdaten oder experimentelle Daten zurückgreifen oder plausible Annahmen machen. Für die deterministische Modellierung kann anhand dieser Informationen ein mathematisches Modell in Form eines Differentialgleichungssystems erstellt werden. Für das Verhalten dieses Modells sind zudem noch die Anfangsbedingungen, die durch die Startwerte der Systemvariablen gegeben sind, entscheidend. Diese Werte können ebenfalls der Literatur entnommen oder experimentell ermittelt werden. Insbesondere stehen seit einigen Jahren verschiedene, neue Hochdurchsatzverfahren der Genom-, Transkriptom-, Proteom- und Metabolomforschung zur Verfügung mit Hilfe derer geeignete Werte für die Erstellung auch großer Modelle gewonnen werden können. Zudem liefert die Auswertung dieser experimentellen Ergebnisse häufig noch eine Vielzahl neuer Zusammenhänge zwischen Modellkomponenten, die ebenfalls in die Modelltopologie einfließen können.

Für die Modellierung und Simulation biochemischer Reaktionsnetzwerke gibt es bereits verschiedene spezialisierte Programm, wie z.B. Gepasi (Mendes 1993, Mendes 1997), Virtual Cell (Loew & Schaff 2001, Slepchenko, Schaff, Macara & Loew 2003), E-Cell (Tomita, Hashimoto, Takahashi, Shimizu, Matsuzaki, Miyoshi, Saito, Tanida, Yugi, Venter & Hutchison 1999, Takahashi, Ishikawa, Sadamoto, Sasamoto, Ohta, Shiozawa, Miyoshi, Naito, Nakayama & Tomita 2003), oder die Systems Biology Workbench (Hucka, Finney, Sauro, Bolouri, Doyle & Kitano 2002). Alle diese Programme bieten jedoch bisher keine direkte Anbindung an Datenbanken, wodurch gerade die Erstellung von großen Modellen schwierig bzw. unmöglich ist. Zudem sind viele dieser Programme nicht dafür ausgelegt Systeme mit mehreren hundert oder tausend Differentialgleichungen zu handhaben.

In dieser Arbeit beschreibe ich das Modellierungs- und Simulationssystem PyBioS, das sich gerade durch die Anbindung von Datenbanken für die Modellpopulierung von anderen Systemen wesentlich unterscheidet. Eine Web-

Schnittstelle unterstützt den Benutzer bei der Erstellung von Modellen zellulärer Reaktionsnetzwerke und bietet verschiedene Simulations- und Analysefunktionalitäten. Zudem baut PyBioS auf einem objektorientierten Konzept auf, dessen Nutzen bereits für die Modellierung und Simulation von DNA Array Experimenten gezeigt wurde (Wierling, Steinfath, Elge, Schulze-Kremer, Aanstad, Clark, Lehrach & Herwig 2002). Zunächst beschreibe ich im Folgenden die Implementierung des objektorientierten Systems und rekapituliere einige Grundlagen der kinetischen Modellierung. Anschließend gebe ich einen Überblick der relevanten Datenbanken KEGG und Reactome und erläutere, wie diese für die benutzergeführte Modellpopulierung genutzt werden können. Abschließend gehe ich auf das Skalierungsverhalten des Systems hinsichtlich der Erstellung und Simulation großer Modelle ein und zeige verschiedene Anwendungsbeispiele für den Einsatzbereich von PyBioS.

2 Implementierung

Die Vorgehensweise bei der Modellierung sieht generell folgendermaßen aus: Zuerst wird ein Modell erstellt (1), welches so lange mit Hilfe von Simulationen, Parameter-Fitting und anderen Methoden angepasst wird (2), bis es den experimentellen Beobachtungen entspricht, die man mit dem Modell beschreiben möchte. Anschließend kann das Modell für *in silico* Experimente genutzt werden (3), um Vorhersagen zu treffen, die man dann *in vitro* oder *in vivo* genauer studieren kann (4), oder Fragen zu untersuchen, deren Beantwortung experimentell kaum oder gar nicht möglich ist (5) (Kitano 2002). Die Erkenntnisse, die man in den Schritten 4 und 5 gewinnt, können wiederum zur Verfeinerung des Modells genutzt werden. Dieser rekursive, auf Simulationen aufbauende Ansatz benötigt, speziell für die Analyse großer Systeme, geeignete Programme, die den Anwender dabei unterstützen.

PyBioS bietet Funktionalitäten für die Modellpopulierung, Simulation und Analyse. Modelle in PyBioS haben eine hierarchisch objektorientierte Struktur. Jedes Modell wird in einer separaten Modell-Instanz (ein Objekt der Klasse *SimulationEnvironment*) gespeichert und setzt sich aus Objekten verschiedener Klassen zusammen, die den biologischen Objekten entsprechen und von der abstrakten Klasse *BioObject* erben (Abb. 2). Im Folgenden werden Objekte dieser Klassen als BioObjekte bezeichnet. Einige dieser Klassen erben zusätzlich von einer Container-Klasse (*Environment*), die es diesen Objekten gestattet wiederum andere BioObjekte zu enthalten, wodurch die Modelle ihre hierarchische Struktur bekommen. Alle BioObjekte haben einige gemeinsame Attribute, wie einen eindeutigen Bezeichner (*id*), eine Liste von alternativen Namen (z.B. Trivialnamen von Metaboliten) eine Konzentrationsangabe (*concentration*) und eine Liste von Datenbankreferenzen. Zu-

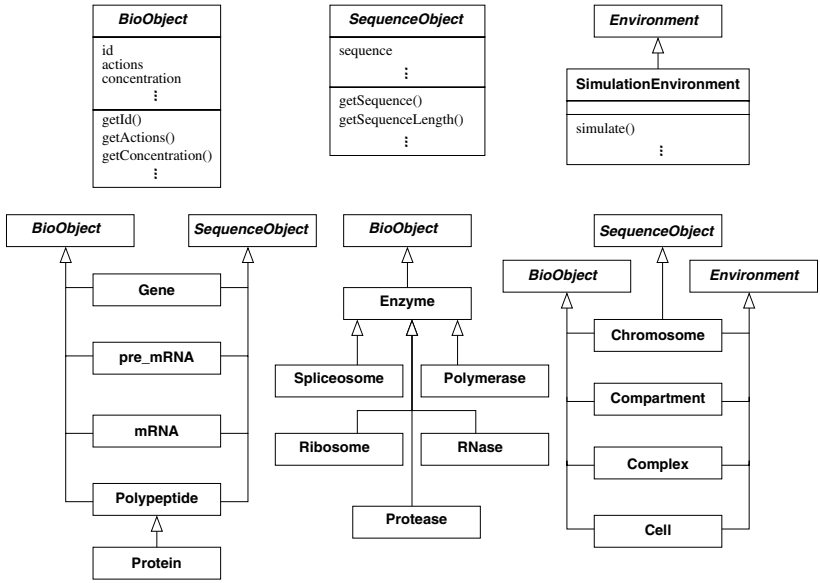


Abb. 2: ***UML Diagramm wichtiger PyBioS Objektklassen, die von BioObject erben.*** *Das Diagramm spiegelt die PyBioS Objektontologie wieder.*

dem haben sie auch eine Liste von Aktionen. Eine Aktion kann dabei z.B. eine biochemische Reaktion sein, die einem Enzym-Objekt zugeordnet ist, oder ein Transport von Molekülen zwischen verschiedenen Kompartimenten, der z.B. von einem Transporterkomplex ausgeführt wird. Aktionen sind Instanzen einer entsprechenden Klasse, die Informationen über die beteiligten Moleküle und deren Stöchiometrie, sowie der Reaktionsgeschwindigkeit, gegeben durch ein kinetisches Gesetz, speichern. Die Attribute der Klasse *Action* werden in Abb. 3 genauer erläutert. Im folgenden Abschnitt werden Grundlagen biochemischer Reaktionskinetiken, sowie die darauf basierende Erstellung eines Differentialgleichungssystems genauer beschrieben. Dieses Konzept wird von PyBioS für die automatisierte Erstellung des mathematischen Modells genutzt.

2.1 Kinetische Modellierung

Das Erstellen mathematischer Modelle biologischer Systeme erfordert die Kenntnis vieler Komponenten des Systems (z.B. Gene, Enzyme, Regulatoren, Metabolite, etc.) und ihrer Interaktionen. Letztere beinhaltet sowohl die Stöchiometrie der Reaktionspartner, also derjenigen Komponenten, die quantitativ umgesetzt werden, als auch Informationen darüber, welche Komponen-

A

Attribut	Bedeutung	Beispiel
Name (id):	Bezeichner der Reaktion	Phosphorylierung
Enzym (E):	$E_1 \ldots E_k$	Hexokinase
Substrate (S):	$i_1\ S_1 \ldots i_l\ S_l$	ATP, Glukose
Produkte (P):	$j_1\ P_1 \ldots j_m\ P_m$	ADP, Glukose 6-Phosphat
Modulatoren:	$M_1 \ldots M_n$	
Reaktion:	$i_1\ S_1 + \ldots + i_l\ S_l \longrightarrow j_1\ P_1 + \ldots + j_m\ P_m$	ATP + Glukose $\longrightarrow$ ADP+ Glukose 6-Phosphat
Kinetik:	$v = f(S)$	$v = K$ [ATP] [Glukose]

B

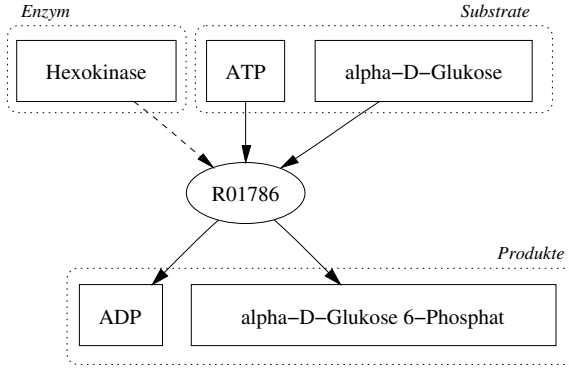


Abb. 3: ***Attribute der Klasse Action. A:*** *E, S, P und M sind jeweils Listen der Länge k, l, m bzw. n. Die Elemente dieser Listen referenzieren BioObjekte sowie deren stöchiometrische Koeffizienten.* ***B:*** *Visualisierung der von der Hexokinase katalysierten Reaktion. Rechtecke stellen biologische Objekte dar; die Ellipse symbolisiert eine Reaktion. Durchgezogene Linien stellen Massenfluss und gestrichelte Linien Informationsfluss dar.*

ten Einfluß auf die jeweiligen Reaktionen nehmen, ohne jedoch selber verbraucht oder produziert zu werden, also unverändert aus der Reaktion wieder hervorgehen. Zudem muss man für alle Stoffflüsse auch deren Geschwindigkeitsgesetz, also deren Kinetik kennen oder plausible Annahmen machen. Die Kinetik einer biochemischen Reaktion läßt sich mit dem Massenwirkungsgesetz beschreiben, welches besagt, dass die Reaktionsrate proportional zu der Wahrscheinlichkeit der Kollision der jeweiligen Reaktanden ist (Guldberg & Waage 1879). Allgemein gilt hierfür

$$v = v_{\rightarrow} - v_{\leftarrow} = k_{\rightarrow} \prod_i S_i^{n_i} - k_{\leftarrow} \prod_j P_j^{m_j}, \tag{1}$$

wobei $v_{\rightarrow}$ und $v_{\leftarrow}$ jeweils die Reaktionsraten der Hin- bzw. Rückreaktion sind, $k_{\rightarrow}$ und $k_{\leftarrow}$ die entsprechenden Geschwindigkeitskonstanten und S_i und P_j bezeichnen die Substrat- bzw. Produktkonzentrationen mit ihren jeweiligen stöchiometrischen Koeffizienten n_i und m_j im Exponenten. Für die bimolekulare Reaktion

$$\mathrm{S_1 + S_2} \underset{v_{\leftarrow}}{\overset{v_{\rightarrow}}{\rightleftharpoons}} \mathrm{2P} \tag{2}$$

lautet dann die Kinetik wie folgt:

$$v = k_{\rightarrow} S_1 \cdot S_2 - k_{\leftarrow} P^2 \tag{3}$$

Eine Annahme für die deterministische kinetische Modellierung ist, dass sämtliche Reaktanden homogen verteilt sind.

Basierend auf den Grundlagen des Massenwirkungsgesetzes lassen sich verschiedene Standardkinetiken für enzymkatalysierte Reaktionen ableiten. Eine davon ist die von (Michaelis & Menten 1913), die später noch von (Briggs & Haldane 1925) erweitert wurde, und wie folgt lautet:

$$v = \frac{V_{max} S}{S + K_m} \tag{4}$$

Diese Kinetik weist ein Sättigungsverhalten auf, dessen Maximum (V_{max}) proportional zur Enzymkonzentration ist. K_m ist diejenige Substratkonzentration, bei der die halb-maximale Umsatzrate erzielt wird. So wie diese, gibt es noch eine Vielzahl anderer Kinetiken, z.B. auch für die Genregulation, die in der mathematischen Modellierung biologischer Reaktionsnetzwerke Anwendung finden.

PyBioS bietet hierfür bereits eine umfangreiche Sammlung verschiedenster Kinetiken, aus denen der Anwender wählen kann. Für den Fall, dass keine geeignete Kinetik vorhanden ist, können auch eigene Kinetiken vom Benutzer definiert werden.

Die Änderungen der Konzentrationen der Komponenten in Abhängigkeit von der Zeit t ergeben sich aus den jeweiligen Zu- und Abflussraten wie folgt:

$$\frac{dS_i}{dt} = \sum_{j=1}^{r} n_{ij} v_j \qquad \text{für} \quad i = 1, \ldots, m \tag{5}$$

(Glansdorff & Prigogine 1971). In diesem System gewöhnlicher Differentialgleichungen (*ordinary differential equation*, ODE) ist S_i die Konzentration der $i$ten Komponente, v_j die Reaktionsrate der $j$ten Reaktion und n_{ij} der stöchiometrische Koeffizient der $i$ten Komponente in der $j$ten Reaktion. Das mathematische Modell, das durch die in Formel 5 gegebenen Systemgleichungen (Balancegleichungen) definiert ist, wird von PyBioS automatisch aus dem objektorientierten Modell generiert und für die Simulation geeigneten numerischen Integratoren (LSODA, (Hindmarsh 1983, Petzold 1983) bzw. LIMEX, (Deuflhard, Hairer & Zugck 1987)) zugeführt. Beide Integratoren unterstützen das Lösen steifer Differentialgleichungssysteme, die ohne weiteres bei komplizierteren Kinetiken auftreten können.

Anhand von Erhaltungsbedingungen des Modells, die sich aufgrund linearer Abhängigkeiten einzelner Komponenten ergeben können, kann das Differentialgleichungssystem vereinfacht werden, indem einige der Differentialgleichungen durch algebraische Gleichungen ersetzt werden können, und somit das ODE-System in ein differentiell-algebraisches System mit einer reduzierten Anzahl unabhäniger Variablen überführt wird. Die Erhaltungsbedingungen lassen sich dabei aus der stöchiometrischen Matrix des Systems berechnen. Die stöchiometrische Matrix ist die Matrix der stöchiometrischen Koeffizienten, in der die Spalten einzelnen Reaktionen und die Zeilen einzelnen Komponenten (Systemvariablen bzw. biologischen Objekten) entsprechen (Klipp, Herwig, Kowald, Wierling & Lehrach 2005, S. 165–168).

2.2 Web-basierte Anwenderschnittstelle

Abb. 4 zeigt die Web-basierte Anwenderschnittstelle von PyBioS. Der Anwender kann aus einer Sammlung verschiedenster Modelle wählen, die gleichzeitig Basis für die Erstellung neuer Modelle sein können. Verschiedene Modellansichten erlauben dabei den Zugriff auf die modellspezifischen Funktionalitäten. Hierzu gehört eine klare Darstellung der hierarchischen Modellstruktur, ein mittels GraphViz[1] automatisch generiertes Reaktionsnetzwerk, die Reaktionsliste, das Interface zur Simulationsschnittstelle, die Populierungsschnittstelle, über die Modelle erzeugt, erweitert oder modifiziert werden können, verschiedene Analyse-Werkzeuge, sowie Export/Import-Mög-

[1] http://www.graphviz.org

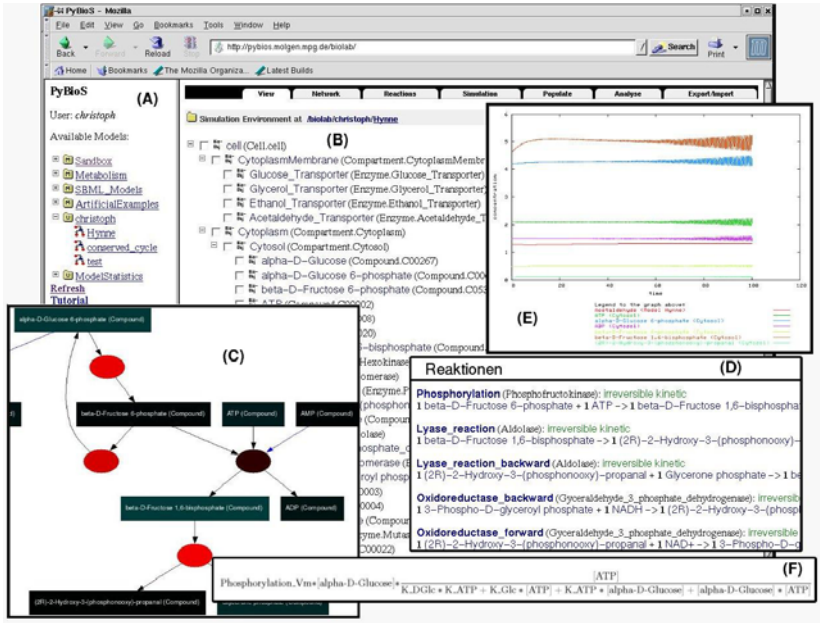


Abb. 4: ***PyBioS' Anwenderschnittstelle.*** *Aus einer Sammlung von Modellen* ***(A)*** *kann der Nutzer ein bestimmtes auswählen und über die „View"-Ansicht* ***(B)*** *dessen hierarchische Struktur darstellen und Ergänzungen oder Änderungen vornehmen. Die „Network"-Ansicht* ***(C)*** *liefert ein automatisch generiertes Verknüpfungsdiagramm des zellulären Reaktionsnetzwerks dessen rechteckige Knoten biologische Objekte und dessen elliptische Knoten Reaktionen repräsentieren. Die Farbe der Pfeile differenziert zwischen Massenfluß (schwarz) und ausschließlichem Informationsfluß (andere Farben). Zum vereinfachten Navigieren sind sämtliche Knoten direkt mit den entsprechenden Reaktions- bzw. Objektansichten verknüpft. Die „Reaktions"-Ansicht* ***(D)*** *bietet eine Übersicht über sämtliche Einzelreaktionen. Die „Simulations"-Ansicht* ***(E)*** *ermöglicht individuelle Simulationen und stellt die Zeitkurven der Konzentrationen bzw. Flüsse graphisch dar. Die den Reaktionen zugeortneten Kinetiken können nutzerfreundlich dargestellt werden* ***(F)****; diese Routine verwendet LaTeX zur automatischen Formatierung.*

lichkeiten u.a. für SBML, wodurch PyBioS kompatibel zu anderen Systemen ist.

3 Automatische Modellerstellung und Anwendungsbeispiele

PyBioS unterscheidet sich von anderen Systemen besonders dadurch, dass es eine direkte Anbindung an verschiedene Datenbanken bietet. Dies ermöglicht einerseits eine schnelle und automatisierte Erstellung verschiedenster biologischer Modelle zellulärer Systeme. Andererseits besitzen die BioObjekte bzw. Aktionen der so erstellten Modelle Referenzen auf die Datenbankeinträge,

wodurch ein solches Modell leicht erweiterbar wird und über die Referenzen eine Vielzahl an zusätzlichen Informationen, wie Trivialnamen der Moleküle, Sequenzen von Genen oder Proteinen oder Strukturformeln von Molekülen zur Verfügung stehen.

Über die geneneralisiete Datenbankschnittstelle des Systems besteht bereits Zugriff auf die Datenbanken KEGG[2], Reactome[3] und Transpath[4]. Weitere Datenbanken, die Informationen zu biochemischen Reaktionen oder zellulären Prozessen bieten, lassen sich ebenfalls leicht anbinden. Im folgenden Abschnitt werden die Datenbanken KEGG und Reactome genauer beschrieben und gezeigt, wie diese für die Modellpopulierung genutzt werden können.

3.1 Datenbanken

Die KEGG Datenbank (*Kyoto Enzyclopedia of Genes and Genomes*, (Kanehisa, Goto, Kawashima, Okuno & Hattori 2004)) bietet umfangreiche Informationen zu genomischen und metabolischen Daten sowie Signaltransduktionswegen für eine Vielzahl unterschiedlicher Organismen. PyBioS nutzt davon Informationen zu Stöchiometrien vieler biochemischer Reaktionen, den beteiligten Molekülen sowie den katalysierenden Enzymen.

Eine andere Datenbank, die viele, für die Modellierung zellulärer Reaktionsnetzwerke relevante Informationen bietet, ist die Reactome Datenbank (Joshi-Tope, Vastrik, Gopinathrao, Matthews, Schmidt, Gillespie, D'Eustachio, Jassal, Lewis, Wu, Birney & Stein 2003, Joshi-Tope, Gillespie, Vastrik, D'Eustachio, Schmidt, de Bono, Jassal, Gopinath, Wu, Matthews, Lewis, Birney & Stein 2005). Reactome steht als lokal installierbare MySQL Datenbank zur Verfügung und berücksichtigt, im Gegensatz zu KEGG, unter anderem auch die Kompartimentierung.

3.2 Datenbankschnittstelle

Das Benutzerinterface der Datenbankschnittstelle ist in Abb. 5 dargestellt. Der erste Schritt (1) ist die Suche nach einem bestimmten biologischen Reaktionsweg (*pathway*) oder einem Metaboliten oder Gen (*compound or gene*). In Abb. 5 wird z.B. nach Apoptose (*apoptosis*, programmierter Zelltod) in der Reactome Datenbank gesucht. Aus einer Liste möglicher Reaktionswege kann dann ein bestimmter ausgewählt werden dessen Reaktionen man sucht (2). Anschließend können diejenigen Reaktionen selektiert werden, die populiert werden sollen (3) und ggf. kann man sich das entsprechende Reaktionsnetzwerk graphisch darstellen lassen (4). Möchte man noch zusätzliche

[2] http://www.kegg.org
[3] http://www.reactome.org
[4] http://www.biobase.de

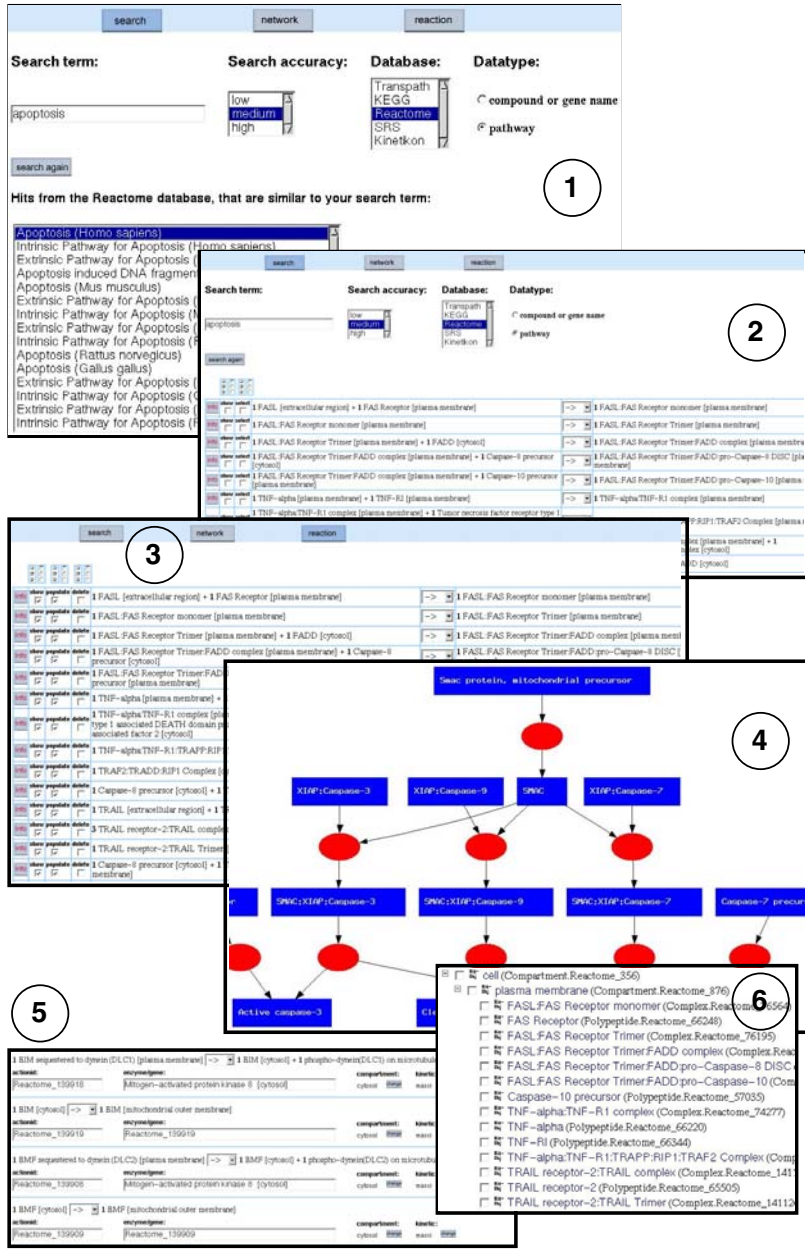


Abb. 5: ***Benutzerinterface der Datenbankschnittstelle.*** *Weitere Details zur Datenbank-gestützten Modellerstellung finden sich im Text.*

Reaktionen hinzufügen, so kann man nun zum Suchinterface (1) zurückkehren und die Liste der zu populierenden Reaktionen mit Ergebnissen einer weiteren Suche in der selben oder einer anderen Datenbank erweitern. Hat man schließlich alle relevanten Modellreaktionen selektiert, kann man Details der Kompartimentierung und der Kinetiken ggf. noch ändern (5) und schließlich das Modell populieren (6).

3.3 Skalierungsverhalten

Um das Skalierungsverhalten von PyBioS hinsichtlich der automatischen Modellgenerierung und Simulation zu bestimmen, wurden unterschiedlich große Modelle automatisch aus den metabolischen Daten der KEGG Datenbank generiert. Als Reaktionskinetik wurde jeweils die Massenwirkungskinetik verwendet. Die Ergebnisse für die Populierug bzw. Simulation der jeweiligen Modelle sind in Abb. 6 dargestellt. Hierbei findet sich für die Modelpopulierung ein lineares Verhalten in Abhänigkeit von der Anzahl der Reaktionen, wohingegen die Dauer der Simulation quadratisch mit der Anzahl der Reaktionen skaliert. Die Ergebnisse zeigen zudem, dass auch relativ große Systeme in angemessener Zeit simuliert werden können. Die Skalierungsmessungen wurden auf einem handelsüblichen PC (AMD Athlon(tm) XP 2800+ mit 1,5 GB Arbeitsspeicher) unter dem Betriebssystem LINUX durchgeführt.

3.4 Anwendungen

Durch die Anbindung an relativ umfangreiche Datenbanken stehen natürlich eine Vielzahl unterschiedlicher Modelle zur Verfügung. Für viele dieser Modelle fehlen allerdings geeignete kinetische Daten. Daher wird im Folgenden ein Ansatz gezeigt, wie man trotz dieser fehlenden Informationen Erkenntnisse über das Modellverhalten gewinnen kann. Im zweiten Anwendungsbeispiel stelle ich, anhand eines kleinen, artifiziellen Modells, den Nutzen des Parameter-Scannings für die Modellanalyse dar.

3.4.1 Simulation großer metabolischer Modelle

Das Down-Syndrom ist eine genetisch bedingte Erkrankung. Verursacht wird die Krankheit durch das dreifache Auftreten des Chromosoms 21 im menschlichen Genom (Trisomie 21). Üblicherweise sind alle Chromosomen, abgesehen von den Geschlechtschromosomen, nur in doppelter Ausführung vorhanden. Man nimmt an, dass durch die zusätzliche Kopie dieses Chormosoms und somit auch der Gene, die dieses Chromosom kodiert, ein Ungleichgewicht im zellulären Reaktionsnetzwerk auftritt.

Um diese Problemstellung mit dem hier vorgestellten System genauer zu untersuchen, wurde ein Modell für den gesamten Metabolismus einer menschlichen Zelle erstellt, soweit entsprechende Reaktionen in der KEGG Daten-

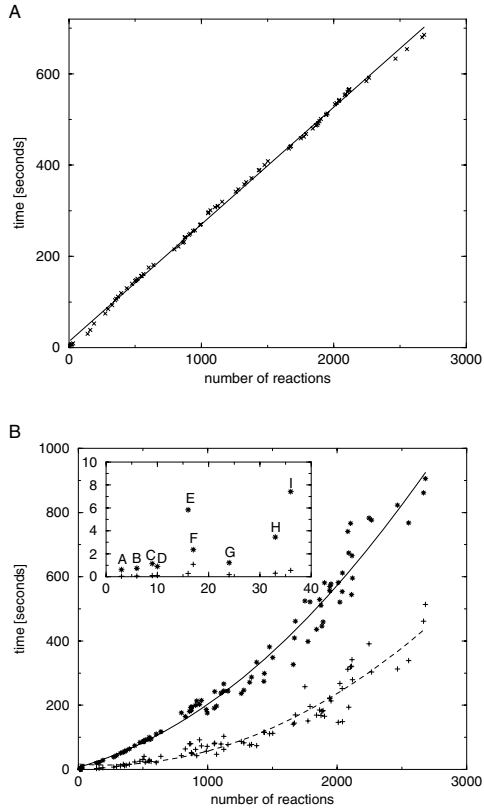


Abb. 6: ***Skalierungsverhalten von PyBioS für verschieden große Modelle.*** *In* ***(A)*** *ist die Zeit für die Populierung gegen die Anzahl der Modellreaktionen abgetragen. Die durchgezogene Linie zeigt eine lineare Regression durch die Messwerte. In* ***B*** *wird das Skalierungsverhalten bezüglich der Simulationszeit für unterschiedlich große Systeme im Zeitintervall [0,10] (+) bzw. [0,1000] (*) betrachtet. Die gestrichelte bzw. durchgezogene Linie ist eine quadartische Regression durch die Messwerte. A-H in der eingesetzten Graphik zeigen das Skalierungsverhalten einiger Modelle aus der SBML-Modellsammlung (http://sbml.org/models.html). I ist eine Reimplementierung des Modells von Hynne, Dano & Sorensen 2001.*

bank verfügbar waren. Das sich daraus ergebende Modell umfasst 1148 Metabolite, 1104 Enzyme und 3857 Reaktionen mit Massenwirkungskinetiken. Es wurde nun im Weiteren von zwei verschiedenen Modellen ausgegangen: Im ersten Fall, dem Normalzustand, haben alle Enzyme eine Konzentration von 1,0; im Krankheitszustand, haben jedoch die Enzyme, die von Chromosom 21 kodiert werden, eine Konzentration von 1,5.

Würfelt man nun die kinetischen Konstanten und simuliert für beide Modelle mit den selben, zufällig gewählten Konstanten bis in den Gleichgewichtszustand, so ergeben sich für einige Metabolite Unterschiede in den Konzentrationen zwischen den beiden Modellen. Dies wurde 30 mal wiederholt und anschliessend das Mittel der Konzentrationsänderungen für die jeweiligen Metabolite bestimmt. Dadurch findet man dann Metabolite, die tendenziell im Krankheitszustand erhöht oder erniedrigt sind.

Überraschenderweise lieferte dieser Ansatz unter den 19 niedrigsten Verhältnissen 3 Metabolite, für die bereits in der Literatur entsprechende experimentelle Befunde vorliegen, und dass, obwohl eine Vielzahl an Unbekannten in das Modell eingeflossen sind und zudem davon auszugehen ist, dass die in der KEGG Datenbank zum menschlichen Metabolismus zur Verfügung stehenden Informationen unvollständig sind.

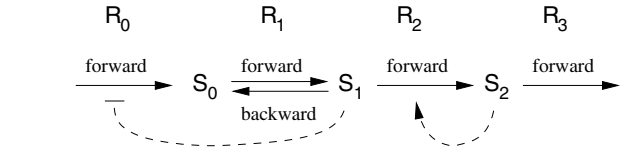
3.4.2 Parameter-Scanning

Neben den zuvor dargestellten großen Modellen, können mit PyBioS natürlich auch kleine, individuell konzipierte Modelle bearbeitet werden. In Abb. 7A ist ein Reaktionsnetzwerk bestehend aus drei Metaboliten und vier Reaktionen dargestellt, bei dem S_0 stetig synthetisiert wird und über S_1 zu S_2 reagiert; S_2 wird schließlich kontinuierlich abgebaut. Zu beachten sind die Aktivierung der Reaktion R_2 durch S_2 und die Inhibierung von R_0 durch S_1. Die Ratengleichungen sowie das Differentialgleichungssystem (ODE-System) dieses Modells sind ebenfalls in Abb. 7 wiedergegeben. Da für den Gleichgewichtszustand die linke Seite des ODE-Systems 0 sein muss, kann für dieses kleine Modell eine analytische Lösung gefunden werden.

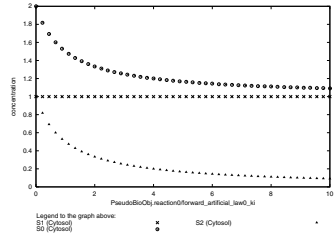
Beim Parameter-Scanning wird ein Parameter sukzessive innerhalb eines vorgegebenen Intervalls variiert und die Konzentrationen bzw. Flüsse im Gleichgewicht ermittelt. Anschließend werden die Gleichgewichtskonzentrationen bzw. Flüsse gegen den jeweiligen Parameter in einer Graphik abgetragen. Abb. 7B zeigt eine solche Graphik für den Parameter k_i, der den inhibitorischen Einfluß von S_1 auf R_0 darstellt. Es zeigt sich eine Übereinstimmung mit der analytischen Lösung. Eine entsprechende Graphik für den Parameter k_2, der die Geschwindigkeitskonstante von R_2 ist, und dessen Einfluss auf die Flüsse des Modells ist in Abb. 7C wiedergegeben.

PyBioS bietet zwei verschiedene numerische Methoden zur Bestimmung

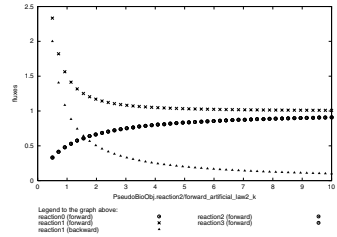
A



B



C



Rate laws:

$$
\begin{aligned}
R_0^{\rightarrow} &= \frac{k_0}{1 + k_i S_1} \\
R_1^{\rightarrow} &= k_1 S_0 \\
R_1^{\leftarrow} &= k_{-1} S_1 \\
R_2^{\rightarrow} &= k_2 S_1 S_2 \\
R_3^{\rightarrow} &= k_3 S_2
\end{aligned}
$$

ODE-system:

$$
\begin{aligned}
dS_0/dt &= R_0^{\rightarrow} - R_1^{\rightarrow} + R_1^{\leftarrow} \\
dS_1/dt &= R_1^{\rightarrow} - R_1^{\leftarrow} - R_2^{\rightarrow} \\
dS_2/dt &= R_2^{\rightarrow} - R_3^{\rightarrow}
\end{aligned}
$$

Analytical solutions at steady state:

Concentrations:

$$
\begin{aligned}
S_0 &= \frac{1}{k_1}\left(\frac{k_0}{1 + \frac{k_i k_3}{k_2}} + \frac{k_{-1} k_3}{k_2}\right) \\
S_1 &= \frac{k_3}{k_2} \\
S_2 &= \frac{1}{k_3}\left(\frac{k_0}{1 + \frac{k_i k_3}{k_2}}\right)
\end{aligned}
$$

Fluxes:

$$
\begin{aligned}
R_0^{\rightarrow} &= \frac{k_0}{1 + \frac{k_i k_3}{k_2}} \\
R_1^{\rightarrow} &= \frac{k_0}{1 + \frac{k_i k_3}{k_2}} + \frac{k_{-1} k_3}{k_2} \\
R_1^{\leftarrow} &= \frac{k_{-1} k_3}{k_2} \\
R_2^{\rightarrow} &= \frac{k_0}{1 + \frac{k_i k_3}{k_2}} \\
R_3^{\rightarrow} &= \frac{k_0}{1 + \frac{k_i k_3}{k_2}}
\end{aligned}
$$

Abb. 7: ***Beispiel zur Untersuchung des Einflusses verschiedener Parameter auf das Systemverhalten.*** *Weitere Details hierzu finden sich im Text.*

des Gleichgewichtszustands: Entweder direkt durch Simulation oder über die numerische Bestimmung der Nullstellen des ODE-Systems.

4 Zusammenfassung und Ausblick

Das in dieser Arbeit vorgestellte System PyBioS bietet viele Funktionalitäten für die Erstellung, Simulation und Analyse komplexer biologischer Modelle. Durch den objektorientierten, hierarchischen Ansatz können Modelle erstellt werde, die sich an zytologischen und molekularen Strukturen orientieren. Diese Funktionalität wird bisher von vielen anderen Progammen kaum unterstützt. Zudem kann PyBioS als Repositorium für biologische Modelle fungieren, da es über das World Wide Web zur Verfügung steht. Eine weitere Besonderheit des Systems ist die direkte Anbindung biologischer Datenbanken, wodurch eine Vielzahl an Modellen erstellt werden können, die aufgrund der Datenbankreferenzen leichter wiederverwertbar und erweiterbar sind. Da fast sämtliche Funktionalitäten, die die Web-basierte Benutzerschnittstelle bietet, direkt über URL-Referenzen ansprechbar sind, können diese auch in HTML-Dokumenten zur Dokumentation der Modelle verwendet werden. Die Anwendungsmöglichkeiten für PyBioS reichen von Modellen für z.B. kleine Signaltransduktionswege bis hin zu Zellsimulationen.

Neben den bisherigen Datenbankanbindungen zu KEGG, Reactome und Transpath, ist auch eine Integration der SRS (*Sequence Retrival System*) Datenbank der Firma Lion Biosystems (Cambridge, Großbritannien) in Entwicklung, die ebenfalls, wie die Reactome-Anbindung, Teil des von der Europäischen Union geförderten Projekts EMI-CD ist. SRS integriert mehrere Datenbanken und schafft dadurch Quervernetzungen zwischen den Datenbanken.

Desweiteren findet die Weiterentwicklung und Nutzung von PyBioS in den von der Europäischen Union geförderten Projekten EMBRACE und ESBIC-D statt. Das EMBRACE Projekt ist ein Exzellenznetzwerk zur Vernetzung wichtiger europäischer Datenbanken über einheitliche Schnittstellen. ESBIC-D ist ein Koordinationsprojekt zur systematischen Untersuchung krebsrelevante Signalwege.

PyBioS ist als Erfindungsmeldung bei der Garching Inovation GmbH (Nr. GI 3000220) angemeldet und die Patentierung des Systems ist beim Europäischen Patentamt (PCT Nr. PCT/EP2005/005357) eingereicht.

Danksagung

Bedanken möchte ich mich bei Herrn Prof. Hans Lehrach, Herrn Dr. Ralf Herwig, Frau Dr. Edda Klipp und Herrn Hendrik Hache für vielfältige Unterstützung, Ratschläge and Ideen. Zudem bedanke ich mich besonders bei Frau Elisabeth Maschke-Dutz für die Unterstützung bei der Implementierung des Systems.

Diese Arbeit wurde finanziert von der Max-Planck-Gesellschaft, dem Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF, Nationales Genomforschungsnetzwerk, Kernbereich „Bioinformatik und Datenbanken“, Fördernummer 01GR0105) und der Europäischen Union (Project EMI-CD, Fördernummer LSHG-CT-2003-503269).

Literatur

Briggs, G. & Haldane, J. (1925). A note on the kinetics of enzyme action, *Biochem. J.* **19**: 338–339.

Deuflhard, P., Hairer, E. & Zugck, J. (1987). One step and extrapolation methods for differential-algebraic systems, *Num. Math.* **51**: 501–516.

Glansdorff, P. & Prigogine, I. (1971). *Thermodynamic theory of structure, stability and fluctuations*, Wiley-Interscience, London.

Guldberg, C. & Waage, P. (1879). Über die chemische Affinität, *J. Prakt. Chem.* **19**: 69.

Hindmarsh, A. (1983). Odepack, a systematized collection of ODE solvers, *in* R. Stepleman & et al. (eds), *Scientific computing*, North-Holland, Amsterdam, pp. 55–64.

Hucka, M., Finney, A., Sauro, H. M., Bolouri, H., Doyle, J. & Kitano, H. (2002). The erato systems biology workbench: enabling interaction and exchange between software tools for computational biology, *Pac Symp Biocomput* pp. 450–61.

Hynne, F., Dano, S. & Sorensen, P. G. (2001). Full-scale model of glycolysis in saccharomyces cerevisiae, *Biophys Chem* **94**(1-2): 121–63.

Joshi-Tope, G., Gillespie, M., Vastrik, I., D'Eustachio, P., Schmidt, E., de Bono, B., Jassal, B., Gopinath, G. R., Wu, G. R., Matthews, L., Lewis, S., Birney, E. & Stein, L. (2005). Reactome: a knowledgebase of biological pathways., *Nucleic Acids Res* **33**(Database issue): D428–32.

Joshi-Tope, G., Vastrik, I., Gopinathrao, G., Matthews, L., Schmidt, E., Gillespie, M., D'Eustachio, P., Jassal, B., Lewis, S., Wu, G., Birney, E. & Stein, L. (2003). The genome knowledgebase: A resource for biologists and bioinformaticists, *Cold Spring Harbor Symposia on Quantitative Biology*, Vol. 68, Cold Spring Harbor laboratory Press, pp. 237–243.

Kanehisa, M., Goto, S., Kawashima, S., Okuno, Y. & Hattori, M. (2004). The KEGG resource for deciphering the genome, *Nucleic Acids Res* **32**(Database issue): D277–80.

Kitano, H. (2002). Computational systems biology., *Nature* **420**(6912): 206–10.

Klipp, E., Herwig, R., Kowald, A., Wierling, C. & Lehrach, H. (2005). *Systems Biology in Practice. Concepts, Implementation and Application.*, WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim.

Loew, L. M. & Schaff, J. C. (2001). The virtual cell: a software environment for computational cell biology, *Trends Biotechnol* **19**(10): 401–6.

Mendes, P. (1993). Gepasi: a software package for modelling the dynamics, steady states and control of biochemical and other systems, *Comput Appl Biosci* **9**(5): 563–71.

Mendes, P. (1997). Biochemistry by numbers: simulation of biochemical pathways with gepasi 3, *Trends Biochem Sci* **22**(9): 361–3.

Michaelis, L. & Menten, M. (1913). Die Kinetic der Invertinwirkung, *Biochemische Zeitschrift* **49**: 334–369.

Petzold, L. (1983). Automatic selection of methods for solving stiff and nonstiff systems of ordinary differential equations, *siam j. sci. stat. comput.* **4**: 136–148.

Slepchenko, B. M., Schaff, J. C., Macara, I. & Loew, L. M. (2003). Quantitative cell biology with the Virtual Cell, *Trends Cell Biol* **13**(11): 570–6.

Takahashi, K., Ishikawa, N., Sadamoto, Y., Sasamoto, H., Ohta, S., Shiozawa, A., Miyoshi, F., Naito, Y., Nakayama, Y. & Tomita, M. (2003). E-Cell 2: Multi-platform E-Cell simulation system, *Bioinformatics* **19**(13): 1727–1729.

Tomita, M., Hashimoto, K., Takahashi, K., Shimizu, T. S., Matsuzaki, Y., Miyoshi, F., Saito, K., Tanida, S., Yugi, K., Venter, J. C. & Hutchison, C. A., r. (1999). E-CELL: software environment for whole-cell simulation, *Bioinformatics* **15**(1): 72–84.

Wierling, C. K., Steinfath, M., Elge, T., Schulze-Kremer, S., Aanstad, P., Clark, M., Lehrach, H. & Herwig, R. (2002). Simulation of DNA array hybridization experiments and evaluation of critical parameters during subsequent image and data analysis, *BMC Bioinformatics* **3**(1): 29.

Weitere Beiträge für den Heinz-Billing-Preis 2005

The Interactive Reference Tool for the World Atlas of Language Structures

Hans-Jörg Bibiko, Martin Haspelmath, Matthew S. Dryer, David Gil & Bernard Comrie
Max Planck Institute for Evolutionary Anthropology, Department of Linguistics, Leipzig

Abstract

The Interactive Reference Tool, as presented in this paper, is a system for organizing of comparative data from large samples of the world's languages. The tool is explicitly designed to provide linguists with an easy-to-use tool for research and language information management, and to give students or non-linguists easy access to information on the world's linguistic diversity. The user interface is intended to be intuitively understandable, so as to also allow for usage by non-sophisticated computer users.

1. Introduction

Data processing tools for information about the world's languages, which are intended for linguists and non-linguists alike, are thinly scattered. The

need for an easy access to information about the world's linguistic diversity for both scientific and educational purposes is growing continuously. However, there are few efforts to develop tools that provide such functionality (a rare example is Kortmann et al. 2004). The Interactive Reference Tool to the *World Atlas of Language Structures* has been developed to fill this gap.

The Interactive Reference Tool (IRT) has been designed as a platform for visualization of linguistic phenomena worldwide, incorporating multiple search facilities and tools for generating maps. The program combines easy install and use for experts and non-experts alike. The data that are currently available within the IRT are the data as supplied by the *World Atlas of Language Structures*, but the program is set up to be easily expandable in the future. However, to introduce the kind of data that the IRT is supposed to handle, first a quick introduction to the *World Atlas of Language Structures* will be given. After this, the functions as provided by the IRT will be presented.

1.1. The World Atlas of Language Structures

The *World Atlas of Language Structures* (Haspelmath et al. 2005) is currently the largest available coherently structured collection of grammatical information on the world's languages. The atlas has been published as a printed book in traditional atlas format. It consists of 142 world-maps—with accompanying texts—on highly diverse characteristics of language. For example, there are maps showing the number of vowels in a language, the order of noun and genitive, the existence of a passive construction, or whether the language distinguishes different words for the meanings 'hand' and 'arm' or not.

The data have been gathered from descriptive materials as available on the world's languages (such as reference grammars) by a team of more than 40 authors, many of them the leading authorities on the subject. Each map shows a representative sample of the world's languages, comprising between 120 and 1,370 languages out of the approximately 7,000 languages currently spoken around the globe. In the maps, each language is represented by a dot with different colors and shapes indicating the different linguistic types. Altogether 2,560 languages are included in the atlas, and more than 58,000 dots give information on the structure of the world's languages. Although endangered languages are not particularly emphasized in the atlas, they are automatically fore-grounded because each language is shown by a uniformly formatted dot, independently of its number of speakers.

Because of the intuitive display in the form of an atlas, the *World Atlas of Language Structures* makes information on the structural diversity of the

world's languages available to a large audience, including interested non-linguists as well as linguists unfamiliar with the specialized literature on particular 'exotic' languages. However, the printed maps allow for only one unchangeable visualization of the data. To allow for a more flexible usage of the information supplied in the atlas, The Interactive Reference Tool was developed.

2. The Interactive Reference Tool

The Interactive Reference Tool (IRT, available on CD-ROM with the published atlas) has three main functions: customizing the display of the maps, providing complete reference to the languages displayed, and supplying open queries throughout all the data available. All these functions are implemented in an intuitively understandable way, so that even non-sophisticated users and non-linguists will be able to use the IRT, without much effort or training. (An inspection of the 'guided tour', as supplied with the program, should be sufficient to understand the majority of its functions.)

First, the IRT allows the user to view the maps (as supplied in the printed atlas) in a variety of different forms. The interactive maps can be zoomed and panned, dot colors and shapes can be customized, and various geographic properties (like rivers, country names, topology, etc.) can be shown. Missing information based on the user's own data can be added through an import function and customized maps can be saved, printed and exported for usage in publications or presentations. Further, for each dot on the interactive maps, the corresponding language name is shown with the 'mouse-over' effect, and with a click on the dot a language profile (see below) appears in a separate window. Additionally, the different types of languages, as distinguished on a particular map, can be grouped. For example, a map showing five different types of languages can be transformed at will by combining any subgroup of these five types into one class, thus allowing the user to inspect the geographical distribution of overarching groups of characteristics.

Second, the IRT contains additional information on all 2,560 languages included in the atlas. There is information on genealogical classification, alternative names, geographical location and more than 6,700 references to the literature used. This information is summarized in the language profile of a particular language, together with a list of all maps in which the language in question appears and the type of this language in this map. Moreover, for almost all information points (viz. each combination of language, map, and language-type) there is additional information in the form of an exact bibliographical reference (down to the page numbers from which the information is taken), and many points additionally contain

example sentences. Furthermore, all languages can be searched by language name, family and genus name, and country, and any selection of languages can be displayed on a customizable map.

Third, there are two kinds of queries supplied: a basic, intuitively easy to understand option to combine two maps, and a more complex query system for advanced users. The basic option to combine maps allows for the selection of two maps from the atlas. The result will be a display of the compound feature, consisting of all attested combinations of types from the two maps (with all options of customization as discussed above, in particular the possibility to create groups of types). The generation of such compound features is extremely useful for research in the field of linguistic typology. In this kind of research, the interaction between different, often apparently independent, characteristics of languages is investigated. One can think of, for example, the cross-section of a question-word-fronting rule with a particular word order type, the existence of tone with the size of the consonant inventory, or the alignment type (accusative, ergative, active-inactive) with the head-dependent marking type. With the basic and easy-to-use functionality of combining two maps, as supplied in the IRT, even technically unsophisticated users will be able to investigate such correlations.

The option of performing more complex queries is also supplied in the IRT. Even this rather complex part of the program is designed to be used without prior intense study of a manual. Any combination of any number of structural characteristics from the available data can be generated with an easily understandable 'select and click' mechanism. Furthermore, geographical and genealogical information can also be included in such queries. Complex queries can be saved and used as filters for other queries. Such research possibilities, as allowed by the IRT, by far surpass everything else that is currently available for linguistic typology.

3. Technology

The IRT was developed as a standalone application for Macintosh and Windows platforms, based on the premise of a program that should be easy to use. After an exhaustive search for a suitable programming language the choice was made to draw on Macromedia's *Director* and *Flash*, using the languages Lingo and Actionscript. Both languages are designated to handle multi-media based data in a fast and efficient way. Furthermore the IRT uses an in-built SQL server that provides all genealogical, geographical, linguistic, and bibliographical data. The structure with an in-built server was chosen for three reasons. First, the need for the installation of any additional software is avoided. Second, in this way there is fast access to the

huge amount of language data and digital cartographic information. And finally, the incorporated database makes it possible to query the data.

One of the main foci of the IRT was to provide the ability to generate dynamic and interactive maps in order to be able to visualize the worldwide distribution of properties of languages. For this reason the program employs the SVG map layer technology. Scalable Vector Graphics (SVG) is an XML markup language for describing two-dimensional vector graphics. There is currently only one SVG map supplied in the IRT, but this map includes much information about naming of areas, placing of cities and rivers, topology, etc. As a compromise between the program's speed and functionality, this SVG map was pre-compiled into a binary format. On the basis of this format it is possible to interact with the user's chosen options in a fast and straightforward way. All additional information on the languages, as needed for the display of the maps, is retrieved and added in real-time as a graphical object to this map. This design guarantees the possibility of fast and lossless zooming into a particular area of interest and of high quality export of the resulting maps.

4. Conclusion and prospects

The IRT makes it possible to integrate the often enormous amounts of data as collected within the field of linguistic typology. Researchers will have the possibility to easily organize their data, and are supplied with various possibilities for analysis. In addition, the IRT is designed to be used by students and non-linguists as well. The intuitively understandable user interface makes information about the world's linguistic diversity available to a large audience.

Especially for educational purposes an interactive atlas with more than 7,000 known languages showing their geographical density, genealogical distribution, or the distribution of endangered languages is conceivable.

Furthermore the used technology of generating interactive maps can be used to visualize the worldwide distribution of phenomena coming from other scientific disciplines not only as a standalone application but also as part of internet based framework using the applet technology.

5. References

Haspelmath, Martin, Matthew S. Dryer, David Gil & Bernard Comrie. (2005). *The World Atlas of Languages Structures.* (Book with interactive CD-ROM). Oxford: Oxford University Press.

Kortmann, Bernd, Edgar W. Schneider, Kate Burridge, Rajend Mesthrie & Clive Upton. (2004). *A Handbook of Varieties of English. A Multimedia Reference Tool.* Berlin: Mouton de Gruyter.

6. Sample maps generated with the IRT

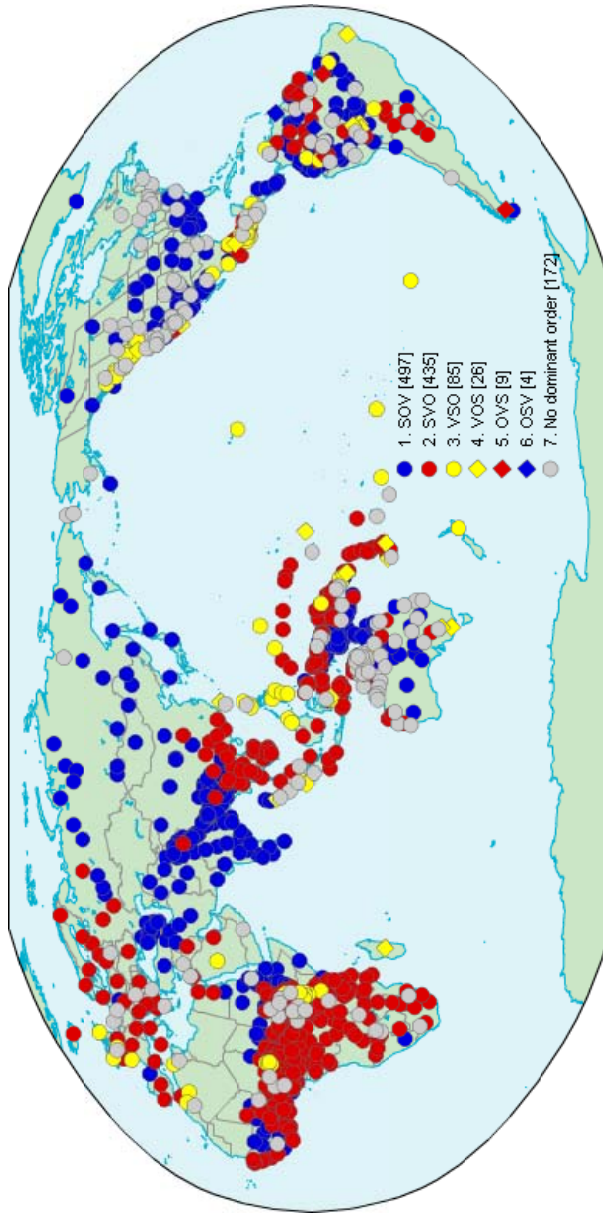


Figure 1 Order of Subject, Verb, and Object (Matthew S. Dryer; 1228 languages)

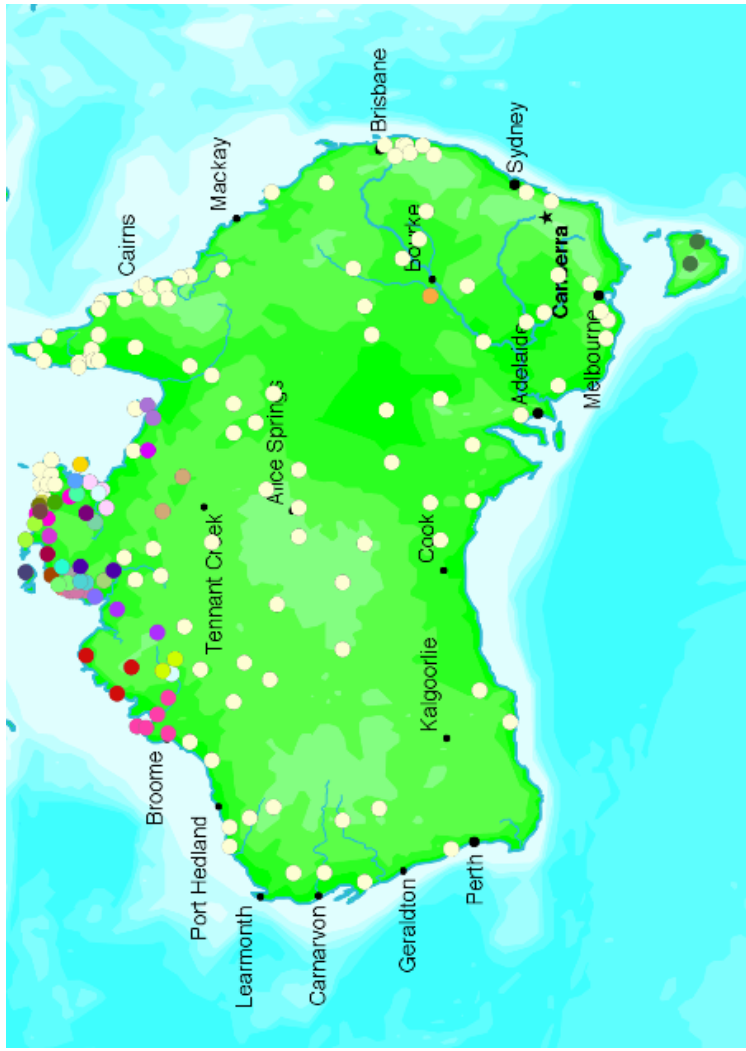


Figure 2: 168 languages spoken in Australia, grouped by genera; shown with topology, major cities, and major rivers

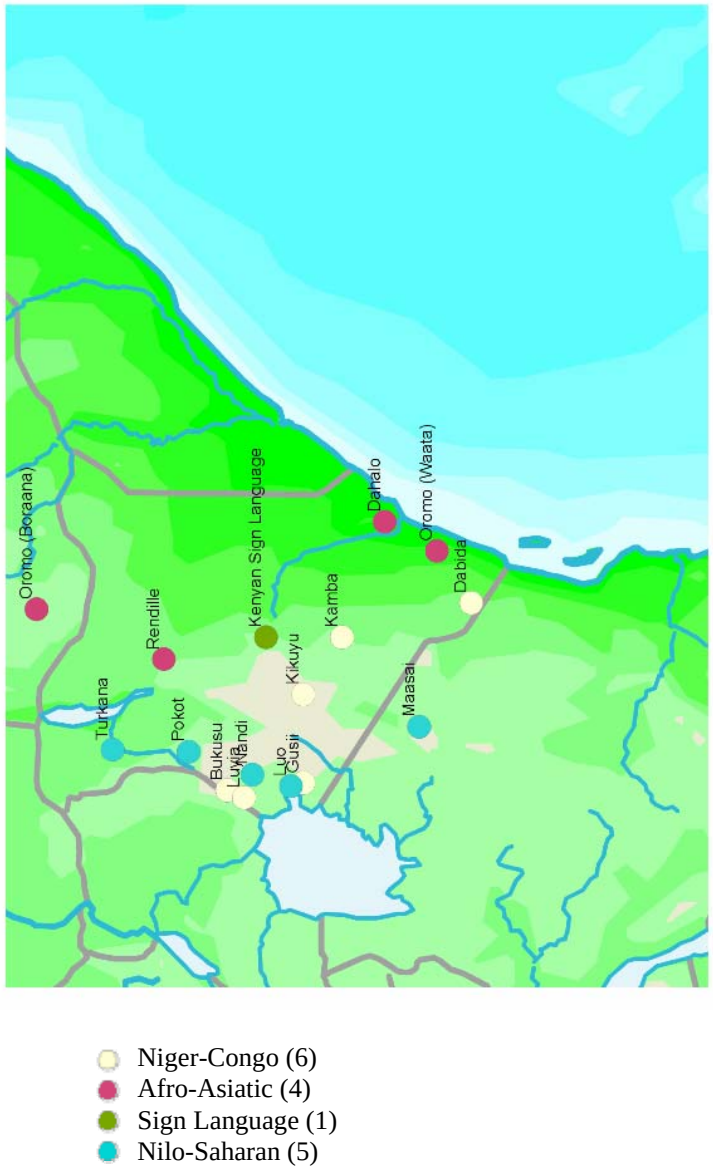


Figure 3: 15 languages spoken in Kenya plus one sign language, grouped by families; shown with their names

Beitrag zur Geschichte des wissenschaftlichen Rechnens

Beitrag zur Geschichte des wissenschaftlichen Rechnens

Aus den Erinnerungen von Prof. Dr. Heinz Billing

Im Jahre 1997 gab Professor Billing, der heute in Garching lebt, seine Zustimmung, unter dem Titel „Die Vergangenheit der Zukunft“ eine private Publikation seiner Lebenserinnerungen in einer begrenzten Auflage von 199 Exemplaren zu drucken[1]. Aus diesem Buch sind hier mit Erlaubnis des Autors und der Herausgeber Friedrich Genser und Johannes Jänike, zwei Berichte nachgedruckt, die den Weg zum Trommelspeicher und zu den Göttinger Rechnern G1, G2 und G3 beschreiben

[1] Die Vergangenheit der Zukunft. Ein Leben zwischen Forschung und Praxis –Heinz Billing–. Hrsg. v. Friedrich Genser u. Johannes Jänike. Düsseldorf: Selbstverlag Friedrich Genser 1997.

In der Luftfahrtforschung (Auszug[2])

Heinz Billing

Anmerkung der Herausgeber

Bis Kriegsende hat Professor Billing in der Aerodynamischen Versuchsanstalt (AVA) in Göttingen an Systemen zur Ortung von Flugzeugen bei Nacht gearbeitet. Die Flugzeuge sollten mit Hilfe von Richtmikrofonen aufgespürt werden.

Ein Reinfall erweist sich später als Erfolg

Eine andere Idee, von der ich mir anfangs viel versprach, erwies sich zunächst als völliger Reinfall. Da sie aber 5 Jahre später den Grundstein für meine Rechenmaschinenentwicklungen legte, möchte ich sie hier erwähnen. Das war noch bevor ich etwas von den neuen Düsentriebwerken gehört hatte. Ich musste also irgendwie mit dem Propellerlärm des eigenen Nachtjägers fertig werden. Nun war bekannt, dass der Propellerschall im Takt des umlaufenden Propellers erzeugt wird. Dreht der Propeller z.B. mit 10 Umdrehungen pro Sekunde, und hat er drei Propellerflügel, so sollte alle 1/30 Sekunden exakt das gleiche Schallfeld abgestrahlt werden. Ein solches

[2] a.a.O. S. 45 – 46

Schallfeld nennt man einen Klang, bestehend aus der Grundfrequenz und allen möglichen Vielfachen dieser Grundfrequenz. Es galt, diesen Klang zu kompensieren. Dazu musste man den Schall laufend aufzeichnen und dann von zwei Abnehmern mit einer gegenseitigen Verzögerung von zum Beispiel 1/30 Sekunde wieder abnehmen. Wenn man den abgenommenen Schall beider Abnehmer voneinander subtrahierte, so müsste man exakt den Propellerklang des eigenen Jägers kompensieren. Alle anderen Klänge mit anderer Grundfrequenz müssten jedoch durchkommen. Zur Verzögerung des aufgenommenen Klanges um genau 1/30 Sekunde bot sich damals gerade ein ganz neuer Weg.

Man hatte in Deutschland das Magnetophon so weit entwickelt, dass die vom Band wieder abgespielte Musik die alten Schellackplatten weit in den Schatten stellte. Ich brauchte daher nur ein endlos umlaufendes Magnetband an einem Geberkopf und zwei identischen Abnehmerköpfen vorbeilaufen lassen, die Zeitverspätung richtig einstellen und mein Klangfilter war fertig. Es funktionierte im Labor mit künstlich erzeugten Klängen hervorragend. Zur großen Enttäuschung brachte es am Flugzeug jedoch fast nichts. Ich konnte mir den Reinfall nur so erklären, dass durch die Verwirbelung um das Flugzeug die strenge Periodizität auf dem Weg vom Propeller zum Mikrofon zerstört war. Pech damals und Glück 5 Jahre später.

Zurück und voran zur G1 bis G3 (Auszug[3])

Heinz Billing

Arbeitsgruppe Numerische Rechenmaschinen

Die Rahmenbedingungen waren nicht schlecht. Formal und organisatorisch gehörte ich wie früher zum Institut für Instrumentenkunde. Sein Leiter, Dr. Beyerle, stellte für mich und meine neu aufzubauende Arbeitsgruppe im Obergeschoss von W 6 reichlich Laborraum zur Verfügung. W 6 hatte früher den größten deutschen Windkanal beherbergt. Dessen Demontage war inzwischen abgeschlossen. Übrig geblieben war eine riesige jetzt leere Halle mit zahlreichen Nebenräumen am Rande. Um mein Labor zu erreichen, musste man bis ins 3. Geschoss steigen, das letzte Stück über eine schmale Eisentreppe, die sich im Innern am Hallenrand emporzog. Da die Möglichkeit bestand, über einen Kran auch größere Geräte bis in mein Labor zu bringen, war ich mit meiner Behausung vollauf zufrieden. Auch eine halbe Sekretärin für Verwaltung und Schreibarbeiten, Fräulein Räuber, und das Mitbenutzungsrecht seiner Werkstatt erhielt ich von Beyerle zugebilligt. Meine Gruppe erhielt den Namen „Arbeitsgruppe Numerische Rechenmaschinen“. Diesen Namen behielt sie dann bis zu meiner Emeritierung, außer dass Gruppe durch Abteilung ersetzt wurde, als beim Umzug nach München Biermann Institutsleiter wurde. Namen und Ränge spielen in der Wissenschaft eine geringere Rolle als sonst im bürgerlichen Leben und so blieb der Name, selbst als ich und meine Abteilung statt

[3] a.a.O. S. 77 – 88

Rechenmaschinen die Entdeckung von Gravitationswellen zum Ziel unserer Arbeit gemacht hatten.

Personalia

Wissenschaftlich war ich an das Institut für Physik gebunden. Dort hatten bei meiner Rückkehr die beiden zuständigen Abteilungsleiter, Biermann und Wirtz, ihre Kompetenzen für oder über mich noch nicht endgültig abgesteckt. Beim ersten Arbeitsgespräch zum personellen Aufbau meiner neuen Arbeitsgruppe erschienen sie noch gemeinsam. Es war Wirtz, der meinen Mitarbeiter Wiese recht brutal herausekelte, indem er ihm ein nicht akzeptables Gehaltsangebot machte. Wiese hatte während meiner Abwesenheit den Fortgang meiner Entwicklungsarbeit wohl mit zu wenig Elan bewerkstelligt. Mich hat dieser Rausschmiss damals menschlich tief betroffen, obwohl er sachlich wohl richtig war. Wiese hat mir diese Zwangstrennung offenbar nicht persönlich angekreidet. Er fand eine andere

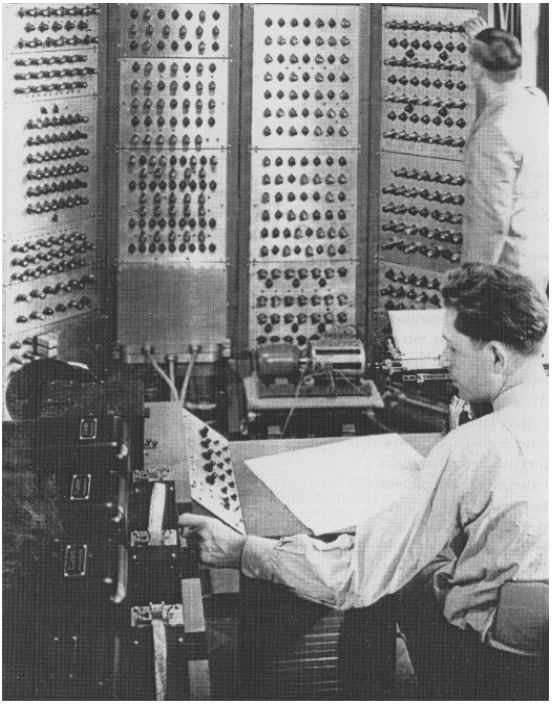


Abb 1: Heinz Billing (im Hintergrund) und ein Mitarbeiter beim Programmieren der G1.

Stellung. Wir blieben in losem brieflichem Kontakt. Später hat sich Wirtz dann mehr und mehr zurückgezogen, da die wissenschaftliche Betreuung meiner Arbeiten nicht nebenher zu machen war. Von Biermann habe ich dann viel gehabt.

So blieb von meinen alten Mitarbeitern nur Herr Schuster, ein erfahrener Techniker, Konstrukteur und Zeichner, der als „Mädchen für alles", bis zu seiner Pensionierung bei mir geblieben ist. Neue Mitarbeiter für meine junge Arbeitsgruppe zu finden war damals nicht schwer. Bei den Wissenschaftlern war vor allem das neue Arbeitsgebiet, die Rechenmaschine, attraktiv und natürlich auch der Name Heisenberg. Außerdem beendeten gerade die ersten Physiker ihr Studium, die nach dem Krieg ihr Studium hatten aufnehmen können. In den Diplomphysikern Oehlmann und Hopmann gewann ich ab Juli 1950 bzw. Januar 1951 zwei tüchtige und engagierte Mitarbeiter. Bei den Elektrotechnikern, die den eigentlichen Zusammenbau der von uns entworfenen Röhrenschaltungen mit den vielen Lötverbindungen vornehmen sollten, ging ich recht sorgfältig vor. Ich wollte sie zu interessierten Mitarbeitern machen, die verstehen sollten, was sie zusammengeschaltet hatten und die auch bei der Erprobung der Schaltungen helfen sollten. Daher annoncierte ich nach Rundfunkmechanikern, die es ja gewöhnt waren, in defekten komplizierten Radioapparaten die Fehler zu erkennen und zu beheben. Zusätzlich prüfte ich sie beim Einstellungsgespräch auf ihre geistige Beweglichkeit. Ich erklärte ihnen dazu das Rechnen im Dualzahlensystem, von dem sie keine Ahnung haben konnten und prüfte anschließend, ob sie es kapiert hatten und zwei kurze Dualzahlen addieren konnten.

Auf diese Weise gewann ich zunächst Carlsberg und später auch Seibt. Besonders Carlsberg wurde mir ein unersetzlicher Mitarbeiter. Zusammen waren wir oft bis spät in der Nacht auf Fehlersuche, wenn die gerade fertig gestellten Schaltungen nicht so taten wie sie sollten.

„Papa" und „Mama"

Schließlich brauchte ich noch einen tüchtigen Mechanikermeister, den ich unbedingt ganz für meine Gruppe allein haben wollte. Meinen bisherigen Meister Baumbach, den ich bei meinem Australienausflug im Institut für Instrumentenkunde hinterlassen hatte, wollte mir Dr. Beyerle nicht wiedergeben. Ich fand und wählte Hans Lindner. Das Finden war nicht schwer. Er wohnte nämlich in meinem Wohnhaus in der Hugo Junkersstraße 7 auf der gleichen Etage wie ich, Wand an Wand mit mir. Er arbeitete damals im Göttinger Filmstudio als Mechaniker. Dieses Studio, in welchem einige bekannte Filme gedreht worden waren, kam damals gerade in die roten

Zahlen. Lindners Arbeitsstelle war bedroht. Da er während des Krieges in der AVA gearbeitet hatte und Baumbach ihn kannte und gut beurteilte, habe ich ihn genommen. Das war gleich zweifach ein guter Griff. Einmal konnte er was, war zuverlässig und tüchtig. Überdies hatte er 3 heranwachsende Kinder und war daher knapp bei Kasse. Meine häufigen Wünsche nach Überstundenarbeit, die im Gegensatz zu den Wissenschaftlern bei den Mechanikern gut honoriert wurde, deckten sich daher mit seinem Interesse. Zweitens aber verstanden sich meine und seine Frau ausgezeichnet und auch unsere Kinder. Für Reiner und Dorit waren die beiden Lindners „Papa und Mama“, da die Begriffe „Vati und Mutti“ ja schon besetzt waren. Wenn wir mal abends ausgingen, brauchten die Kinder bei Alpträumen nur an die Wand ihres Schlafzimmers zu klopfen, um Mamas Hilfe zu holen und bei einigen unserer Kurzreisen ohne Kinder erwies sich Mama ebenfalls als sicherer Hort.

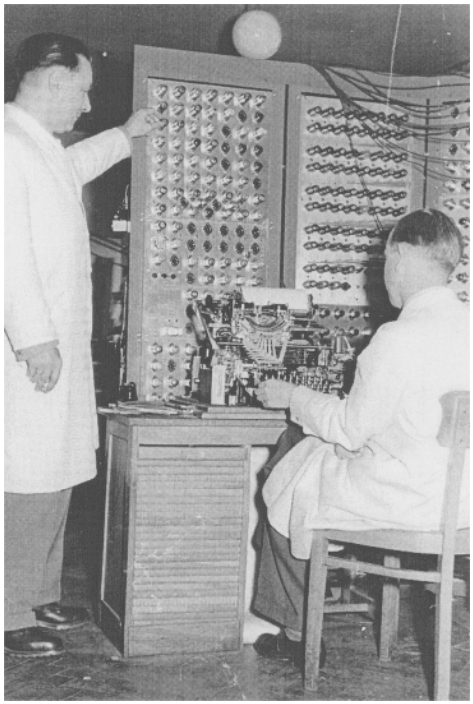


Abb 2: Heinz Billing (stehend) und Mitarbeiter Oehlmann an der umgebauten Schreibmaschine.

Finanzierung mit Hilfe des Marshallplanes

Personell und auch von den Räumen her war also alles bestens geregelt, als ich mit der Arbeit begann. Auch finanziell bestand kein Grund zum Klagen. Hier half der Marshallplan, diese großartige Einrichtung mit der die USA die Wirtschaft in Westeuropa nach dem Krieg wieder angekurbelt hat. Heisenberg gelang es, daraus 200 000 DM zu bekommen. Meine Mitarbeiter erhielten die damals üblichen Löhne oder Gehälter, nicht viel aber ausreichend. Ich selbst empfand mein Gehalt von etwa 1 000 DM als fürstlich. Gut ausgearbeitete Pläne hatte ich mitgebracht. In Biermann und seiner Rechengruppe fand ich mit Arnulf Schlüter und Frau Trefftz sehr anregende Gesprächspartner. Alles bestens für einen guten Start, aber ...Das „aber" kam von den fehlenden elektrischen Gerätschaften, die man unbedingt benötigte und die damals von der deutschen Industrie einfach noch nicht aus neuer Fertigung zu kaufen waren. Unser Glanzstück war noch ein altes Oszilloskop, lichtschwach mit langsamen Vorverstärkern. Die eigentlichen Oszillographenröhren konnte man zwar aus ehemaligem Kriegsgerät erwerben. Sich damit selbst einen brauchbaren Oszillographen zu bauen, kostet Zeit. In diesem Fall half das benachbarte Max-Planck-Institut für Ionosphärenforschung in Lindau. Dort hatte sein Leiter, Dr. Dieminger, die gleiche Not und weniger Geld. Man baute eine kleine Serie aus Kriegsgerät und verkaufte sie zur Aufbesserung des Institutsetats.

Problem Materialbeschaffung

Bei den Verstärkerröhren, die wir ja in großer Zahl benötigten, waren wir völlig auf übrig gebliebenes Kriegsgerät angewiesen. Da gab es eine Organisation namens STEG für „Staatliche Erfassungs-Gesellschaft". Sie sammelte altes Kriegsgerät und alte Lagerbestände. Von ihrem Depot in Neuaubing erwarb ich bereits Anfang Juni rund 1 000 Doppeltrioden, Penthoden und Dioden zum Stückpreis von knapp 4 DM. Auch ausgebaute Röhrensockel - Stück 10 Pfennig - Widerstände und Kondensatoren konnten wir dort billig erhalten. Die Verstärkerröhren waren zwar neu, aber nur für eine mittlere Lebensdauer von 2 000 Stunden konstruiert. Die Widerstände und Kondensatoren hatten zu große Toleranzen und mussten von uns nachgemessen und aussortiert werden. Um die benötigte stabil einregelbare Spannungsversorgung zu bekommen, bauten wir uns aus alten Gleichstrommotoren als Generatoren und einem Drehstrommotor zum Antrieb einen so genannten Leonardsatz zusammen. Die Motoren hatten in der Druckerei der Göttinger Tageszeitung langjährige treue Dienste geleistet. Man stellte wohl von Gleichstrom auf Wechselstrom um. Bei der

Verwendung von Leonardsätzen zur Spannungsversorgung sind wir übrigens geblieben, natürlich mit fabrikneuen Motoren. Sie glichen dank ihrer Schwungmasse kurzzeitige Spannungsschwankungen vom öffentlichen Netz aus. Es wundert mich heute, dass wir trotz all dieser Extraarbeiten mit der eigentlichen Rechenmaschinenentwicklung ganz gut in Schwung gekommen sind und Ende 1950 - also nach einem halben Jahr - hatten mit meiner alten kleinen Magnettrommel als Herzstück schon die dynamischen Register ihre Bewährungsprobe bestanden. Dass sich Biermann ein noch schnelleres Vorankommen gewünscht hätte ist verständlich!

Hoher Besuch

Wie es kam, dass wir dann gleich 2 Maschinen, die Gl und G2, gleichzeitig entwickelten, ist auf den weiteren Seiten meines angefügten Artikels im MPG-Spiegel ausführlich beschrieben. Wie sie und auch ihr Nachfolger G3 gebaut waren und was sie leisteten, liest man da am besten nach. Ich will im Folgenden mehr auf persönliche Ereignisse und Erlebnisse eingehen, wie man sie im Freundeskreis gerne erzählt, ohne dass sie in eine Fachzeitschrift gehören.

Beginnen wir mit dem Besuch durch den damaligen Bundespräsidenten Theodor Heuß im November 51. Die Entwicklung vor allem der G1 war damals so weit fortgeschritten, dass wir schon einiges vorführen konnten. Wir konnten bereits Zahlen eingeben und ausdrucken und auf Kommando addieren. Zur Eingabe und Ausgabe diente eine motorgetriebene Vorkriegsschreibmaschine Mercedes Elektra. Wir hatten sie für unsere Zwecke erheblich umgebaut. Unter der Tastatur angebrachte Relaisanker lösten bei 14 Tasten den Druckvorgang aus für die 10 Ziffern, 2 Vorzeichen , Zwischenräume und Wagenrücklauf. Unter 32 Tasten wurden Kontakte angebracht für die Befehle. Später haben wir als Ein-/Ausgabegerät Fernschreiber gekauft, aber damals waren sie noch nicht zu kriegen. Von dem hohen Besuch erfuhren wir erst kurz vorher. Sie mussten alle die enge Eisentreppe zu uns emporsteigen, da der Fahrstuhl, der bis zum zweiten Stock führte, ab und an stecken blieb. Das wollten wir unserem Bundespräsident nicht zumuten. Heuß war damals sehr beliebt und hoch geachtet. Für mich und meine Mitarbeiter war dieser Besuch ein tolles und bleibendes Erlebnis. Bleibend durch die vielen wohlgeratenen Photographien, die dabei von unserer MPG-Pressestelle gemacht wurden. Ich habe sie gern vor allem an meine Eltern und Schwiegereltern nach Salzwedel geschickt, damit sie ihren Freunden zeigen konnten, was für einen tüchtigen Sohn sie hatten. Heuß, Hahn und Heisenberg, gleich 3 Berühmtheiten zum Vortrag bei mir,

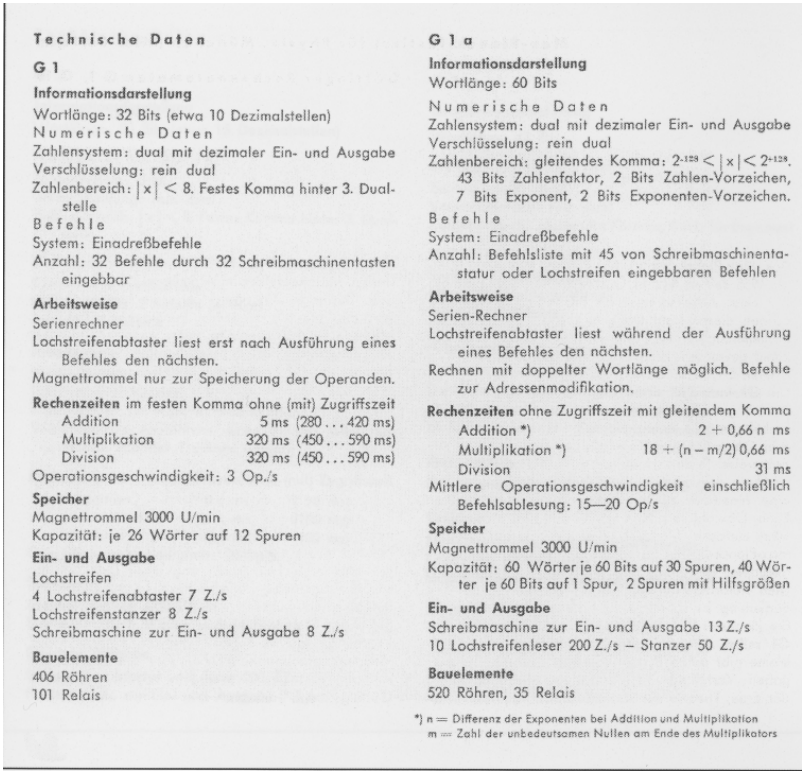
das war doch was. Ich konnte die Addition von 2 Zahlen vorführen und das klappte auch. Als ich jedoch erklärte, was dazu alles notwendig war wegen der Umwandlung der Dezimalzahlen in Dualzahlen und Rückwandlung des Ergebnisses ins Dezimale, da unterbrach mich Heuß bald und brachte das Gespräch schnell auf die zukünftigen Anwendungszwecke dieser neuen Technik. Darüber wurde damals natürlich schon öfter in der Presse spekuliert, doch erstaunte mich sehr seine Kenntnis. Papa Heuß, wie er damals im Volksmund genannt wurde, war ein weiser kluger Mann mit weitem Horizont. Mir hat dieser Besuch in der Tat viel Auftrieb gegeben, obwohl ich kaum besonders ehrgeizig bin. Wenn ein angesehener Präsident einem seiner Bürger ab und an mal lobend auf die Schulter klopft, so ist das wohl nicht der geringste Teil seines Wirkens.

Bekannt wurden unsere Arbeiten durch diesen Besuch aber noch nicht, da er als Privatbesuch der Max-Planck-Gesellschaft galt und die Presse nicht informiert wurde. So schickte jemand telefonisch bestelltes Lagerfett für unsere Magnettrommel an die: „Arbeitsgruppe für Mäh- und Dreschmaschinen in der Erotidynamischen Versuchsanstalt“, doch es kam an.

Premiere der G1

Als bald nach dem Besuch das Multiplikationswerk fertig war, wollten wir natürlich wissen, ob es auch richtig lief. Der Test war die Multiplikation der Zahl 1234567890 mit sich selbst. Dem Leser zur Nachahmung empfohlen. Also setzte sich die Arbeitsgruppe hin und multiplizierte auf dem Papier. 5 Mann produzierten 4 verschiedene Resultate. Jenes, das zweimal vorkam, hatte auch die Maschine hingeklappert. Das überzeugte uns.

Am 4. Juni 1952 war die G1 fertig für die interne Generalprobe. Alle schon gelochten Programme wurden über die inzwischen angeschlossenen Lochstreifenleser eingegeben und richtig ausgeführt. So konnte ich am 6. Juni 52 zusammen mit Hopmann und Oehlmann zur 7. Jahrestagung der GAMM nach Braunschweig fahren und in meinem vorsorglich schon vorher eingereichten Vortrag über die G1 verkünden: Sie ist fertig! Am 7. Juni schließlich konnte als offizielle Premiere die Gl in vollem Betrieb etlichen Teilnehmern der GAMM Tagung auf ihrer Heimreise präsentiert werden. Umgehend war jetzt die Presse bei uns. Die G1 war für einige Wochen Sensation. Die Artikel in der Göttinger Tageszeitung konnten wir vor dem Druck sehen. Beim Spiegel glückte uns das offenbar nicht. Dort mussten wir zu unserem Entsetzen in der Ausgabe vom 18. Juni nachlesen, dass unsere G l noch nicht viel schneller als der ENIAC sei. In der Tat war sie ja gut 100mal langsamer. Später habe ich dann niemals mehr ein Presseinterview gegeben ohne die Versicherung, den Artikel vor dem



Technische Daten

G 1

Informationsdarstellung
Wortlänge: 32 Bits (etwa 10 Dezimalstellen)
Numerische Daten
Zahlensystem: dual mit dezimaler Ein- und Ausgabe
Verschlüsselung: rein dual
Zahlenbereich: $|x| < 8$. Festes Komma hinter 3. Dualstelle
Befehle
System: Einadreßbefehle
Anzahl: 32 Befehle durch 32 Schreibmaschinentasten eingebbar

Arbeitsweise
Serienrechner
Lochstreifenabtaster liest erst nach Ausführung eines Befehles den nächsten.
Magnettrommel nur zur Speicherung der Operanden.

Rechenzeiten im festen Komma ohne (mit) Zugriffszeit

Addition	5 ms (280 . . . 420 ms)
Multiplikation	320 ms (450 . . . 590 ms)
Division	320 ms (450 . . . 590 ms)

Operationsgeschwindigkeit: 3 Op./s

Speicher
Magnettrommel 3000 U/min
Kapazität: je 26 Wörter auf 12 Spuren

Ein- und Ausgabe
Lochstreifen
4 Lochstreifenabtaster 7 Z./s
Lochstreifenstanzer 8 Z./s
Schreibmaschine zur Ein- und Ausgabe 8 Z./s

Bauelemente
406 Röhren
101 Relais

G 1 a

Informationsdarstellung
Wortlänge: 60 Bits
Numerische Daten
Zahlensystem: dual mit dezimaler Ein- und Ausgabe
Verschlüsselung: rein dual
Zahlenbereich: gleitendes Komma: $2^{-128} < |x| < 2^{+128}$. 43 Bits Zahlenfaktor, 2 Bits Zahlen-Vorzeichen, 7 Bits Exponent, 2 Bits Exponenten-Vorzeichen.
Befehle
System: Einadreßbefehle
Anzahl: Befehlsliste mit 45 von Schreibmaschinentastatur oder Lochstreifen eingebbaren Befehlen

Arbeitsweise
Serien-Rechner
Lochstreifenabtaster liest während der Ausführung eines Befehles den nächsten.
Rechnen mit doppelter Wortlänge möglich. Befehle zur Adressenmodifikation.

Rechenzeiten ohne Zugriffszeit mit gleitendem Komma

Addition *)	$2 + 0{,}66\ n$ ms
Multiplikation *)	$18 + (n - m/2)\ 0{,}66$ ms
Division	31 ms

Mittlere Operationsgeschwindigkeit einschließlich Befehlsablesung: 15—20 Op/s

Speicher
Magnettrommel 3000 U/min
Kapazität: 60 Wörter je 60 Bits auf 30 Spuren, 40 Wörter je 60 Bits auf 1 Spur, 2 Spuren mit Hilfsgrößen

Ein- und Ausgabe
Schreibmaschine zur Ein- und Ausgabe 13 Z./s
10 Lochstreifenleser 200 Z./s – Stanzer 50 Z./s

Bauelemente
520 Röhren, 35 Relais

*) n = Differenz der Exponenten bei Addition und Multiplikation
m = Zahl der unbedeutsamen Nullen am Ende des Multiplikators

Druck lesen zu dürfen. Das half aber alles nicht, da über den von mir gebilligten Artikel hinterher vom Chefredakteur eine knallige Überschrift gesetzt wurde, die mich erröten ließ. Ausgerechnet der Münchener Merkur überschrieb seinen Artikel vom 14. Juli 52 mit „Gl Das Göttinger Rechenwunder“. Meine natürlich etwas eifersüchtigen Münchener Kollegen, die mit ihren Entwicklungen noch nicht so weit waren, haben das sicher für üble Angabe gehalten.

Im November 52 wurde die Gl schließlich zum endgültigen Bestimmungsort, quer über einen Hof zum MPI für Physik gebracht. Dazu mussten die vielen Verbindungsleitungen zwischen ihren 4 Gestellen auseinandergelötet werden. Auch der schwere Maschinensatz wurde überführt. Es dauerte einige Wochen, bevor sie wieder lief. Bei den heutigen Supercomputern mit ihrer großen Peripherie schafft man das in wenigen Tagen. Als am 30.6.58 die G1 außer Dienst gestellt wurde, hatte sie im MPI für Physik 5 Jahre und 8 Monate oder 49 500 Stunden gewohnt. Im Schnitt war sie 16,5 Stunden je Tag in Betrieb. Nur 5 % der Zeit ging

durch unvorhergesehene Ausfälle bis zu ihrer Behebung verloren, obwohl nachts kein Wartungstechniker bei der Maschine war.

Morgenröte im Computerland

Die angewandten Mathematiker und die Techniker, die bisher neidvoll auf die für sie unerreichbaren Maschinen in den USA gesehen hatten, begrüßten unsere Gl begeistert. Sie durften bei uns rechnen, sofern Biermann ihre Probleme für wissenschaftlich interessant hielt. Das war eine hohe Hürde, da der Hauptteil der Zeit natürlich für das MPI für Physik reserviert wurde. Doch sehr viele meiner späteren Kollegen aus den Hochschulen haben mir später vorgeschwärmt, dass sie bei der G1 die ersten Kontakte zum Compu-ter gehabt hätten und wie nahe, geradezu persönlich, der Mensch damals mit der Maschine verbunden war. Da sie so langsam war und er zur Überwachung dabei sein musste, konnte er den Fortgang der Rechnung miterleben. Am Anspringen der Lochstreifenleser sah er, welche Subroutine gerade in Betrieb war. Die ausgedruckten Zwischenresultate zeigten ihm, ob alles richtig lief. Die Gl arbeitete immer

Technische Daten

G 2

Informationsdarstellung
Wortlänge: 50 Bits (etwa 15 Dezimalstellen)

Numerische Daten
Zahlensystem: dual
Verschlüsselung: rein dual
Zahlenbereich: $|x| < 8$. Festes Komma hinter 3. Dualstelle

Befehle
System: Einadreßbefehle
Länge: 18 Bits, 2 Befehle je Wort
Anzahl: 32 Befehle

Arbeitsweise
Serien-Rechner
Taktfrequenz: 92 kHz
Indexregister zur Adressenmodifikation
Während des Ausführens eines Befehls wird der nächste von der Trommel gelesen

Rechenzeiten im festen Komma ohne (mit) Zugriffszeit

Addition	0,6 ms	(20 ms)
Multiplikation	80 ms	(100 ms)
Division	80 ms	(100 ms)

Operationsgeschwindigkeit: 25 Op/s

Speicher
Magnettrommel 3000 U/min
Kapazität: 2048 Wörter auf 64 Spuren

Ein- und Ausgabe
Lochstreifenabtaster und -leser 200 Z./s
Fernschreiber zur Ein- und Ausgabe 7 Z./s

G 3

Informationsdarstellung
Wortlänge: 42 Bits

Numerische Daten
Zahlensystem: dual
Verschlüsselung: rein dual
Zahlenbereich: gleitendes Komma, 8 Bits für Exponent

Befehle
System: Einadreßbefehle
Länge: 2 Befehle je Wort
Anzahl: 69 Befehle

Arbeitsweise
Parallel-Rechner
Durch Ferritkernketten gesteuerte Mikrobefehle
6 Indexregister zur Adressenmodifikation
16 Kellerregister zur Zwischenspeicherung

Rechenzeiten:
Operationsgeschwindigkeit etwa 5000 Op/s

Speicher
Ferritkernspeicher mit Ferritwählkernen
Kapazität: 4096 Wörter
Magnettrommel und Magnetbandspeicher vorgesehen

nur für einen Benutzer. Bei den späteren Rechenzentren mit ihrem Vielbenutzerbetrieb war das alles viel unpersönlicher.

Die Kollegen von der reinen Mathematik oder auch der Theoretischen Physik sahen das alles viel skeptischer. Im Herbst 1952 hielt Biermann einen Vortrag im Physikalischen Kolloquium der Universität Göttingen über die G1, die G2 und ihre Einsatzmöglichkeiten. In der Diskussion meinte Prof. Becker vom Institut für Theoretische Physik: „Das ist ja sehr schön, was sie da über ihre Rechner erzählt haben. Aber steckt da nicht auch die Gefahr drin, dass man ein Problem einfach platt walzt, das man mit seinen grauen Zellen, einem Blatt Papier und einem Bleistift viel besser, eleganter und allgemeingültiger lösen kann?“ Biermanns Antwort trifft wohl ins Schwarze: „Da haben Sie gewiss recht. Aber stellen Sie sich vor, welche Probleme Sie lösen können mit Ihren grauen Zellen, dem Papier und dem Bleistift und dann noch dazu einem solchen Rechner!“

Kooperationspartner Konrad Zuse

Eng und unbelastet, waren unsere Beziehungen zu den Kollegen um Piloty und Dreyer in München und Darmstadt, die selbst Rechenmaschinen – die PERM in München bzw. DERA in Darmstadt – entwickelten. Wir besuchten uns häufig oder trafen uns auf kleineren Tagungen und berichteten offen über unsere Erfahrungen und Pläne. Aus Gründen der Konkurrenz habe ich in diesem engen Kreis wohl nie eine Information zurückgehalten. Zuse gehörte nicht ganz zu diesem engen Kreis, da er Industrieller mit einer eigenen Firma war und wirtschaftliche Gesichtspunkte bei ihm eine größere Rolle spielten.

Zuse hatte ich, wie früher berichtet, bereits 1947 bei der Befragung durch die Engländer kennen gelernt. Auch 1948 auf der GAMM-Tagung haben wir jeweils unsere Vorträge gehalten. Ich über meine geplante „Numerische Rechenmaschine mit Magnetophonspeicher“, er über „Symbolisches Rechnen“, ein Teilgebiet seines Plankalküls. Richtig zusammengekommen sind wir aber erst nach 1950. Zuse war bereits 1949 nach Hünfeld gezogen und hatte in primitiven Behausungen dieses kleinen hessischen Dorfes mit dem Aufbau seiner Firma begonnen. Jetzt hatten wir uns gegenseitig etwas zu sagen. Zuse baute noch Relaismaschinen, damals die Z 5 für die Firma Leitz. Mit seinen Erfahrungen im Umgang mit Relais hat er uns bei der G1 durch Rat und einmal auch durch Tat geholfen, als er uns aus seinem Fundus eine dringend benötigte Relaisart überließ. Wir hingegen hatten bei den mit Verstärkerröhren arbeitenden elektronischen Rechenmaschinen die Nase vorn und es war Zuse schon damals klar, dass seine Relaistechnik sehr bald der Vergangenheit angehören würde. Um ihm

Abb 3: Heinz Billing und Conrad Zuse, 1987

beim Einstieg in die für ihn neue Technik zu helfen, wurde ein regelrechter Vertrag zwischen seiner Firma und der Max-Planck-Gesellschaft geschlossen. Wir legten ihm alle Schaltungen mit Dimensionierungen offen, überließen eine Magnettrommel und besuchten ihn und seine Entwicklungsingenieure so oft es erwünscht wurde. Er musste dafür zwar zahlen, aber wohl nicht allzu viel. Schließlich war sogar geplant, dass er unsere Gla nachbauen sollte. Den Vertragsentwurf habe ich noch unterschriftsfertig in meinen Akten gefunden. Doch dazu ist es glücklicherweise nie gekommen. Das wäre nicht gut gewesen, da unsere Entwicklung der Gla sich arg lange hinzog. Für Zuses Ablehnung dürfte ausschlaggebend gewesen sein, dass die Gla noch von Lochbändern statt vom Speicher gesteuert werden sollte. Nach Frommes Plan einer „Minima“ entstand sein erster elektronischer Rechner Z 22, ein von der Magnettrommel gesteuerter Rechner, intelligent in der Befehlsabwicklung und relativ klein im Aufwand. Vergleichbar mit unserer G2 in der Leistung, jedoch im Ganzen sicherlich besser. Natürlich! Schwächen unseres schon 4 Jahre alten Konzeptes waren bekannt. Wir hätten die G2 auch niemals zum Nachbau angeboten. Mein Verhältnis zu Zuse blieb daher freundschaftlich und unbelastet. 1954 verkaufte er mir sogar einen VW Käfer, der als Firmenwagen schon 2 Jahre gelaufen und wohl steuerlich abgeschrieben

war. Bei mir ist der Käfer, genannt „Egon“ noch 10 Jahre gelaufen. Unsere unbeschwerten Sommerreisen, zunächst nach Scharbeutz und später mit Zelt nach Jugoslawien oder Italien verdanken wir der erstaunlichen Stabilität unseres „Egon“. Als er dann nach 12 Jahren schließlich seine ersten Zähne verlor, Getriebezähne, geschah dies am Ende einer langen Italienreise über schreckliche Bergstraßen erst ganz kurz vor München, so dass wir den Rest der Ferienreise bequem und billig per Taxi bewältigen konnten.

Zuses Z 22 wurde 1957 fertig, später als er erhofft, aber gerade noch rechtzeitig, als man begann, die ersten deutschen Hochschulen mit Rechenanlagen zu versorgen. Ich saß damals schon in der Kommission für Rechenanlagen der Deutschen Forschungsgemeinschaft. Als man dort beschloss, durch die Beschaffung von deutschen Rechenanlagen entsprechende Entwicklungsaktivitäten der deutschen Industrie zu fördern, votierte ich dafür, je 3 Anlagen von Siemens, SEL und Zuse zu bestellen. Zuse war übrigens nicht voll befriedigt. Da die Maschinen von SEL und von Siemens je über eine Million kosteten und die Z 22 nur 2/5 davon, hätte er lieber gehabt, wenn jede der 3 Firmen mit gleichen Geldbeträgen bedacht worden wäre. Die Firma Zuse war damals schon in finanziellen Schwierigkeiten und wurde 1964 von Siemens übernommen. Zuse kam finanziell leidlich davon und konnte sich jetzt als Privatmann seinem Hobby widmen. Das war neben der Informatik auch die Malerei. Auch darin war er gut. Zwei seiner Ölgemälde zieren seit vielen Jahren unsere Wohnung. Noch erfreulicher für mich waren seine Einladungen zu seinen runden Geburtstagen. Alle 5 Jahre lud er uns alte Kollegen aus der Entwicklungszeit, die Pioniere wie er es nannte, zu sich ein. Auch sonst kümmerte er sich um die Historie der Rechnerentwicklung. Anfänglich hatte man von ihm in den USA kaum Notiz genommen, doch jetzt hatte man auch dort seine Entwicklung während der Kriegszeit als gleichzeitig und gleichrangig mit Aiken anerkannt, der in Boston seine Relaisrechner gebaut hatte. Nun wurde Zuse auch von der deutschen Öffentlichkeit als der große Erfinder und Pionier der Informatik in Besitz genommen. Ob die vielen damit verbundenen Ehrungen ihm reine Freude gemacht haben, weiß ich nicht. Seiner Frau gewiss. Sie zeigte gern mit großem Stolz die vielen Orden und Ehrendiplome, die an der Wand ihres Wohnzimmers aufgehängt waren. Doch Frauen sind oft ehrgeiziger für ihre Männer als diese selbst.

EDV Pannen-Management

Man hat mich häufig gefragt, wie es möglich gewesen ist, bei der begrenzten Lebensdauer der Röhren von im Schnitt 2 000 Stunden einen

Rechner mit 500 Röhren in Betrieb zu halten, da die Lebensdauer völlig statistisch streute. Das bedingte ja alle 4 Stunden eine Panne. Die Hälfte dieser Pannen ließ sich vermeiden durch die vorsorgliche Wartung am Sonnabendvormittag. Erst wurde die Heizspannung aller Röhren um 10% gesenkt, dabei fielen diejenigen auf, die taub wurden. Das war nach 3 Jahren gut die Hälfte aller Röhren. Die Röhren hielten in unseren Schaltungen also länger als garantiert. Dann kamen die Gleichspannungen dran. Auch die wurden um 10% gesenkt, erst die negativen, dann die positiven dann beide Polaritäten. Dabei fielen gealterte Widerstände vor allem bei den zahlreichen Flip/Flops auf. Ausfälle, die trotz vorsorglicher Wartung auftraten, mussten möglichst schnell lokalisiert und behoben werden. Da half die Intelligenz der Wartungsingenieure, die ich, wie oben erwähnt, nach Intelligenz und weniger nach Vorbildung ausgesucht hatte. Zwei von ihnen, Carlsberg und Gundlach, waren Rundfunkmechaniker, einer, Heller, Fachschulingenieur. Das waren die guten. Die Namen der weniger guten, die sich nicht halten konnten, habe ich vergessen. Die schlimmsten Pannen kamen von sporadischen Fehlern, also Wackelkontakten. Sie zerstören mal kurz einen ganzen Rechengang und beim Versuch der Fehlerlokalisierung ist alles bestens. Auch heute noch sind Wackelkontakte der Schrecken der Benutzer und Servicetechniker. Meist kamen sie von den Röhrensockeln. Besonders schlimm hatte diese Störung unsere Kollegen in München bei der PERM getroffen. Denen waren durch die Lüftung Säuredämpfe ins Labor gekommen und hatten die Sockelkontakte angegriffen. Es half nichts, sie mussten in mehrmonatiger Arbeit alle Sockel auslöten und ersetzen. Bei der G3 haben wir übrigens nur Sockel mit vergoldeten Kontakten und Röhren langer Lebensdauer verwendet. Da hatten wir auch nur noch wenige Pannen pro Woche. Nachts wurde übrigens nicht gewartet. Da mussten die Benutzer bei Pannen nach Hause gehen obwohl versierte Nutzer sich auch dann noch durch eigene Reparaturen – meist Austausch von verdächtigen Röhren – zu helfen suchten.

Heinz Gundlach

Mein Rundfunktechniker Heinz Gundlach, dem die Wartung der G1 oblag, wurde übrigens das Glanzstück unter meinen vielen ausgezeichneten Mitarbeitern. Zunächst nützte er die störungsfreien Zeiten der G1, um in Abendkursen sein Abitur nachzuholen. Dann studierte er Physik bis zum Diplom. Nach unserem Umzug nach München ging die Wartung der G2 und später G3 auf Carlsberg und Heller über. Gundlach beteiligte sich dann an unseren Grundlagenuntersuchungen über dünne Schichten mit so guten

Veröffentlichungen, dass er in Clausthal promovieren konnte. Dann baute er bei mir eine kleine Arbeitsgruppe auf, welche die Anwendung der Supraleitung für den Bau von Rechenanlagen untersuchen sollte. Solche Untersuchungen liefen mit großem Einsatz in den USA bei IBM, wurden jedoch später aus wirtschaftlichen Gründen eingestellt. Als Resultat blieben schöne wissenschaftliche Erkenntnisse. Ich konnte Gundlach einen längeren Forschungsaufenthalt beim berühmten IBM Labor in Yorktown Heights vermitteln. Schließlich wurde ihm dank seiner guten Arbeiten von der Universität Kassel die Honorar-Professur angeboten. Weiter habe ich es auf der akademischen Leiter auch nicht gebracht. Während dieser ganzen Zeit blieb er bis zu meiner Emeritierung Mitglied meiner Abteilung. Danach ging er nach Grenoble zur Forschungsstelle IRAM, wo Radioteleskope für das Submillimetergebiet entwickelt werden. Das Herz des jetzt in Spanien installierten Teleskops, nämlich der Tieftemperatur-Detektor im Fokus, kommt aus dem von Gundlach geleiteten Sensorlabor. Jetzt besucht er mich noch alle Jahre, da sein Herz in München bei seiner alten Abteilung für „Numerische Rechenmaschinen“ geblieben ist.

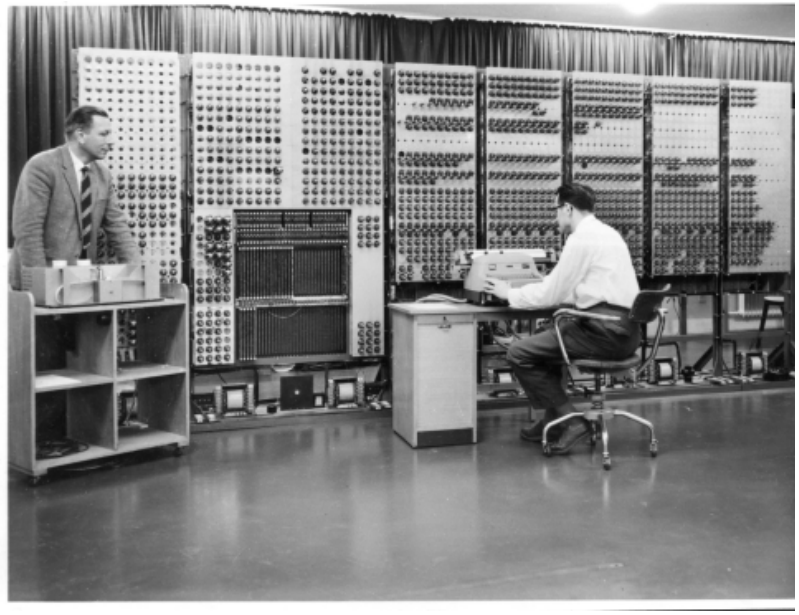


Abb 4: Heinz Billing(stehend) vor der G3.

Der dritte im Bunde der Wartungsingenieure, Hochschulingenieur Heller, war auch nicht schlecht. Er betreute unter der Leitung von Oehlmann die G2 und später zusammen mit Carlsberg die G3. Als wir die G2 dem Institut für Theoretische Physik der Universität München schenkten, konnten wir ihr keinen „Heller“ dazugeben. Das ging nicht gut. Man hat dort noch 2 Jahre an ihr herumgebastelt. Ohne den erfahrenen Wartungsingenieur ist man mit den unvermeidlichen Pannen nicht zurechtgekommen. Sie wurde dann ohne mein Wissen verschrottet, als das Deutsche Museum sie als Ausstellungsstück übernehmen wollte. Schade!

Anschriften der Autoren

Hans-Jörg Bibiko
Max-Planck-Institut für evolutionäre Anthropologie
Abteilung Linguistik,
Deutscher Platz 6, 04103 Leipzig
E-Mail:bibiko@eva.mpg.de

Prof. Dr. Bernhard Comrie
Max-Planck-Institut für evolutionäre Anthropologie
Abteilung Linguistik,
Deutscher Platz 6, 04103 Leipzig
E-Mail:comrie@eva.mpg.de

Prof. Dr. Martin Dreyer
Linguistics Department
University of Buffalo
609 Baldy Hall, Buffalo, NY 14260
E-Mail:dryer@buffalo.edu

Dr. David Gil
Max-Planck-Institut für evolutionäre Anthropologie
Abteilung Linguistik,
Deutscher Platz 6, 04103 Leipzig
E-Mail:gil@eva.mpg.de

Prof. Dr. Martin Haspelmath
Max-Planck-Institut für evolutionäre Anthropologie
Abteilung Linguistik,
Deutscher Platz 6, 04103 Leipzig
E-Mail:haspelmt@eva.mpg.de

Dr. Patrick Jöckel
Max-Planck-Institut für Chemie,
Postfach 3060, 55020 Mainz
E-Mail:joeckel@mpch-mainz.mpg.de

Prof. Dr. Michael Joswig
Technische Universität Darmstadt,
Mathematisches Institut, MA 6-1
Schlossgartenstr. 7, 64289 Darmstadt
E-Mail:joswig@mathematik.tu-darmstadt.de

Ewgenij Gawrilow
Technische Universität Darmstadt,
Mathematisches Institut, MA 6-1
Schlossgartenstr. 7, 64289 Darmstadt
E-Mail:joswig@mathematik.tu-darmstadt.de

Dr. Rolf Sander
Max-Planck-Institut für Chemie,
Postfach 3060, 55020 Mainz
E-Mail:sander@mpch-mainz.mpg.de

Christoph Wierling
Max-Planck-Institut für molekulare Genetik
Ihnestr. 73, 14195 Berlin
E-Mail:wierling@molgen.mpg.de

In der Reihe GWDG-Berichte sind zuletzt erschienen:

Nr. 40 *Plesser, Theo und Peter Wittenburg* (Hrsg.):
Forschung und wissenschaftliches Rechnen – Beiträge zum Heinz-Billing-Preis 1994
1995

Nr. 41 *Brinkmeier, Fritz* (Hrsg.):
Rechner, Netze, Spezialisten. Vom Maschinenzentrum zum Kompetenzzentrum – Vorträge des Kolloquiums zum 25jährigen Bestehen der GWDG
1996

Nr. 42 *Plesser, Theo und Peter Wittenburg* (Hrsg.):
Forschung und wissenschaftliches Rechnen – Beiträge zum Heinz-Billing-Preis 1995
1996

Nr. 43 *Wall, Dieter* (Hrsg.):
Kostenrechnung im wissenschaftlichen Rechenzentrum – Das Göttinger Modell
1996

Nr. 44 *Plesser, Theo und Peter Wittenburg* (Hrsg.):
Forschung und wissenschaftliches Rechnen – Beiträge zum Heinz-Billing-Preis 1996
1997

Nr. 45 *Koke, Hartmut und Engelbert Ziegler* (Hrsg.):
13. DV-Treffen der Max-Planck-Institute – 21.-22. November 1996 in Göttingen
1997

Nr. 46 **Jahresberichte 1994 bis 1996**
1997

Nr. 47 *Heuer, Konrad, Eberhard Mönkeberg und Ulrich Schwardmann:*
Server-Betrieb mit Standard-PC-Hardware unter freien UNIX-Betriebssystemen
1998

Nr. 48 *Haan, Oswald* (Hrsg.):
Göttinger Informatik Kolloquium – Vorträge aus den Jahren 1996/97
1998

Nr. 49 *Koke, Hartmut und Engelbert Ziegler* (Hrsg.):
IT-Infrastruktur im wissenschaftlichen Umfeld – 14. DV-Treffen der Max-Planck-Institute, 20.-21. November 1997 in Göttingen
1998

Nr. 50 *Gerling, Rainer W.* (Hrsg.):
Datenschutz und neue Medien – Datenschutzschulung am 25./26. Mai 1998
1998

Nr. 51 *Plesser, Theo und Peter Wittenburg* (Hrsg.):
Forschung und wissenschaftliches Rechnen – Beiträge zum Heinz-Billing-Preis 1997
1998

Nr. 52 *Heinzel, Stefan und Theo Plesser* (Hrsg.):
Forschung und wissenschaftliches Rechnen – Beiträge zum Heinz-Billing-Preis 1998
1999

Nr. 53 *Kaspar, Friedbert und Hans-Ulrich Zimmermann* (Hrsg.):
Internet- und Intranet-Technologien in der wissenschaftlichen Datenverarbeitung – 15. DV-Treffen der Max-Planck-Institute, 18. - 20. November 1998 in Göttingen
1999

Nr. 54 *Plesser, Theo und Helmut Hayd* (Hrsg.):
Forschung und wissenschaftliches Rechnen – Beiträge zum Heinz-Billing-Preis 1999
2000

Nr. 55 *Kaspar, Friedbert und Hans-Ulrich Zimmermann* (Hrsg.):
Neue Technologien zur Nutzung von Netzdiensten – 16. DV-Treffen der Max-Planck-Institute, 17. - 19. November 1999 in Göttingen
2000

Nr. 56 *Plesser, Theo und Helmut Hayd* (Hrsg.):
Forschung und wissenschaftliches Rechnen – Beiträge zum Heinz-Billing-Preis 2000
2001

Nr. 57 *Hayd, Helmut und Rainer Kleinrensing (Hrsg.)*
17. und 18. DV-Treffen der Max-Planck-Institute,
22. - 24. November 2000, 21. – 23. November 2001 in Göttingen
2002

Nr. 58 Macho, *Volker und Theo Plesser* (Hrsg.):
Forschung und wissenschaftliches Rechnen – Beiträge zum Heinz-Billing-Preis 2001
2003

Nr. 59 *Suchodoletz, Dirk von*:
Effizienter Betrieb großer Rechnerpools – Implementierung am Beispiel des Studierendennetzes an der Universität Göttingen
2003

Nr. 60 *Haan, Oswald (Hrsg.)*:
Erfahrungen mit den IBM-Parallelrechnersystemen RS/6000 SP und pSeries690
2003

Nr. 61 *Rieger, Sebastian*:
Streaming-Media und Multicasting in drahtlosen Netzwerken – Untersuchung von Realisierungs- und Anwendungsmöglichkeiten
2003

Nr. 62 *Kremer, Kurt und Volker* Macho (Hrsg.):
Forschung und wissenschaftliches Rechnen – Beiträge zum Heinz-Billing-Preis 2002
2003

Nr. 63 *Kremer, Kurt und Volker* Macho (Hrsg.):
Forschung und wissenschaftliches Rechnen – Beiträge zum Heinz-Billing-Preis 2003
2004

Nr. 64 *Koke, Hartmut* (Hrsg.):
GÖ* - Integriertes Informationsmanagement im heterogenen eScience-Umfeld: GÖ*-Vorantrag für die DFG-Förderinitiative „Leistungszentren für Forschungsinformation“
2004

Nr. 65 *Koke, Hartmut* (Hrsg.):
GÖ* - Integriertes Informationsmanagement im heterogenen eScience-Umfeld: GÖ*-Hauptantrag für die DFG-Förderinitiative „Leistungszentren für Forschungsinformation“
2004

Nr. 66 *Bussmann, Dietmar und Andreas Oberreuter* (Hrsg.):
19. und 20. DV-Treffen der Max-Planck-Institute
20.-22. November 2002
19.-21. November 2003 in Göttingen
2004

Nr. 67 *Gartmann, Christoph und Jochen Jähnke* (Hrsg.):
21. DV-Treffen der Max-Planck-Institute
17.-19. November 2004 in Göttingen
2005

Nr. 68 *Kremer, Kurt und Volker* Macho (Hrsg.):
Forschung und wissenschaftliches Rechnen – Beiträge zum Heinz-Billing-Preis 2004
2004

Nr. 69 *Kremer, Kurt und Volker* Macho (Hrsg.):
Forschung und wissenschaftliches Rechnen – Beiträge zum Heinz-Billing-Preis 2005
2005

Nähere Informationen finden Sie im Internet unter
`http://www.gwdg.de/forschung/publikationen/gwdg-berichte/index.html`