

Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin
Heilbronner Str. 10, D-1000 Berlin 31



Jahresbericht 1990



Herausgegeben vom
Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin
Heilbronner Str. 10
1000 Berlin 31
Verantwortlich: Dr. Klaus André
Umschlagsatz und Druck: Rabe KG Buch-und Offsetdruck Berlin

1. Vorbemerkung.....	1
2. Forschung und Entwicklung	2
2.1 Abteilungen	2
Numerik.....	2
Symbolik.....	2
Numerische Software-Entwicklung.....	2
Software-Information.....	3
Graphik.....	3
Systolik.....	3
Verteilte Systeme.....	3
2.2 Grundlagenprojekte	3
Adaptive Multilevel-Diskretisierung zeitabhängiger partieller Differentialgleichungen.....	3
Adaptive FE-Verfahren zur Lösung freier Randwertprobleme	5
Unvollständige LU-Zerlegung auf lokal strukturierten Netzen	5
Software-Implementierung adaptiver Multilevel FE-Methoden.....	6
Multilevel-Methoden in der Computergraphik.....	7
Iterationsverfahren für große lineare unsymmetrische Gleichungssysteme	7
Newton-Techniken für sehr große nichtlineare Systeme	10
Gemischt symbolisch-numerische Lösung von nichtlinearen Gleichungssystemen mit Symmetrien	12
Symbolische Erstellung von erweiterten Systemen für Verzweigungspunkte höherer Kodimension.....	14
Symbolische Lösung polynomialer Gleichungssysteme	14
Weiterentwicklung von REDUCE	15
Symbolisch-numerische Behandlung von Problemen der optimalen Steuerung	16
Extrapolationsverfahren für gewöhnliche Differentialgleichungen und differentiell-algebraische Systeme	16
Diskrete Galerkin-Methoden zur Lösung abzählbarer Systeme von gewöhnlichen Differentialgleichungen.....	18

	Entwicklung eines Simulationspaketes für makromolekulare Reaktionen einschließlich chemischer Reaktionskinetik.....	19
2.3	Anwendungsprojekte.....	19
	Hyperthermie-Planung	19
	Numerische Simulation von epidemiologischen AIDS-Modellen.....	20
	Effiziente Berechnung der Durchbruchsspannung bei Hochleistungsbauelementen.....	22
	Entwicklung effektiver Algorithmen zur numerischen Simulation von Verbrennungsproblemen.....	25
	Diskrete Galerkin-Methoden in der Anwendung.....	25
	Symbolische Modellierung chemischer Reaktionssysteme	27
	Support für symbolisches Rechnen im Hochleistungsbereich.....	27
	Implementierung paralleler adaptiver Algorithmen mit objektorientierten Sprachen.....	28
	Installation einer Transputer-basierten Entwicklungsumgebung	29
	Parallelisierung einer Anwendung.....	30
	Graphik-Software.....	30
	AGIL (The Adaptable Graphical Interface Layer).....	30
	Visualisierung von Strömungsdaten.....	32
	Elektronische Softwarebibliothek eLib.....	32
	Vertrieb von REDUCE und PSL.....	34
	Europäische Normung von LISP.....	34
	Museumsdokumentation	35
	BERGATE.....	36
	BERMMD (Multimedia-Dokumente im ISDN-B)	37
	Anwendungen der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM).....	38
	Scientific Workstations (SWS).....	38
3.	Anlagenbetrieb	41
	3.1 Übersicht.....	41
	3.2 Arbeiten im Bereich Anlagenbetrieb.....	43

3.2.1	Rechnernetze	43
3.2.2	Anwendersoftware und Benutzerberatung.....	44
3.2.3	Ausbauplanung.....	45
3.3	Nutzung der Vektorrechner.....	47
3.3.1	Norddeutscher Vektorrechnerverbund (NVV)	47
3.3.2	Berliner Nutzung im NVV.....	48
4.	Wissenschaftlich-Technische Dienste	51
4.1	Bibliothek	51
4.2	Reportwesen.....	51
4.3	Elektronik-Labor.....	51
5.	Sonstige Aktivitäten des ZIB.....	54
5.1	Preprints.....	54
5.2	Technical Reports	60
5.3	Sonstige Reports	63
5.4	Veröffentlichungen.....	64
5.5	Vorträge.....	65
5.6	Verfügbare Produkte.....	72
5.7	Gastvorträge im ZIB.....	75
5.8	Arbeitskreise, Kurse, Tagungen im ZIB	77
5.9	Gäste.....	77
5.10	Zeitschrift IMPACT.....	78
6.	Organisatorisches	80
6.1	Organe.....	80
6.2	Wissenschaftlicher Beirat	80
6.3	Personalrat	81
6.4	Satzung.....	81
6.5	ZIB-Fellows	81
6.6	Mitgliedschaften.....	82
6.7	Wirtschaftliche Situation	82

6.8	Personal	83
6.9	Organisationsplan	84

1. Vorbemerkung

Das Berichtsjahr 1990 war das *vierte* Jahr, in dem das Konrad-Zuse-Zentrum mit neuer Zielsetzung und Struktur tätig war. Nach drei Jahren Anlaufzeit hat das vergangene Jahr nun weithin sichtbar gezeigt, daß das Ende 1986 beschlossene Konzept des ZIB nicht nur schlüssig, sondern auch tragfähig ist. Anläßlich eines Festkolloquiums an der TUB zum 80. Geburtstag von Konrad Zuse konnte in dem Festvortrag "Zuses Werk weiterdenken" das wissenschaftliche Anliegen des *Scientific Computing* einer breiten Öffentlichkeit nahegebracht werden. Im Bereich Forschung und Entwicklung sind eine Reihe glänzender wissenschaftlicher Ergebnisse erzielt worden (vgl. Kap. 2.2). Die Kooperation mit Medizin, Natur- und Ingenieurwissenschaften nimmt allmählich die gewünschte Gestalt an (vgl. Kap. 2.3). Der Anlagenbetrieb hat seinen über die Jahre gewohnten Qualitätsstandard im Gebiet Supercomputing gehalten. Die Erfolge des ZIB sind ein Resultat sowohl der Bemühungen vieler einzelner Mitarbeiter als auch der konstruktiven Zusammenarbeit sämtlicher Gruppen des Hauses unter Einschluß des Personalrates.

Leider ist es auch in diesem Jahr wiederum nicht gelungen, die der Technischen Universität Berlin zugeordnete Stelle des Vizepräsidenten des ZIB zu besetzen. Hier richteten sich die Hoffnungen auf einen glücklichen Abschluß der Ende 1989 begonnenen Aktivitäten.

Dreh- und Angelpunkt für die Perspektive der kommenden Jahre ist die Klärung der Frage eines neuen Gebäudes, das spätestens im Jahr 1994 bezugsfertig sein muß. Obwohl die Finanzierung eines Neubaus bereits seit Anfang 1989 steht, hat sich der frühere Senat in dieser Frage als nicht handlungsfähig erwiesen: das vorgesehene Grundstück wurde "Besetzern" überlassen - ohne geeigneten Ersatz für das ZIB! Die zweijährige Verzögerung der Entscheidung in dieser für das ZIB vitalen Frage hat die Zeit extrem knapp werden lassen. Vielleicht ergibt sich ja im Zuge des Zusammenwachsens der Teile Deutschlands - ungeachtet aller Haushaltsrestriktionen - neuer Handlungsspielraum für die politischen Entscheidungsträger des neuen Senats.

Berlin, im Januar 1991



Prof. Dr. Peter Deufhard

Präsident

2. Forschung und Entwicklung

Ermutigt durch die stürmische Entwicklung von Rechnern und Rechenmethoden in den letzten beiden Jahrzehnten, haben sich die mathematischen Modelle zur Beschreibung von physikalischen, chemischen, technischen oder biologischen Phänomenen und Prozessen derart verfeinert, daß sie heute für eine realistische Computersimulation prinzipiell taugen. Methoden zur tatsächlichen Simulation oder Optimierung dieser mathematischen Modelle werden in dem Gebiet *Scientific Computing* entwickelt. Dieses Gebiet im interdisziplinären Spannungsfeld von Mathematik, Ingenieurmathematik, Informatik und Naturwissenschaften ist erst in jüngster Zeit zusammengewachsen. Ziel des Scientific Computing am ZIB ist es, durch die Entwicklung innovativer Methoden die Komplexitätsgrenze lösbarer Probleme hinauszuschieben. Damit sollen auch bisher verschlossene Bereiche der Natur- und Ingenieurwissenschaften einer rechnerischen Beherrschung geöffnet werden. Es ist absehbar, daß *Scientific Computing* die Wettbewerbsfähigkeit in zahlreichen Zweigen der Industrie (Chemie, Elektronik, Robotik, Fahrzeugbau, Luft- und Raumfahrt etc.) beeinflussen wird sowie eine entscheidende Rolle bei wichtigen gesellschaftlichen Fragen (z. B. globale Klimamodelle, Krebstherapie, umweltverträgliche Schonung von Primärenergie) spielen wird.

2.1 Abteilungen

Der Bereich "Forschung und Entwicklung" gliedert sich in Abteilungen, in denen verschiedene Themenkreise des Scientific Computing schwerpunktmäßig behandelt werden. Der eher statischen Abteilungsstruktur ist die flexiblere Projekt-Struktur überlagert, die in den folgenden Kapiteln 2.2 (Grundlagenprojekte) und 2.3 (Anwendungsprojekte) dargestellt ist.

Numerik

Aufgabe ist die Forschung und Entwicklung im Bereich der algorithmisch orientierten numerischen Mathematik. Schwerpunkte der Arbeit sind: adaptive Multilevel-Algorithmen für gewöhnliche und partielle Differentialgleichungen, Behandlung großer und nichtlinearer Systeme, gewichtete Galerkin-Methoden für stochastische Prozesse.

Symbolik

Aufgabe ist die Entwicklung von effektiven und anwendungsorientierten Algorithmen der symbolischen Mathematik. Schwerpunkte sind technische Expertensysteme, insbesondere vom gemischten symbolisch-numerischen Typ.

Numerische Software-Entwicklung

Aufgabe ist die Entwicklung von Anwenderprogrammen aus Forschungscode, welche am ZIB entstanden sind. Schwerpunkte sind effektive Implementierungen und anwenderfreundliche Systeme.

Software-Information

Hier werden Sammlungen von ZIB-Programmen sowie von öffentlich zugänglicher mathematischer Software aus dem Gebiet Scientific Computing zur Verfügung gestellt. Die Abteilung betreut auch einen europäischen netlib-Knoten. Die Weitergabe der Information erfolgt vorwiegend über elektronische Netze (electronic library - eLib), aber auch über Drucksachen und magnetische Datenträger.

Graphik

Die Abteilung befaßt sich mit Pflege und Entwicklung von graphischer Grundsoftware. Schwerpunkt ist die Darstellung numerischer Simulationsergebnisse.

Systolik

In der Abteilung Systolik werden die Wechselwirkungen zwischen adaptiven parallelen Algorithmen und Rechnerarchitekturen untersucht. Betrachtet werden sowohl statische (auch systolische) als auch dynamisch rekonfigurierbare Architekturen.

Verteilte Systeme

Die Mitarbeiter der Abteilung Verteilte Systeme des ZIB waren im Berichtszeitraum weiterhin im Rahmen der Kooperation mit der GMD-FOKUS zur Mitarbeit in zwei BERKOM-Projekten abgeordnet. Diese Kooperation gilt bis Ende 1991.

2.2 Grundlagenprojekte

Adaptive Multilevel-Diskretisierung zeitabhängiger partieller Differentialgleichungen

F. A. Bornemann, P. Deuflhard

Kooperation: H. Yserentant (Mathematische Fakultät, Universität Tübingen)

Im Jahr zuvor wurde ein neuer Ansatz zur Lösung parabolischer Evolutionsgleichungen mittels Zeitschrittsteuerung in Funktionenräumen entwickelt, die als durch die Ortsdiskretisierung gestört betrachtet wird (TR 89-7). Er wurde im Berichtszeitraum in Richtung auf Probleme mit zweidimensionalem Raumteil erweitert. Dazu waren Ergänzungen sowohl der Theorie als auch der Programmtechnik nötig.

So wurde die Theorie der Extrapolationsverfahren in Funktionenräumen auf allgemeinere zugrundeliegende Einschrittverfahren erweitert, wobei auch die Rolle von Konsistenz und

Glattheit eine abschließende Antwort im Sinne der im Vorjahr publizierten Vermutung fand. Diese erweiterte Theorie ist auch in der Lage, Mängel bestimmter Diskretisierungen in Zeitrichtung für parabolische Evolutionsgleichungen quantitativ vorherzubestimmen. Zusammen mit einer geänderten programmtechnischen Organisation der Extrapolation in Finite-Elemente-Räumen für ein-dimensionalen Raumteil konnte daher für diese Probleme eine erhebliche Beschleunigung des Verfahrens erzielt werden (Preprint SC 90-4).

Anwendung des Verfahrens für zwei-dimensionalen Raumteil verlangt Fehlerschätzung und Vorkonditionierung singular gestörter elliptischer Probleme. Dies konnte durch Erweiterung theoretischer Ansätze von Xu und Yserentant gefunden werden, wobei es ferner gelang, den entarteten Fall für inkonsistente Startdaten zu stabilisieren. Außerdem wurde eine programmtechnische Realisierung der Vorkonditionierung von Xu entwickelt, die inzwischen als Alternative zur Vorkonditionierung mittels hierarchischer Basen im Programm KASKADE angeboten wird. In der singular gestörten Version, in der einzig gewisse Faktoren anders zu bestimmen sind, konnte KASKADE als elliptischer Sub-Löser für parabolische Evolutionsgleichungen eingesetzt werden. Hierbei zeigte sich, daß höhere Ordnungen des Extrapolationsverfahrens nicht genutzt werden, da die elliptischen Sub-Probleme zu teuer geraten.

Deshalb wurde im Hinblick auf minimalen Aufwand ein neues Zeitdiskretisierungsverfahren variabler Ordnung konstruiert, das es erlaubt, weit weniger elliptische Probleme mit geringerer Genauigkeit auf einem einzigen Gitter zu lösen als bei Kombination mit Extrapolationsverfahren - bei gleicher Genauigkeit für das parabolische Problem. Diese Zeitdiskretisierung basiert auf einer Fehlerkorrektur mit multiplikativer anstelle der bisherigen additiven Struktur. Sie wurde erfolgreich für parabolische Probleme mit ein- und zwei-dimensionalem Raumteil eingesetzt, wobei sich auch für zwei-dimensionalen Raumteil höhere Ordnungen der Zeitdiskretisierung einstellen - bei drastischer Beschleunigung des Gesamtprozesses. Theorie und Vergleiche mit Extrapolationsverfahren für ein-dimensionalen Raumteil wurden publiziert (Preprint SC 90-13). Geplant sind Anwendungen des nunmehr zur Verfügung stehenden Programms KASTIO2 für zwei-dimensionalen Raumteil in dem Projekt "Hyperthermie" in Kooperation mit dem Rudolf-Virchow-Krankenhaus (s. Kap. 2.3).

Ferner wurden im Berichtszeitraum Ansätze einer Erweiterung auf den konvektiv-dominierten Fall sowie den Fall linearer hyperbolischer Gleichungen entwickelt, die äußerst erfolgversprechende Resultate lieferten. Hierbei wurde Stabilität der Verfahren ohne Zufügung künstlicher Viskosität erreicht. Die Ausarbeitung dieser Ansätze ist in Vorbereitung.

Adaptive FE-Verfahren zur Lösung freier Randwertprobleme

R. Kornhuber, R. Roitzsch

Kooperation: R. H. W. Hoppe (Mathematisches Institut, TU München), H. Yserentant
(Mathematische Fakultät, Universität Tübingen)

Im Berichtszeitraum wurde im Rahmen des Anwendungsprojektes "Effiziente Berechnung der Durchbruchspannung bei Hochleistungsbauelementen" (s. Kapitel 2.3) ein neuer adaptiver Zugang zur Behandlung von Hindernisproblemen entwickelt (Preprint SC 90-10): Hindernisprobleme gehören zur Klasse der freien Randwertprobleme, ein Gebiet auf dem schon in den vergangenen Jahren am Konrad-Zuse-Zentrum gearbeitet wurde (Preprints SC 88-8, SC 89-10). Aus dem adaptiven Zugang entstanden einige neue mathematische Fragestellungen, die den entsprechenden Algorithmus theoretisch absichern bzw. weiter beschleunigen würden. Hier sind vor allem lokale Fehlerschätzer bei variationellen Ungleichungen sowie schnelle iterative Löser von Komplementaritätsproblemen von Bedeutung. Einige bislang auf variationelle Gleichungen beschränkte Vorgehensweisen (Preprint SC 88-5) wurden auf variationelle Ungleichungen verallgemeinert. Erste numerische Tests und theoretische Ergebnisse sind erfolgsversprechend, werden jedoch erst 1991 im Druck erscheinen.

Unvollständige LU-Zerlegung auf lokal strukturierten Netzen

R. Kornhuber, R. Roitzsch

Kooperation: G. Wittum (Institut für Angewandte Mathematik, Universität Heidelberg)

Das reduzierte Problem zur skalaren Konvektions-Diffusionsgleichung läßt sich auf eine Familie von gewöhnlichen Anfangswertproblemen in Flußrichtung transformieren. Daher liegt es nahe, die Gitterlinien (wenigstens lokal) in Flußrichtung zu orientieren. Eine geeignete Diskretisierung führt dann auf die Lösung der einzelnen gewöhnlichen Differentialgleichungen entlang der Gitterlinien. Bei Numerierung der Unbekannten entlang der Gitterlinien erhält man eine Familie entkoppelter tridiagonaler Gleichungssysteme, deren Lösung mittels LU-Zerlegung billig zu haben ist.

Zusammen mit vorausgegangenen Arbeiten von G. Wittum zu robusten ILU-Glättern (IMP) und Kornhuber / Roitzsch zur adaptiven Orientierung (Preprint SC 89-5) ist diese Beobachtung der Ausgangspunkt für die schnelle Lösung von Konvektions-Diffusionsgleichungen. Auf relativ groben Triangulierungen dominiert die Konvektion mit der Folge, daß nach adaptiver Orientierung die Unbekannten entlang der einzelnen Gitterlinien fast entkoppelt sind und die entsprechende ILU-Zerlegung auf ein in wenigen Schritten konvergentes Iterationsverfahren führt. Auf diese Weise erhält man sehr schnell Aufschluß über den qualitativ richtigen Lösungsverlauf inklusive der Lage eventuell auftretender Grenzschichten. Ist man an der weiteren Auflösung von Grenzschichten interessiert, so hat man durch lokale anisotrope Verfeinerung die Schrittweite so weit zu verkleinern, bis der elliptische Anteil zum Tragen kommt. In diesem Bereich kann die

ILU-Zerlegung nicht mehr effektiv als Löser eingesetzt werden. Dafür stehen nun alle bekannten Multilevel-Verfahren zur Behandlung elliptischer Probleme zur Verfügung.

Im Berichtsjahr wurde im Anschluß an das Projekt "Adaptive Gittergenerierung für stationäre anisotrope Probleme in zwei Variablen" (siehe Jahresbericht 1989) eine geeignete adaptive Numerierung entwickelt und implementiert. Erste Ergebnisse, wie sie unter anderem während eines Forschungsaufenthaltes von R. Kornhuber im November 1990 bei G. Wittum in Heidelberg erzielt wurden, sind vielversprechend. Zugehörige Veröffentlichungen sind für 1991 geplant.

Software-Implementierung adaptiver Multilevel-FE-Methoden

R. Roitzsch, B. Erdmann

Kooperation: P. Leinen, H. Yserentant (Mathematische Fakultät, Universität Tübingen)

Im Rahmen der Pflege der verschiedenen Varianten des adaptiven Finite-Elemente-Codes KASKADE wurden interne Schnittstellen neuen Bedürfnissen angepaßt und Teilmodule neu implementiert. Für die adaptive Lösung linearer skalarer elliptischer (partieller) Differentialgleichungen auf beliebigen zweidimensionalen Gebieten mit allgemeinen Randbedingungen wurde der Code ELLKASK extrahiert. Diese KASKADE Variante enthält neue algorithmische Varianten wie den BPX-Präkonditionierer und eine alternative Verfeinerungsstrategie - Resultate aus dem Grundlagenprojekt "Adaptive Multilevel-Diskretisierung zeitabhängiger partieller Differentialgleichungen".

Weiterhin wurde ELLKASK an einem Satz von Beispielen erprobt und die Ergebnisse mit denen eines anderen Löser (PLTMG, R. Bank) verglichen. Dazu wurde der Testrahmen weiter ausgebaut. Im Vergleich zu PLTMG löst ELLKASK die Testprobleme zwei- bis viermal so schnell bei erhöhtem Speicherbedarf. Wesentliche Gründe für den Geschwindigkeitsgewinn liegen in der Implementierung der Datenstrukturen und der einfacheren Problemformulierung.

Die alternative Verfeinerungsstrategie führt bei speziellen Problemen zu einer Reduktion der Anzahl der Knoten um einen Faktor bis zu 6 mit einem entsprechenden Zeitgewinn. Gegenüber den hierarchischen Basen eröffnet der BPX-Präkonditionierer die Möglichkeit, weitere Problemklassen (etwa Helmholtz-Probleme) zu behandeln. Die theoretischen Eigenschaften und die Robustheit des BPX-Präkonditionierers wurde bei den hier untersuchten Poisson-Problemen bestätigt.

ELLKASK wird über die CodeLib zur Verfügung gestellt.

Multilevel-Methoden in der Computergraphik

M. Klatte, P. Deuflhard, R. Roitzsch, H. Hege, R. Wunderling

Kooperation: R. Rühle (Rechenzentrum, Universität Stuttgart), H. Yserentant (Mathematische Fakultät, Universität Tübingen), W. Straßer (Institut für Informatik, Universität Tübingen)

Bei der Anwendung der Finite-Element-Methode kommt der Auswertung der Ergebnisse durch schnelle Computergraphik große Bedeutung zu. Während bislang Numerik und Graphik unabhängig voneinander betrachtet wurden, ist es Ziel dieses Projektes, die Graphik durch Ausnutzung der von der Numerik herrührenden hierarchischen Struktur drastisch zu beschleunigen.

Auf der Basis der Diplomarbeit von M. Klatte sollen zunächst Multilevel-Verfahren zur Bestimmung von Isolinen, zum Füllen von Konturen, zur Ermittlung verdeckter Bereiche, später auch für andere Probleme der Computergraphik entwickelt und innerhalb von KASKADE implementiert werden.

Im Berichtsjahr wurde zur Schaffung einer Testumgebung für das zu entwickelnde adaptive Hiddensurface-Verfahren ein Tiefensortierungsverfahren implementiert. Es stellt eine Weiterentwicklung der bisher in KASKADE vorliegenden Version dar. Es wurden zusätzliche Tests auf Fälle eingebaut, in denen die Sortierung allein zu falschen Ergebnissen führt.

Daneben wurde die Möglichkeit für die standardisierte Ausgabe der Ergebnisse von KASKADE über PHIGS geschaffen. Die Wahl von PHIGS erfolgte wegen der speziellen Unterstützung hierarchischer Strukturen durch diesen Graphikstandard.

Das fertiggestellte Programm ISO liest stückweise lineare, skalare Funktionen aus KASKADE ein und gestattet unter Nutzung der Möglichkeiten von PHIGS das Füllen von deren Konturen mit kontinuierlicher Schattierung. Daneben wird die Möglichkeit der Anwendung von PHIGS in KASKADE über den Layer AGIL verfolgt.

Iterationsverfahren für große lineare unsymmetrische Gleichungssysteme

P. Deuflhard, A. Walter

Kooperation: R. Freund (NASA Ames Research Center, RIACS / USA)

Für die Lösung von linearen Gleichungssystemen mit positiv definiten symmetrischer Matrix A ist das Verfahren der konjugierten Gradienten (cg) mit Vorkonditionierung zu großer Reife entwickelt. Es ist auch in dem Programmpaket KASKADE für elliptische Probleme des ZIB implementiert. Da die in der Iteration entstehenden Korrekturen orthogonal sind, ist der benötigte Speicherplatz proportional zur Anzahl der Unbekannten. Im Fall einer unsymmetrischen Matrix hat sich in letzter

Zeit das Verfahren GMRES durchgesetzt. Es beruht auf der Minimierung des Residuums der Iterierten. Dieses Konzept eignet sich nicht für Probleme in Hilberträumen, daher kann GMRES nicht effektiv in einem Multilevel-Zugang verwendet werden.

Die Diskretisierung von Konvektions-Diffusionsgleichungen führt auf sehr große lineare Gleichungssysteme mit dünnbesetzter unsymmetrischer Matrix A . Auf der Grundlage von Sekantenverfahren, den sogenannten Broyden-Verfahren, wurden für solche Matrizen Lösungsverfahren entwickelt, die sich gut in die am ZIB verwendete Multilevel-Diskretisierung einpassen.

Bei dem im Berichtszeitraum entwickelten Algorithmus wird ausgehend von einer einfachen Approximation für die Inverse der Matrix A , z. B. die invertierte Diagonale, während der Iteration sowohl die Lösung als auch diese Approximation verbessert. Es wurde gezeigt, daß in jeder Iteration der euklidische Fehler der Iterierten minimiert wird. Dies hat insbesondere für sehr große Systeme deutliche numerische Vorteile gegenüber dem Konzept der Minimierung des Residuums. Das Verfahren wurde analysiert und es wurden numerische Vergleiche mit GMRES durchgeführt. Die Ergebnisse zeigten, daß der Algorithmus konkurrenzfähig ist, insbesondere das sogenannte "good Broyden"-Verfahren mit speziell optimierter Schrittlänge. Die theoretische Fundierung, Fragen der Implementierung und numerische Anwendungen sind im Preprint SC 90-5 dargestellt.

Im Fall einer unsymmetrischen Matrix kann keine Orthogonalität der Korrekturen ausgenutzt werden. Deshalb muß während der Iteration Speicherplatz für Hilfsvektoren bereitgestellt werden. Um diese Schwierigkeit fast aller Verfahren zur Lösung unsymmetrischer linearer Systeme zu umgehen, wurde im Berichtszeitraum ein weiteres Sekantenverfahren entwickelt. Aufgrund der Erfahrungen mit dem "good Broyden" Algorithmus wurde dieser direkt auf eine unvollständige Zerlegung, ILU, der Matrix A angewandt. Die Herleitung des oben genannten Sekantenverfahrens erlaubt es, an die Approximation von A noch Nebenbedingungen zu stellen. So ist es möglich, die Modifikationen der Approximation direkt auf dem Produkt von L und U durchzuführen ohne die Besetzungsstruktur zu ändern.

Das Verfahren der unvollständigen Zerlegung hat sich für sogenannte M -Matrizen in den letzten Jahren etabliert. Diese Eigenschaft der Matrix A ist leider in der Praxis oft nicht gegeben. Das entwickelte Sekantenverfahren setzt nur die Regularität von A voraus. Dadurch wurde die Methode der unvollständigen Zerlegung für eine breitere Klasse von Matrizen theoretisch fundiert und anwendbar. Da keine Modifikationen der Ausgangsmatrix A notwendig sind, kann auch spezielle Software verwendet werden, die die Besetzungsstruktur von A berücksichtigt.

In Abbildung 1 wird das Verfahren der unvollständigen Zerlegung (gestrichelt) dem beschriebenen Sekantenverfahren (durchgezogen) gegenübergestellt. Dabei wurde eine zufällig erzeugte reguläre nicht diagonaldominante 100×100 Matrix benutzt. Für solche Matrizen ist die Methode der unvollständigen Zerlegung im allgemeinen divergent. Deshalb wurden, um die verschiedenen Matrizen 1 bis 5 zu erzeugen, alle Diagonalelemente der Ausgangsmatrix um 1 erhöht. Das letzte Teilbild zeigt, daß die Oszillationen in der Konvergenz für die Ausgangsmatrix durch die in SC 90-5 eingeführte Schrittlengthwahl vermieden werden können. Die Herleitung des Verfahrens, ein Konvergenzbeweis und erste numerische Ergebnisse sind in SC 90-12 dargestellt.

Die Konvergenz des Verfahrens bei Anwendung auf Matrizen, die aus der Diskretisierung von Konvektions-Diffusionsgleichungen stammen, zeigt ein ähnliches Verhalten wie das cg-Verfahren

im elliptischen Fall. Diese Anwendungen, eine theoretische Untersuchung und Modifikationen des Verfahrens sind in SC 90-20 und SC 90-21 enthalten.

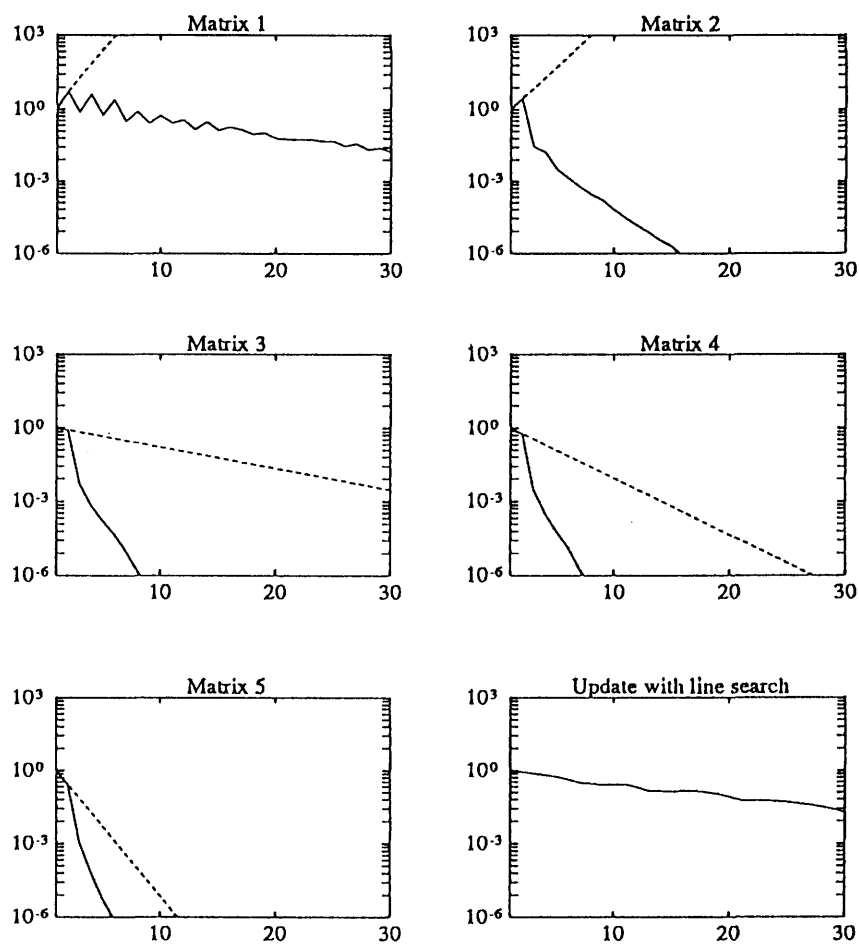


Abbildung 1: Vergleich des Konvergenzverhaltens von Richardson-Iteration und Sekantenverfahren

Newton-Techniken für sehr große nichtlineare Systeme

P. Deuffhard, U. Nowak, L. Weimann

Kooperation: F. Potra (University of Iowa / USA)

Exakte Newton-Techniken: Bei Anwendung des Newton-Verfahrens muß eine Kette von linearen Subproblemen gelöst werden. Für Probleme nicht zu großer Dimension kann dies mit Hilfe direkter Standard-Algorithmen (wie etwa Gauß-Elimination) durchgeführt werden. Bei großen und dünn besetzten Matrizen können spezielle Varianten, wie etwa Bandlöser oder Sparse-Matrix-Techniken, erfolgreich eingesetzt werden. Die Arbeiten an der Entwicklung effizienter Software und der dazugehörigen Dokumentation auf der Basis eines globalen affin-invarianten Newton-Verfahrens wurden zu einem gewissen Abschluß gebracht (Technical Report TR 90-10). Die über die CodeLib zugänglichen Codes NLEQ1, NLEQ2, NLEQ1S decken nun diesen Problemkreis im wesentlichen ab.

Inexakte Newton-Techniken: Für sehr große Systeme von nichtlinearen Gleichungen, wie sie etwa bei der Diskretisierung von nichtlinearen, partiellen Differentialgleichungen in 2 oder 3 Raumdimensionen entstehen, müssen iterative lineare Löser eingesetzt werden, um die linearen Subprobleme zu lösen. In diesem Fall können sogenannte inexakte Newton-Techniken verwendet werden, um das nichtlineare Problem zu lösen. Dabei erscheint dann die Newton-Iteration als äußere Iteration, während die Iterationen zur Lösung der linearen Probleme als innere Iteration angesehen werden können. Um ein effizientes Gesamtverfahren zu erhalten, ist die Frage nach der Steuerung der (verlangten) Genauigkeit für die innere Iteration von entscheidender Bedeutung. Einerseits ist eine gewisse Genauigkeit notwendig, um die Konvergenzgeschwindigkeit des globalen Newton-Verfahrens zu erhalten, andererseits können zu stringente Genauigkeitsanforderungen an die innere Iteration zu extrem anwachsendem Rechenaufwand führen, ohne daß eine Beschleunigung der Newton-Konvergenz erzielt werden kann. Von Deuffhard wurden die globalen affin-invarianten exakten Newton-Techniken auf den Fall inexakter Newton-Techniken erweitert und eine theoretisch fundierte Strategie zur adaptiven Steuerung der Genauigkeitsanforderung an die innere Iteration entwickelt (Preprint SC 90-2). Auf der Basis dieser Resultate wurde das Programmpaket GIANT (mnemotechnisch für: Global Inexact Affine invariant Newton Techniques) entwickelt (Technical Report TR 90-11). Als iterative Löser stehen dabei eine neuentwickelte, schnelle Sekantenmethode GBIT1 ("Good Broyden", Preprint SC 90-5, Implementierung Technical Report TR 90-11) und ein Standard-Verfahren (GMRES aus SLAP, Brown, Hindmarsh, Saeger) zur Verfügung. Die modulare Programmstruktur von GIANT erlaubt jedoch den einfachen Austausch des iterativen linearen Löser. Die Benutzerschnittstellen wurden so gestaltet, daß sowohl Standard-Verfahren zu Vorkonditionierung und Matrix-Vektor Multiplikation (aus SLAP, Saeger, Greenbaum), als auch spezielle, dem Problem angepasste Benutzerrountinen verwendet werden können. Damit ist auch eine Realisierung als sogenanntes matrixfreies Verfahren möglich. Jedoch können schon mit der Standard-Schnittstelle Probleme mit bis zu 50000 Unbekannten auf gängigen Workstations gelöst werden. Ausführliche Testrechnungen über Beispiele aus verschiedenen Problemklassen zeigen die Robustheit und Effizienz des Verfahrens. So kann z.B. die Lösung des sogenannten "Driven Cavity" Problems auch für große Reynoldszahlen (siehe Abbildung 2) mit relativ wenigen Newton-Iterationen (10-20) erreicht werden. Vergleichbare Rechnung von Brown / Saad mit einer residuenminimierenden

Methode benötigen eine deutlich höhere Anzahl an Newton-Schritten (30 - 90). Dies belegt den strukturellen Vorteil eines affin-invarianten globalen Newton-Verfahrens, wobei aufgrund der unterschiedlichen Implementierungen ein fairer Effizienzvergleich nicht möglich ist.

Das Programmpaket GIANT ist interessierten Anwendern über die CodeLib zugänglich.

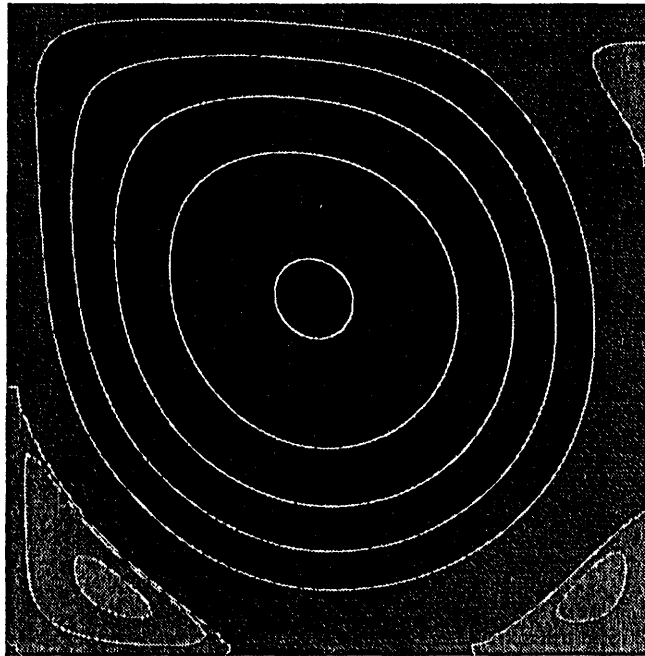


Abbildung 2: Höhenlinien für Driven Cavity Problem mit $Re = 5000$

Adaptive Newton-Multilevel-Methoden: Eigentliches Ziel der algorithmischen Behandlung von nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen ist die Zusammenführung von inexakten Newton-Methoden (siehe oben) mit linearen Solvern vom Multilevel-Typ, wie sie bisher als vorkonditionierte konjugierte Gradienten-Verfahren lediglich für den elliptischen Gleichungstypus vorliegen. Vorarbeiten für den nicht-selbstadjungierten Fall wurden durchgeführt (vgl. Preprint SC 90-5). Damit das Konzept der adaptiven Newton-Multilevel-Methoden aufgehen kann, benötigt man die Gültigkeit eines asymptotischen Gitterunabhängigkeitsprinzips zumindest für Galerkin-Methoden. Es wurde (gemeinsam mit F. Potra) in neuer Weise äußerst transparent bewiesen mit Hilfe eines verbesserten Mysovskii-Satzes (vgl. Preprint SC 90-9).

Gemischt symbolisch-numerische Lösung von nichtlinearen Gleichungssystemen mit Symmetrien

K. Gatermann, A. Hohmann, P. Deuflhard

Kooperation: B. Werner (Institut für Angewandte Mathematik, Universität Hamburg),
B. Fiedler (Mathematisches Institut, Universität Stuttgart)

SYMCON ist ein Programm zur Lösung von symmetrischen, nichtlinearen Gleichungssystemen bestehend aus einem symbolischem und einem numerischen Teil. Die Symmetrie-Analyse wird vollständig im symbolischen Teil im Computer Algebra System REDUCE durchgeführt. Neben Berechnungen zur Gruppenstruktur und zu Erkenntnissen der linearen Darstellungstheorie werden im symbolischen Teil nichtlineare Transformationen und symbolische Differentiation benutzt. Die Kommunikation mit dem numerischen Teil wird durch die Erzeugung von C-Code mittels GENTRAN durchgeführt. Der numerische Teil besteht aus numerischer Pfadverfolgung mit impliziter Reparametrisierung und mit automatischer Schrittweitensteuerung (Weiterentwicklung des rein numerischen Programmpaketes ALCON) sowie der Berechnung von Verzweigungspunkten mittels erweiterter Systeme mit und ohne Ausnutzung der Symmetrie. Dabei werden die Resultate graphisch ausgegeben. Die neuartige, enge Verknüpfung von symbolischem und numerischem Rechnen wird als komplexe C-Struktur realisiert. Beispielrechnungen wurden u.a. am D_6 -Brusselator durchgeführt, bei dem chemische Reaktionen in 6 miteinander verbundene Zellen stattfinden (siehe Abbildungen 3 und 4). Eine ausführliche Beschreibung findet sich im Preprint SC 90-11. Es besteht bereits reges Interesse und Nachfrage nach SYMCON. Die Verbreitung wird über die CodeLib erfolgen. An einer Ausweitung auf größere Problemklassen und an der Ergänzung von zusätzlichen Berechnungen wird gearbeitet.

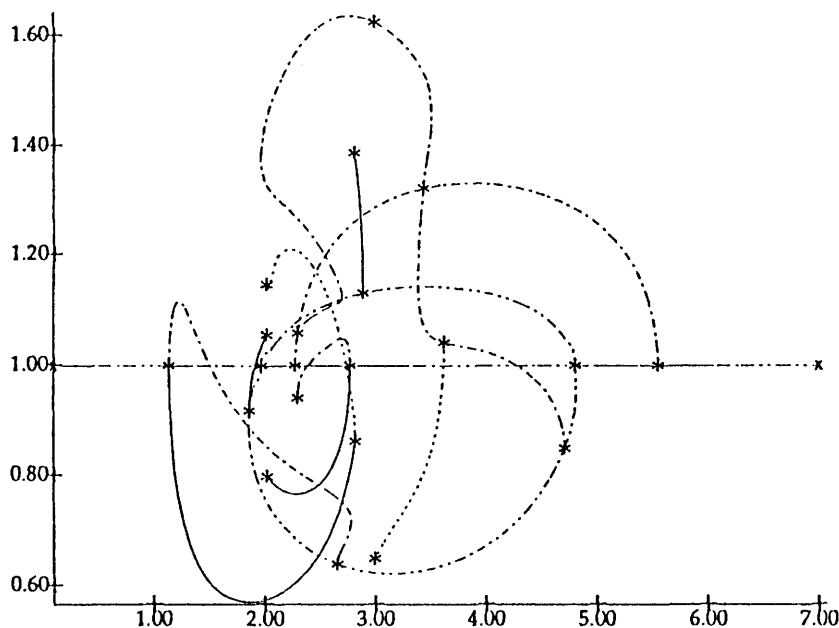


Abbildung 3: Nicht konjugierte Lösungen des D_6 -Brusselators

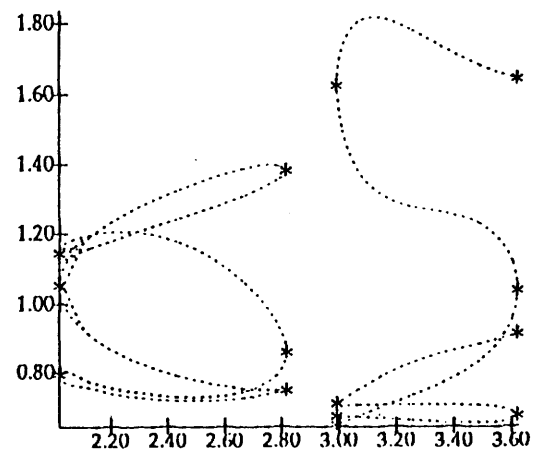
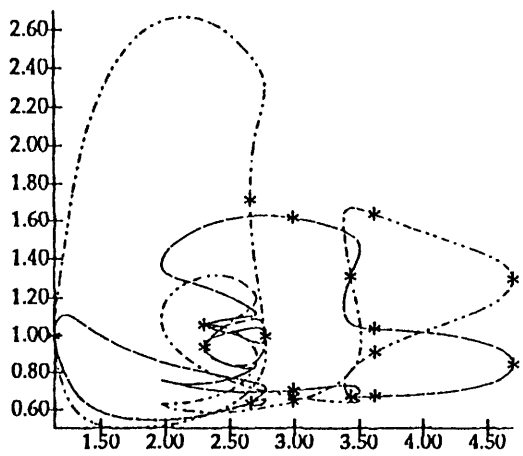
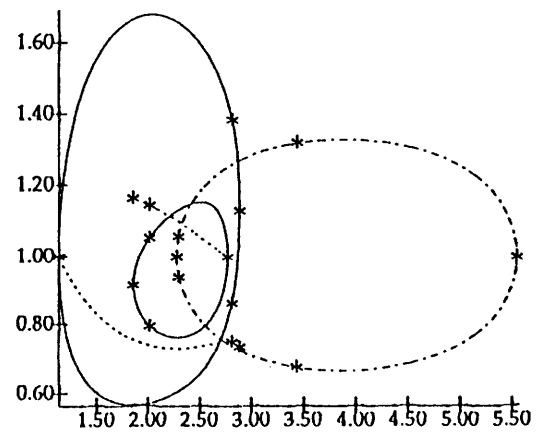
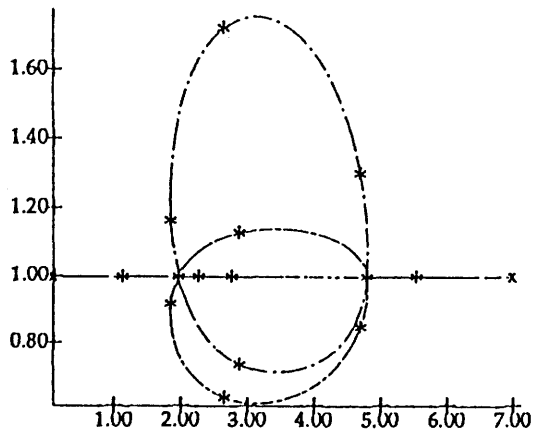


Abbildung 4: Lösungen des D_6 -Brusselators mit den Isotropiegruppen D_6 , K_6^i (links oben), D_3^2 , Z_2^{2i} (rechts oben), Z_2^{2i+1} (links unten) und ID

Symbolische Erstellung von erweiterten Systemen für Verzweigungspunkte höherer Kodimension

K. Gatermann, P. Deuflhard, H. Melenk

Kooperation: B. Fiedler (Mathematisches Institut A, Universität Stuttgart)

Verzweigungspunkte als Lösungen von parameterabhängigen, nichtlinearen Gleichungssystemen werden numerisch üblicherweise mit Hilfe eines erweiterten Systems berechnet. Die analytische Theorie der Erstellung solcher erweiterten Systeme benutzt u.a. Lyapunov–Schmidt–Reduktion und universelle Entfaltung.

Es wurde versucht diesen Weg in einem rein symbolischen Programm zu automatisieren. Für eine Beispiel–Singularität wird die universelle Entfaltung berechnet. Grundlegend ist aber die Definition von generischen Vektoren, Matrizen und Tensoren und deren Verknüpfung sowie die symbolische Differentiation generischer, vektorwertiger Funktionen. Ein Gröbner–ähnlicher Programmteil erledigt die Vereinfachung von Ausdrücken in diesen generischen Objekten.

Symbolische Lösung polynomialer Gleichungssysteme

H. Melenk, K. Gatermann

Kooperation: H.M. Möller (FB Mathematik und Informatik, Fernuniversität Hagen)

Schon seit längerem wird im ZIB der Buchberger-Algorithmus für die symbolische Lösung polynomialer Gleichungssysteme eingesetzt. Dabei wurden Varianten des Algorithmus entwickelt, die besonders für den praktischen Einsatz von Gleichungssystemen aus dem natur- und ingenieurwissenschaftlichen Bereich geeignet sind und dort auch (an algebraischen Algorithmen gemessen) größere Probleme zu bearbeiten gestatten: Diese Versionen sind bereits seit längerer Zeit in der Anwendungsbibliothek von REDUCE allgemein verfügbar (MELENK, CWI Quarterly Vol. 3, No.2 (1990), pp. 121–136). Zahlreiche Anfragen belegen das allgemeine Interesse an diesem Paket.

Im Berichtsjahr wurde ein spezielles Verfahren entwickelt, mit dem Polynomsysteme mit Symmetrien bearbeitet werden können. Symmetrien treten in vielen Anwendungsbereichen systematisch auf; so sind z.B. in der Astrophysik die räumlichen Dimensionen häufig gleichberechtigt — das System ist invariant gegenüber der Vertauschung von Variablen. Mit einem speziellen Ansatz ist es für einige dieser Symmetrien möglich, direkt und explizit in dem Polynomideal faktorisierte Polynome aufzufinden. Derartige Faktorisierungen sind ein wirksames Hilfsmittel, um den Lösungsraum und damit das Ausgangsproblem in deutlich kleinere Teilprobleme zu zerlegen. Die im ZIB verwendete Variante des Buchberger-Algorithmus ist für die Ausnutzung der Faktorisierung eingerichtet. Die Kopplung beider Verfahren erlaubt nun die Lösung erheblich umfangreicherer Probleme. In einem Einsatzfall z.B. konnte der Bereich der lösbarer Probleme gleich um mehrere Größenordnungen gesteigert werden (SC 90–3, GATERMANN, ISSAC'90, SC 90–11).

Weiterentwicklung von REDUCE

H. Melenk, W. Neun

Leitung: A. C. Hearn (RAND, Santa Monica, Californien)

Kooperation: Jed B. Marti, Stan L. Kameny (RAND),
James Daveport, John Fitch (Bath, England),
Arthur Norman (Cambridge, England),
Eberhard Schrüfer (GMD Bonn).

Weitere Beiträge von derzeit 38 Wissenschaftlern aus den USA, Japan, Australien, Sowjetunion und 9 europäischen Ländern.

REDUCE ist ein Programmsystem für die symbolische Bearbeitung mathematischer Formeln. Die Entwicklung von REDUCE wurde Ende der sechziger Jahre von A.C. Hearn begonnen, und zwar zunächst für den Einsatz in der Physik (vor allem Hochenergiephysik). REDUCE entwickelte sich bald zu einem universellen Werkzeug für die verschiedensten Ingenieur- und Naturwissenschaften. Heute bietet REDUCE neben der klassischen Computeralgebra Hilfsmittel für zahlreiche mathematische Teilbereiche und für eine wachsende Zahl von Anwendungsbereichen.

Schon seit einigen Jahren hat A.C. Hearn aufgrund langjähriger Zusammenarbeit auswärtige Gruppen an der Entwicklung von REDUCE beteiligt. Eine dieser Gruppen ist die Abt. Symbolik des ZIB.

Ein Schwerpunkt der Arbeit in diesem Bereich war im Berichtsjahr die Integration des im ZIB entwickelten Gröbner-Paketes in REDUCE. Das Gröbner-Paket war bisher ein selbständiges Modul in REDUCE, dessen Einsatz ein gewisses Spezialwissen erforderte. Inzwischen wurde es jedoch so in den Gleichungslöser von REDUCE integriert, daß es bei Bedarf automatisch angesprochen wird und daß die notwendigen Parameter automatisch gesetzt werden. Damit wird die Fähigkeit von REDUCE, nichtlineare Gleichungen und Gleichungssysteme algebraisch zu lösen, in einer besonders anwenderfreundlichen Weise erweitert.

Auch die im ZIB gepflegten symbolisch-numerischen Verfahren haben einen unmittelbaren Einfluß auf die Entwicklung von REDUCE, da dieser zukunftssträchtige Bereich an kaum einer Stelle mit einer vergleichbaren Intensität gepflegt wird.

Neben regelmäßigen persönlichen Kontakten bei Besuchen und Tagungen wird die Kommunikation in diesem Projekt primär über electronic Mail abgewickelt. Die Zuständigkeit für die Teile von REDUCE ist zwar im Sinne einer Federführung auf die Gruppen verteilt, jedoch muß wegen der starken Vernetzung der Strukturen permanent eine gemeinsame Quelldatenbank gepflegt werden (derzeit mit wöchentlichem weltweiten Update). Ohne eine leistungsfähige electronic Mail wäre eine derartige Projektarbeit wesentlich erschwert.

Symbolisch-numerische Behandlung von Problemen der optimalen Steuerung

R. Schöpf, M. Wulkow, P. Deuflhard

Bei Problemen der optimalen Steuerung geht es darum, ein (dynamisches) System im Hinblick auf die Minimierung eines Zielfunktional zu kontrollieren. Probleme dieser Art tauchen in vielerlei Anwendungen auf, z. B. in der Raumfahrt. Die Lösung erfordert umfangreiche analytische Vorbereitung zur Herleitung von notwendigen Bedingungen für die Lösung (Stichworte: Hamiltonfunktion, adjungierte Differentialgleichungen). Die daraus resultierenden Randwertprobleme werden anschließend meist numerisch behandelt. Ziel des Projektes ist es, den analytischen Anteil dieses Vorgehens so weit wie möglich zu automatisieren und gleichzeitig einen Quellcode für die numerische Methode zu generieren.

Das Projekt wurde im Berichtszeitraum begonnen. Zunächst wurde mit den im Computeralgebrasystem REDUCE vorhandenen Möglichkeiten experimentiert und ein Prototyp eines symbolischen Programms entwickelt. Dabei zeigte sich, daß die bei den sogenannten regulären Steuerungsproblemen auftretenden Systeme nichtlinearer Gleichungen nur teilweise einer automatischen Lösung zugänglich sind. Dies läßt sich verbessern, indem zunächst transzendente Gleichungssysteme durch Wechsel der Variablen in polynomiale Form gebracht werden. Erste Versionen eines entsprechenden Algorithmus wurden implementiert.

Für die numerische Behandlung der analytisch nicht lösbaren Differentialgleichungssysteme soll die Mehrzielmethode verwendet werden. Das symbolische Programm benutzt das vor allem in Enschede (Niederlande) entwickelte REDUCE-Modul SCOPE zur Erzeugung optimierten numerischen Codes für den Differentialgleichungslöser.

Extrapolationsverfahren für gewöhnliche Differentialgleichungen und differentiell-algebraische Systeme

U. Nowak, U. Pöhle, P. Deuflhard

Kooperation: Ch. Lubich (Institut für Mathematik und Geometrie, Universität Innsbruck)

Bei der Neuimplementierung von Extrapolationsverfahren wurden adäquate modulare Programmstrukturen entwickelt, die zu neuen internen und externen Schnittstellen für die verschiedenen Extrapolationscodes führen. Für die Klasse der h-Extrapolationsverfahren (EULEX für nicht-steife gewöhnliche Differentialgleichungen, EULSIM für steife Differentialgleichungen und LIMEX für (implizite) differentiell-algebraische Systeme) wurde die Neuimplementierung im wesentlichen abgeschlossen (Technical Report TR 90-12). Es stehen dem Anwender nunmehr eine Vielzahl von Benutzungsmöglichkeiten zur Verfügung. Von einer "easy to use"-Schnittstelle angefangen über "klassische" Schnittstellen bis hin zur Möglichkeit, spezielle algorithmische Varianten zu modifizieren, kann ein Anwender die Codes seinen Bedürfnissen entsprechend verwenden. Eine analoge Realisierung für h^2 -Extrapolationsverfahren wird 1991 folgen.

Für große Systeme von steifen Differentialgleichungen mit dünnbesetzter (sparse) Jacobi-Matrix haben sich Sparse-Matrix-Techniken zur Lösung der auftretenden linearen Probleme bewährt. Die Arbeiten an einer Sparse-Version des semi-impliziten Euler-Verfahrens (EULSIS) wurden fortgeführt. Für sehr große oder dichter besetzte Matrizen kann der Aufwand zur Lösung der linearen Problem dennoch stark anwachsen. Durch Weglassen "kleiner" Elemente der Matrix können deutliche Effizienzsteigerungen erzielt werden. Basierend auf einfachen Stabilitätsbetrachtungen, wurde für dieses "sparsing" ein allgemeiner, adaptiver Algorithmus entwickelt, der sich in idealer Weise innerhalb von Extrapolationsverfahren realisieren läßt (Preprint SC 90-19). Die Anwendung dieses Algorithmus im Anwendungsprojekt "Numerische Simulation epidemiologischer AIDS-Modelle" führt zu einer drastischen Reduktion an Rechenzeit und Speicherplatz. So können 95 - 99 % der Elemente weggelassen werden (siehe Abbildung 5), ohne dabei das Verhalten des Integrationsverfahrens zu verschlechtern. Weitere Tests an kritischen Problemen zeigen ebenfalls die Robustheit und Effizienz des Verfahrens.

Extrapolationscodes werden inzwischen in vielen Bereichen des Scientific Computing erfolgreich eingesetzt. Ein Überblick über Anwendungen im Bereich Chemical Computing findet sich in Preprint SC 90-7.

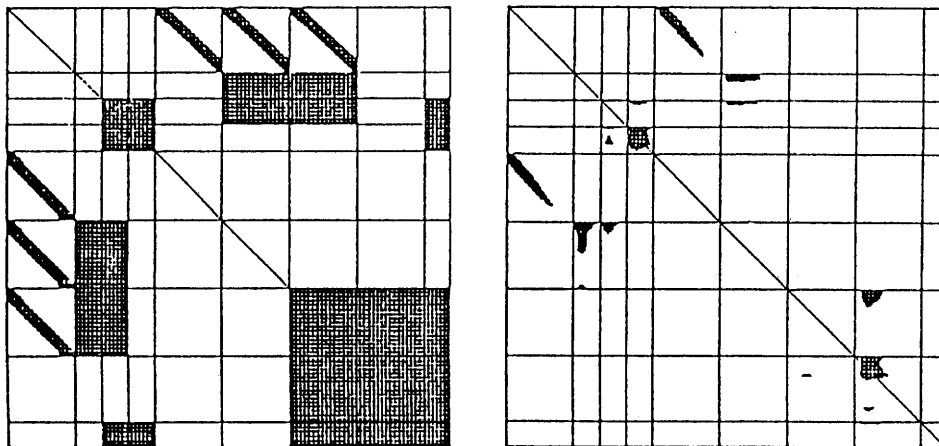


Abbildung 5: Jacobi-Matrix eines AIDS-Modells ($n = 1650$) vor und nach "sparsing".

Im Berichtszeitraum wurde die Zusammenarbeit mit dem Zuse-Fellow Ch. Lubich (Universität Innsbruck) begonnen. Ziel der Zusammenarbeit ist es, neue Extrapolationsverfahren für differentiell-algebraische Systeme mit Index > 1 aus dem Bereich Mehrkörpersysteme effizient und benutzerfreundlich zu implementieren. Als Basis hierfür dient das von Lubich entwickelte Verfahren MEXX21. Ein Preprint ist in Vorbereitung.

Diskrete Galerkin-Methoden zur Lösung abzählbarer Systeme von gewöhnlichen Differentialgleichungen

M. Wulkow, J. Ackermann, P. Deuflhard

Abzählbare (unendliche) Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen (CODE's) entstehen z.B. bei der Modellierung chemischer Polymerisationsprozesse oder bei der Modellierung von Rußbildung in Flammen (Motoren). Die numerische Behandlung solcher Systeme erfordert die Lösung von Systemen mit bis zu 1 Million einzelner Differentialgleichungen.

Die in den Berichtszeiträumen 1988 / 1989 für homogene Polyreaktionen entwickelten diskreten Galerkin-Methoden konnten 1990 weiter verbessert werden. Es wurde ein spezielles diskretes Galerkin-Verfahren für sogenannte heterogene chemische Prozesse vorgestellt, welches die geschickte Approximation von gebrochenen Potenzen durch diskrete Strukturen ausnutzt. Dieses Verfahren wurde an einem realistischen Modell aus der Polymerchemie getestet, welches in der Formulierung als System gewöhnlicher Differentialgleichungen aus ca. 400000 einzelnen Komponenten besteht (SC 90-1).

Im Rahmen einer Dissertation (Michael Wulkow) konnte eine neue Stufe diskreter Galerkin-Methoden entwickelt und ausführlich theoretisch begründet werden (TR 90-8). In dem neuen Ansatz werden CODE's als gewöhnliche Differentialgleichungen in bestimmten gewichteten Folgenräumen aufgefaßt. In diesen Räumen wird die CODE bezüglich der Zeit im Sinn eines Rothe-Verfahrens diskretisiert. Die numerische Behandlung der resultierenden stationären Unterprobleme geschieht mit einem neuen, erweiterten diskreten Galerkin Verfahren, welches auf Entwicklungen der Lösung in eine 2-Parameter Familie von Orthogonalpolynomen einer diskreten Variable basiert. Eine Theorie von CODE's in den gewählten Räumen und eine Theorie des Galerkin Verfahrens wurden hergeleitet. Es bestehen enge Querbezüge zum Grundlagenprojekt: "Adaptive Multilevel Methoden für zeitabhängige partielle Differentialgleichungen "

Der implementierte Algorithmus CODEX ist voll adaptiv, d.h. sowohl die Zeitschritt- und Ordnungssteuerung als auch das Galerkin Verfahren werden ausgehend von der gewünschten Genauigkeit der Lösung automatisch gesteuert. Der Algorithmus erlaubt die Lösung verschiedenster, realistischer Probleme, insbesondere ist es nun möglich, Prozesse zu simulieren, deren Lösung mit der Zeit sehr verschiedene Gestalt annimmt. Des weiteren können fehlende analytische Eigenschaften der verwendeten Orthogonalpolynome durch Benutzung eines numerischen Summationsalgorithmus ersetzt werden. Bei dem Programmmodul SUMMATOR handelt es sich um ein adaptives Multilevel-Summationsverfahren, welches strukturelle Ähnlichkeit zu Finite-Elemente-Verfahren hat.

Mit CODEX konnten eine Reihe von Beispielen aus der Polymerchemie erfolgreich behandelt werden. Für ein Beispiel aus dem Bereich der Smog Simulation, welches besondere Komplexität besitzt, wurden erste vielversprechende Resultate erzielt.

Entwicklung eines Simulationspaketes für makromolekulare Reaktionen einschließlich chemischer Reaktionskinetik

J. Ackermann, U. Nowak, M. Wulkow

Die Simulation makromolekularer Prozesse erfordert die Lösung von abzählbaren Systemen gewöhnlicher Differentialgleichungen (CODE's, s. o.) und zusätzlichen kinetischen Gleichungen. Es wurde die erste Stufe des Simulationspaketes MACRON erstellt, welches es dem Anwender (z.B. aus der Chemie) ermöglichen soll, diskrete Galerkin-Methoden in einfacher Weise zu nutzen. In der ersten Version von MACRON wurde das diskrete Galerkin-Verfahren als Linienmethode implementiert. Die gegebenen Reaktionsgleichungen werden vorab analytisch behandelt und die daraus entstehenden (relativ kleinen) Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen werden danach integriert. Auf der Basis der theoretischen und praktischen Erkenntnisse, die in den letzten Jahren am ZIB auf diesem Gebiet gemacht wurden, konnten effiziente Methoden sowohl für den sogenannten chemischen Compiler (eine Weiterentwicklung des entsprechenden Bausteins im Simulationspaket LARKIN) als auch für die Numerik implementiert werden.

2.3 Anwendungsprojekte

Hyperthermie-Planung

P. Deuflhard, U. Nowak, R. Roitzsch

Kooperation: R. Felix, J. Nadobny, P. Wust (Abteilung für Radiologie im Klinikum Charlottenburg, Standort Rudolf-Virchow-Krankenhaus)

Im Rahmen der klinischen Hyperthermie sollen Krebstumore mittels gezielter Überhitzung, durch Bestrahlung mit Mikro- bzw. Radiowellen, zerstört werden. Langfristiges Ziel des Projektes ist die patientenspezifische Simulation der E-Feld-Verteilung und der daraus resultierenden Temperaturverteilung im menschlichen Körper. Der Ablauf eines dadurch möglichen Temperaturoptimierungsprozesses ist in Bild 6 schematisch angegeben.

Schon seit längerem wird in Zusammenarbeit von ZIB und Klinikum Rudolf-Virchow an der Softwareentwicklung für die Hyperthermie-Planung gearbeitet, teilweise gefördert durch die Deutsche Krebshilfe. Im Jahr 1990 wurden die Arbeiten für eine modellhafte Hyperthermieplanung abgeschlossen. Dabei werden die Berechnungen der Leistungs- und Temperaturverteilung für räumlich zweidimensionale Modelle durchgeführt. Eine entsprechende Publikation wird in Kürze erscheinen. Daneben wurde begonnen, Verfahren zu entwickeln, die es erlauben, auch für den 3-D-Fall eine Leistungsverteilung innerhalb "vernünftiger" Rechenzeiten zu berechnen. Basierend auf der VSIE-Methode (Volume Surface Integral Equation) konnten erste

Codes entwickelt und erfolgreich eingesetzt werden. Um die Forschung und Entwicklung auf dem Gebiet der Krebstherapie zu verstärken, wurde bei der Deutschen Forschungsgemeinschaft ein Projekt-Antrag gestellt. Dem Antrag wurde inzwischen positiv entsprochen, so daß die Arbeiten 1991 intensiviert werden können.

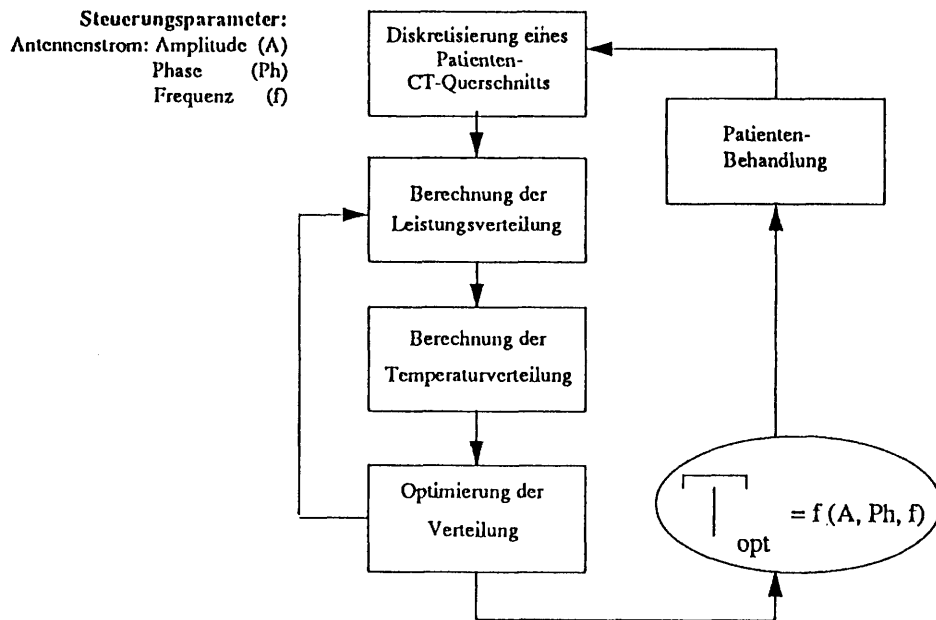


Abbildung 6: Hyperthermieplanung: Prinzipskizze

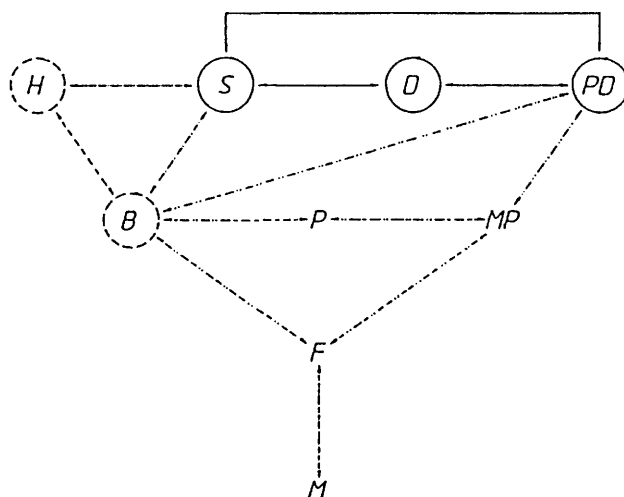
Numerische Simulation von epidemiologischen AIDS-Modellen

U. Nowak, U. Pöhle, P. Deuflhard

Kooperation: J. Weyer, B. Schmidt (Mathematisches Institut, Universität Köln)

Dieses Projekt wird vom ZIB in Kooperation mit der Universität Köln durchgeführt. Verantwortlich für die Modellierung ist J. Weyer, der zugleich ein Zuse-Fellowship innehat. Der Beitrag des ZIB bezieht sich im wesentlichen auf vielfältige Unterstützung bei der Simulation dieser Modelle. Der zugrundeliegende Sachverhalt wird in vereinfachter Form in Abbildung 7 dargestellt als Soziogramm der relevanten Risikogruppen. Dabei werden jeweils 5 Infektionsstadien unterschieden. Um praxisbezogene Aussagen treffen zu können, ist zusätzlich eine Unterteilung in 50 bzw. 20 Altersklassen vorzunehmen. Durch diese subtile Modellierung der AIDS-Ausbreitung entsteht ein System von $n = 1650$ gewöhnlichen, jedoch steifen Differentialgleichungen.

Im Verlauf der Kooperation konnte die Komplexität der Problemlösung in mehreren Schritten drastisch reduziert werden. Im Berichtszeitraum wurden die Sparsing-Techniken (Preprint SC 90-19) weiter verfeinert sowie die analytische Jacobi-Matrix generiert. Dadurch kann ein Simulationslauf nun innerhalb weniger Minuten auf einer Standard-Workstation durchgeführt werden - während zu Beginn der Kooperation Rechenzeiten von ca. einer Stunde auf dem Supercomputer des ZIB notwendig waren. Nun erst ist es möglich, umfangreiche Parameterstudien durchzuführen, um Wirkung und Wichtigkeit etwaiger Änderungen im Sexualverhalten, der demographischen Entwicklung oder des Krankheitsverlaufs beurteilen zu können. Erste gemeinsame Publikationen werden zu Beginn des Jahres 1991 erfolgen. Eine Illustration des bisherigen Kooperationsablaufes findet sich vorab in dem Festvortrag anlässlich Zuse's 80. Geburtstag (Technical Report TR 90-13).



- | | | | |
|------|-------------------------------------|------|------------------------------------|
| H = | homosexuelle Männer | P = | Prostituierte ohne Drogenkonsum |
| S = | männliche Beschaffungsprostituierte | MP = | Männer mit Prostituiertenkontakten |
| D = | i. V. Drogenabhängige | F = | heterosexuelle Frauen |
| PD = | weibliche Beschaffungsprostituierte | M = | heterosexuelle Männer |
| B = | bisexuelle Männer | | |

Abbildung 7: Soziogramm der Risikogruppen bei AIDS-Ausbreitung

Effiziente Berechnung der Durchbruchsspannung bei Hochleistungsbauelementen

R. Kornhuber, R. Roitzsch

Kooperation: W. Gerlach, E. Falck, W. Feiler (TU Berlin, Institut für Werkstoffe der Elektrotechnik)

Hochleistungsbauelemente werden zur Schaltung leistungsstarker Elektromotoren beispielsweise in Elektro-Lokomotiven oder Straßenbahnen, aber auch zur Regelung des Zündvorgangs bei Verbrennungsmotoren eingesetzt. Um diese Bauteile hinsichtlich der Durchbruchsspannung zu optimieren, ist eine effiziente numerische Simulation des physikalischen Verhaltens erforderlich. Mathematisch führt die Berechnung der Durchbruchsspannung auf ein zweiseitiges Hindernisproblem.

Vor Aufnahme der Kooperation im April 1990 wurden die notwendigen Simulationen auf der Basis von traditionellen Finite Differenzen-Methoden durchgeführt, was eine große Anzahl von Unbekannten sowie entsprechend großen Speicherbedarf und lange Rechenzeiten zur Folge hatte. Folglich mußten SuperComputer (CRAY X-MP) oder Mainframes benutzt werden, was wiederum auf lange Antwortzeiten bis zu 8 Stunden führte.

Auf der Basis vorhandener Werkzeuge, insbesondere der Datenstrukturen aus dem Programm KASKADE, wurde ein neuer adaptiver Zugang zur Behandlung von Hindernisproblemen entwickelt (Preprint SC 90-10). Den bei der speziellen Anwendung auf Hochleistungsbauelementen auftretenden Gesichtspunkten wurde durch eine geeignete Verfeinerungsstrategie und ein spezielles Programm zur Generierung der Ausgangstriangulierung Rechnung getragen (Technical Report TR 90-9). Abbildung 8 zeigt ein solches Ausgangsgitter, während das nächste Bild die Äquipotentiallinien der zugehörigen Lösung zeigt. Nach 9 Verfeinerungsstufen ist automatisch die in Abbildung 10 gezeigte Triangulierung entstanden, welche nun auf eine hinreichend genaue Lösung führt, die in Abbildung 11 zu sehen ist. Durch Konzentration der Gitterpunkte nur in den wichtigen Bereichen konnte die Anzahl der Unbekannten auf weniger als ein Zehntel gesenkt werden. Damit wurden Antwortzeiten an einer Workstation (SUN Sparc 1+) im Minutenbereich möglich.

Die vorliegende Version läßt sich auf der Basis tieferliegender mathematischer Ergebnisse sicher noch verbessern (siehe Grundlagenprojekt: "Adaptive Verfahren zur Lösung freier Randwertprobleme"). Diese Ergebnisse sollen im kommenden Berichtsjahr bereitgestellt und angewandt werden.

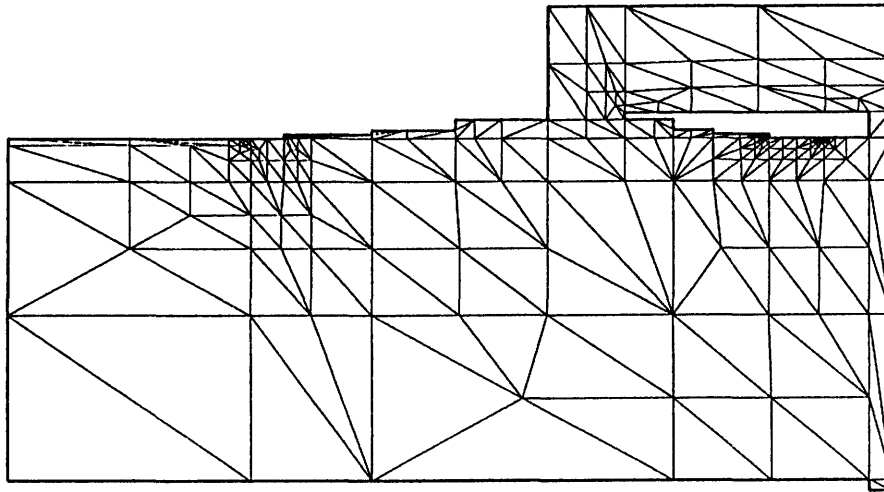


Abbildung 8: Halbautomatisch erzeugte Ausgangstriangulierung

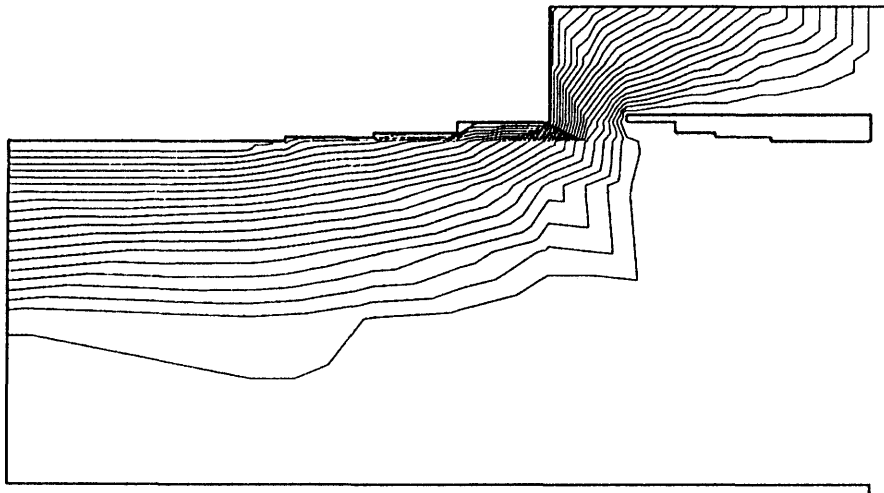


Abbildung 9: Äquipotentiallinien der zugehörigen Näherungslösung

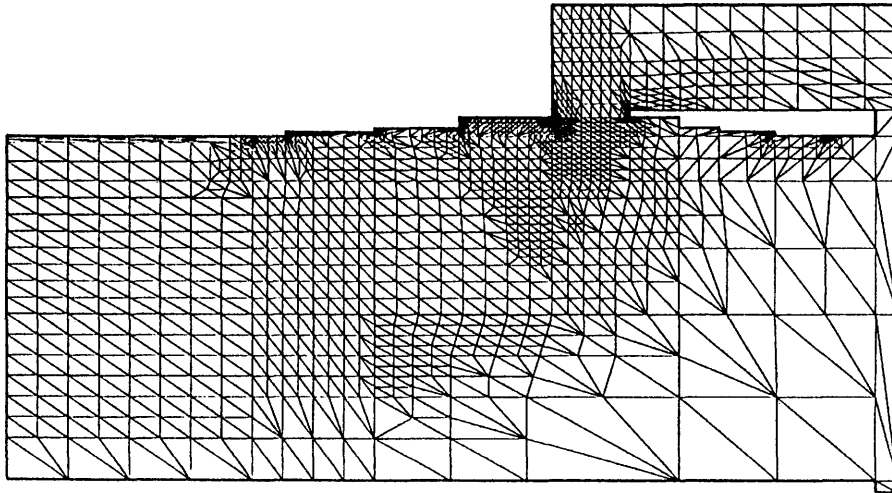


Abbildung 10: Adaptiv verfeinerte Triangulierung

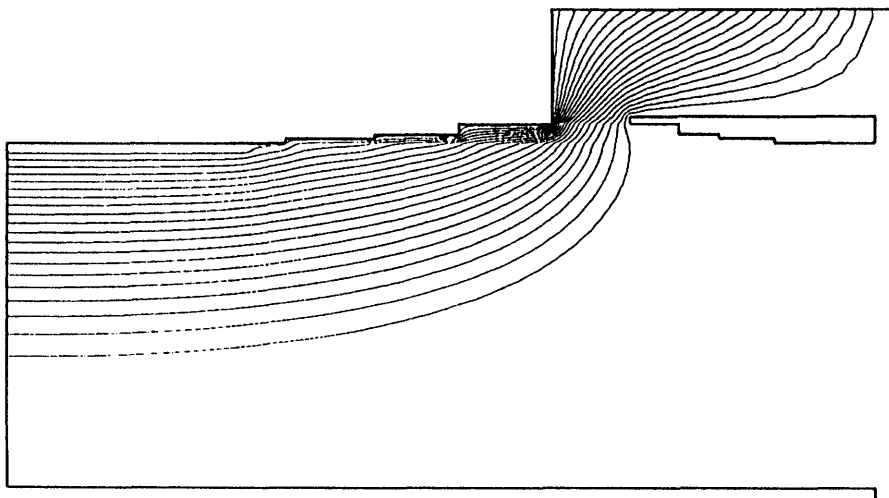


Abbildung 11: Äquipotentiallinien der zugehörigen Näherungslösung

Entwicklung effektiver Algorithmen zur numerischen Simulation von Verbrennungsproblemen

P. Deuflhard, A. Walter, U. Nowak, L. Weimann, J. Lang

Kooperation: U. Maas, J. Warnatz (Institut für Technische Verbrennung,
Universität Stuttgart)

Im Rahmen der Arbeitsgemeinschaft TECFLAM (Vorhaben 1) wurde eine Reihe von Grundlagenentwicklungen vorangetrieben, die jedoch noch keine direkte Auswirkung auf die Simulation in Verbrennungsprozessen haben - zumindest über das bisher Erreichte hinaus (s. Preprint SC 90-7). Die Grundlagenprojekte "Adaptive Multilevel-Diskretisierung zeitabhängiger partieller Differentialgleichungen" (Bornemann / Deuflhard) sowie "Unvollständige LU-Zerlegung auf lokal strukturierten Netzen" (Kornhuber / Roitzsch) sind jedoch so gut vorangekommen, daß in absehbarer Zeit mit wirkungsvollen Verbesserungen im wichtigen Problemkreis Verbrennung zu rechnen ist.

Im Berichtszeitraum wurden im Grundlagenprojekt "Iterationsverfahren für große lineare unsymmetrische Gleichungssysteme" auf der Basis von SC 90-5 entwickelte iterative Löser als eigenständiger FORTRAN-Code bereitgestellt (TR 90-11). Er steht interessierten Benutzern über die CodeLib zur Verfügung.

Im Berichtszeitraum wurde der Algorithmus in ein an der Universität Stuttgart geschriebenes Programmpaket integriert. Damit war es möglich, die bei der Diskretisierung von Strömungen mit Verbrennungsprozessen auftretenden großen geblockten unsymmetrischen Gleichungssysteme zu lösen. In den numerischen Tests wurde festgestellt, daß die Frage der Vorkonditionierung von Sekantenverfahren noch genauer untersucht werden sollte. Die dabei erzielten Resultate werden im kommenden Berichtsjahr dokumentiert und zu Modifikationen im Verfahren führen.

Diskrete Galerkin-Methoden in der Anwendung

Jörg Ackermann, Michael Wulkow

Mathematische Modellierung und Bestimmung optimaler Reaktionsbedingungen der Lösungspolymerisation von Acrylnitril bis zu hohen Umsätzen

Kooperation: Wolfgang Dietzel (Teltow, Institut für Polymerenchemie, Akademie der Wissenschaften)

Polyacrylnitril ist u.a. ein Ausgangspunkt für die Faserherstellung (Wolpryla, 1990). Es wurden verschiedene Reaktionssysteme zur Beschreibung der Lösungspolymerisation von Acrylnitril mit MACRON simuliert. Die Ergebnisse wurden mit den Rechnungen von W. Dietzel (direkte

Integration der Momente) verglichen und sind in bezug auf die Umsätze der chemischen Stoffe, Momente der Polymere und durchschnittliche Kettenlängen identisch (innerhalb der jeweils geforderten numerischen Genauigkeit). Die mit MACRON berechneten Polymerverteilungen sind für kurze Reaktionszeiten erstaunlicherweise auch identisch mit den Verteilungen, die sich aus der stark vereinfachenden Methode von L.H. Tung (1981) ergeben. Erst für große Zeiten ($T \approx 72000$ sec) ergeben sich signifikante Abweichungen zwischen den mit verschiedenen Methoden berechneten Verteilungen. Dabei kann ein Versagen der Galerkin Methode aufgrund der der Schulz-Flory Verteilung ähnelnden auftretenden Verteilungen und der berechneten kleinen Projektionsfehler ausgeschlossen werden.

Simulation des Rußwachstums in Flammen

Kooperation: Heidi Böhm (Institut für technische Verbrennung, Universität Stuttgart)

Zur Beschreibung des Rußwachstums sind komplizierte Reaktionssysteme nötig. Das von H. Böhm aufgestellte Reaktionssystem enthält 450 Vorreaktionen mit 60 Spezies bevor das eigentliche Rußwachstum beginnt. Diese Reaktionen sind außerdem teilweise in thermodynamischem Gleichgewicht, so daß die Berücksichtigung von thermodynamischen Effekten notwendig wird. Erste Simulationen dieses Reaktionssystems inklusive komplizierter zyklischer Rußwachstumsreaktionen wurden beim Druck $p = 0.12$ atm und der Temperatur 2000 K durchgeführt. Dabei wurden Diffusionseffekte vollständig vernachlässigt. Die Simulation zeigt, daß nach einer kurzen Initialisierungsphase sowohl die Rußteilchenkonzentration als auch die Konzentration der für das Rußwachstum verantwortlichen chemische Spezies (C_2H_2) konstant bleibt. Die Größe der Rußteilchen wächst dementsprechend kontinuierlich. Dieses Ergebnis legt die Vermutung nahe, daß die mit der "lumping" Methode berechneten zeitlich konstanten Rußteilchengrößen methodisch bedingt sind.

Simulation von Plasmen zur Ätzung von Mikrostrukturen

Kooperation: Peter Hoffmann (Fraunhofer Gesellschaft, Institut für Mikrostrukturtechnik, Berlin)

Zur Ätzung besonders anisotroper Profile bei der Herstellung von Mikroelementen werden Ionen aus Plasmen benutzt. Für die Anwendbarkeit dieser Trockenätztechnik ist die Plasmadiagnostik von entscheidender Wichtigkeit. Die bei solchen Prozessen auftretenden Effekte der Ablagerung und Abätzung von Schichten beeinflussen die Ionenkonzentration über dem "wafer" und führen zu Differentialgleichungssystemen, wie sie auch in der makromolekularen Kinetik auftreten. Es wurden bisher Simulationen eines CF_4/O_2 Plasma entsprechend des Modells von I.C. Plumb und K.R. Ryan (1986) durchgeführt mit identischen Ergebnissen. Weitere Simulationen, insbesondere im Hinblick auf Wandeffekte und die Identifikation von Reaktionskonstanten (PARKIN), sind geplant.

Symbolische Modellierung chemischer Reaktionssysteme

H. Melenk

Kooperation: J. Warnatz, C. Chevalier
(Institut für Technische Verbrennung, Universität Stuttgart)

Bei der numerischen Simulation technischer Verbrennungsvorgänge zwecks Optimierung treten mit wachsender Verfeinerung der zu Grunde gelegten Modelle immer mehr mathematisch zu berücksichtigende Komponenten auf, so daß es zunehmend schwieriger wird, die Modellgleichungen fehlerfrei von Hand aufzustellen. Andererseits ist es mit symbolischen Methoden gut möglich, diesen Vorgang zu automatisieren.

Das im Vorjahr begonnene Programmpaket für die automatische Erstellung von Reaktionssystemen der motorischen Verbrennung wurde in einer ersten Version fertiggestellt. Ausgehend von den molekularen Graphen der an der Verbrennung beteiligten chemischen Substanzen werden auf Grund der chemischen Grundregeln Reaktionsprodukte ermittelt und die entsprechenden Reaktionsgleichungen mit ihren kinetischen Parametern ausgewiesen. Die "erzeugten" Substanzen werden dann in einem rekursiven Prozeß der Deduktion erneut zugeführt, so daß die Gesamtheit der aus der "Eingabemischung" entstehenden Reaktionsketten errechnet wird.

Das Paket wurde probeweise für einfache Brennstoffmischungen angesetzt, für die experimentelle Daten vorliegen (SC 90-8). Wie erwartet sind die automatisch generierten Systeme den von Hand erstellten deutlich überlegen: die gemessenen Daten werden in der numerischen Simulation genauer nachgebildet. Letztlich soll das System für Bereiche eingesetzt werden, die aufgrund ihrer Komplexität einer auf Handarbeit gegründeten mathematischen Simulation nicht mehr zugänglich sind.

Das Programmpaket wurde inzwischen auch an die Lawrence Livermore Laboratories (Californien) weitergegeben.

Support für symbolisches Rechnen im Hochleistungsbereich

W. Neun, H. Melenk

Kooperation: CRAY Research Inc, DEC, DG, CDC, IBM

Die symbolischen Rechenverfahren benötigen generell erhebliche Ressourcen an CPU-Zeit und Speicherplatz. Dies gilt besonders für die Algorithmen der symbolischen Mathematik (Computer-Algebra, Formelmanipulation), aber auch für komplexe Expertensysteme, z.B. für die Modellierung technischer Systeme. Im ZIB wird als Basis für derartige Anwendungen das Programmiersystem Portable Standard LISP ("PSL") eingesetzt, dessen Entwicklung Anfang der achtziger Jahre an der Universität Utah begann. PSL zeichnet sich im Vergleich mit anderen LISP

Dialekten vor allem durch seine hohe Ausführungsgeschwindigkeit aus. PSL baut auf einem in LISP selbst codierten Compiler auf, dessen Code-Generierung in einem separaten makro-orientierten Modul zusammengefaßt ist. Bei Portierung von PSL auf eine neue Rechnerarchitektur muß dieses Modul ersetzt werden. Im ZIB ist es gelungen, Codegenerierer für mehrere moderne Architekturen zu erstellen, die durch besondere Berücksichtigung der jeweiligen architekturellen Besonderheiten die Leistungsfähigkeit der Prozessoren voll ausschöpfen. Es ist das Ziel, qualitativ hochwertige PSL-Implementierungen auf möglichst vielen wichtigen Rechnerarchitekturen bereitzustellen; nicht zuletzt wegen der Unterstützung der Rechnerhersteller ist das ZIB diesem Ziel im Bereich der Superrechner und der leistungsstarken Workstations näher gekommen. PSL ist beim ZIB jetzt verfügbar für:

386i: IBM PS/2, AT386 (MS/DOS, UNIX), SUN 386i
680x0: SUN 3
SPARC: SUN4
MIPS: DEC Series 3000/5000 Silicon Graphics IRIS
CDC 6000 Series, Stardent
MC88000: Data General AViiON, et al.
CONVEX: C100, C200
CRAY Prozessoren: CRAY 1, X-MP, Y-MP, CRAY 2

Eine Implementierung für IBM RS6000 ist in Arbeit.

Die qualitative und quantitative Verbreiterung der PSL-Basis kommt primär dem System REDUCE zugute; es gibt jedoch noch weitere symbolische Softwarepakete, die auf PSL aufbauen und die somit auch von der Arbeit des ZIB profitieren.

Implementierung paralleler adaptiver Algorithmen mit objektorientierten Sprachen

G. Maierhöfer, G. Skorobohatyj, M. Grammel, U. Nowak

In den Berichtszeitraum fällt die Entwicklung einer parallelen Version des adaptiven Algorithmus PDEX1M. Dieser Algorithmus zur Lösung von parabolischen Anfangsrandwertproblemen in einer Raumdimension basiert auf der klassischen Linienmethode mit Hilfe von Finiten Differenzen. Die Zeitdiskretisierung und Fehlerkontrolle erfolgt mit einer erweiterten Version des steifen Integrators EUSIM, während zur Kontrolle der Ortsdiskretisierung mehrere, zusätzlich lokal adaptive, Gitter verwendet werden. Eine Analyse der auftretenden Datenabhängigkeiten, ausführliche Zeitmessungen und die bereits mit der Standardversion von EUSIM gemachten Erfahrungen (Technical Report TR 90-2) lassen nur

einige wenige Parallelisierungsschemata sinnvoll erscheinen. Unter diesen hat sich schließlich eines mit 4 Prozessoren als optimal herausgestellt. Zeitmessungen mit den in Occam2 implementierten sequentiellen und parallelen Versionen ergaben einen Beschleunigungsfaktor von 2.5 bis 2.8. Die Occam2-Programme wurden nach C portiert und an das Transputer-Betriebssystem Helios-SUN angepaßt.

Die Implementierung des Verfahrens TRAPEX (Extrapolationsverfahren zur numerischen Berechnung von Integralen) in der parallelen objektorientierten Programmiersprache POOL-T wurde modifiziert, um jene stärker hinsichtlich der objektorientierten Sichtweise zu gliedern. Anhand des zugrundegelegten objektorientierten Entwurfes wurden auf diese Weise die Einschränkungen für die Implementierung, welche von der Sprache POOL-T erzwungen werden, aufgezeigt (POOL-T verwendet einen Modulmechanismus anstelle einer Klassenhierarchiegliederung, die mit einem Vererbungsmechanismus verbunden ist). Die Einschränkungen der Sprache POOL-T sowie das grundsätzliche Ergebnis, daß der objektorientierte Ansatz die Einführung der Parallelität besonders unterstützt, wurden im Technical Report TR 90-5 vorgelegt.

Für die Kernroutine NUMASS des Programmsystems KASKADE (adaptives Multilevel-Verfahren mit Finiten Elementen) wurde ein Farming-Modell auf Transputern unter Helios implementiert. Es wurden Zeitmessungen zum Message-Passing über Helios-Streams durchgeführt. Ausgehend von dem vom ZIB-Fellow Ch. Lengauer vorgeschlagenen systolischen Ansatz für NUMASS wurden Voruntersuchungen zur Simulation dieses Ansatzes auf Transputern durchgeführt.

Installation einer Transputer-basierten Entwicklungsumgebung

G. Maierhöfer

Um für den Entwurf und die Implementierung paralleler adaptiver Algorithmen eine adäquate Entwicklungsumgebung zur Verfügung zu haben, wurden im Berichtszeitraum das verteilte Betriebssystem Helios und die Entwicklungsumgebung Multitool (jeweils für SUN und PC) beschafft und auf der jeweiligen Architektur installiert. Dazu mußte auf der SUN die Version 4.0.3 des SUN-OS eingefahren und zeitlich aufwendige Anpassungen (Erstellen von Scriptdateien, Systemanpassungen) durchgeführt werden. Es stehen jetzt jeweils in der SUN- und PC-Umgebung die Sprachen Fortran 77, C und Occam2 zur Verfügung; in der PC-Umgebung auch der Crosscompiler ParC.

Parallelisierung einer Anwendung

G. Maierhöfer,

Kooperation: Dr. W. Kick (MAN).

Im Berichtszeitraum begann eine Zusammenarbeit mit MAN. Es soll ein Programm von MAN (Fortran 77) zur Simulation der Bewegungsdynamik von Mehrkörpersystemen auf Parallelisierungsmöglichkeiten untersucht werden und eine Portierung auf ein Transputersystem erfolgen. Dabei sollen zur Leistungssteigerung im ZIB schon parallelisierte Algorithmen eingebaut werden. Derzeit wird die IBM-PC Implementierung auf ein Helios-PC basiertes System portiert.

Graphik-Software

O. Paetsch, J. Langendorf, H. Jaedicke

Die Arbeiten an und um GRAZIL, einem Programmpaket zur 2D- 3D-Darstellung von Kurven und Funktionsverläufen, wurden intensiv fortgeführt. Im 3D-Bereich wurden die Darstellungsmöglichkeiten wesentlich erweitert. Die Implementierung von GRAZIL-3D wurde im Berichtszeitraum von GKS (mit einer kleinen darüberliegenden 3D-Schicht) auf den im 3D zukunftsträgigeren Standard PHIGS umgestellt.

Im 2D-Bereich wurde das Programmpaket GRAZIL in der BAM installiert. Dabei wurde GRAZIL an die VAX-Rechner der BAM (VMS) und an die dortige GKS-Implementierung angepaßt. Damit wird das am ZIB häufig genutzte GRAZIL erstmals auch außerhalb des Hauses genutzt.

Für die graphische Darstellung von KASKADE wurde die Möglichkeit geschaffen, Lösungen als 3D-Darstellungen mit Hidden Surface Removal auszugeben.

AGIL (The Adaptable Graphical Interface Layer)

H. C. Hege, R. Wunderling

Kooperation: H. Stüben (Institut für Theoretische Physik, FU Berlin)

Neben 'state-of-the-art'-Visualisierungssoftware, wie etwa dem auch am ZIB verwendeten Environment apE, besteht weiterhin Bedarf an Visualisierungsumgebungen, die auf genormten funktionalen Grafikstandards basieren. Die Defizite (etwa mangelnde 3-D-Fähigkeiten, schwierige

Integration in die X-Window-Welt) und beschränkten Entwicklungsmöglichkeiten von GKS ließen die Wahl für die Basis eines neuen Visualisierungssystems (AGIL) auf PHIGS mit den noch in der Normung befindlichen Erweiterungen PHIGS+ und PEX fallen.

Nach Beschaffung von PHIGS-Lizenzen für die SUN-Workstations des ZIB wurde zum Kennenlernen von PHIGS sowie zur Unterstützung der Anforderungsanalyse im März ein Anwendungsprojekt (Visualisierung von Supercomputerdaten aus quantenfeldtheoretischen Rechnungen) begonnen. Als wesentliche Anforderungen ergaben sich

- Portabilität innerhalb der UNIX-Welt
- Netzwerkfähigkeit auf Basis des X-Protokolls und dessen Erweiterung PEX sowie Standard-Unix-Mechanismen wie etwa Remote-Shell
- Unterstützung verschiedener Arbeitsweisen (Postprocessing, Tracking und Steering)
- Bereitstellung von Basisfunktionen, die heutigen Ansprüchen genügen (etwa 3-D-Funktionalität, Beleuchtungsmodelle)
- Bereitstellung von universellen, höheren Grafikfunktionen
- Erweiterbarkeit der grafischen Funktionalität über eine definierte Programmierschnittstelle
- Integration von Applikationen über eine definierte Datenschnittstelle einschließlich Steuersprache
- automatische Dokumentation der Bilderstellung und Möglichkeiten zur Bilddokumentation
- Ausgabe der Bilder in standardisierten, verbreiteten Formaten
- Ausnutzung der speziellen Grafikfähigkeiten moderner Workstations.

Auf dieser Grundlage erfolgte die Spezifikation einer Datenschnittstelle zur Anbindung existierender Applikationen sowie einer Programmierschnittstelle zur Erweiterung der grafischen Fähigkeiten von AGIL. Implementiert wurden bisher der Parser und Interpreter, allgemeine Verwaltungsroutinen sowie höhere Grafikfunktionen (Darstellung beliebiger Gitternetze und Vektor-Gitterfunktionen, Kalottenmodelle). Die Integration in das X-Window-System wird erst mit Abschluß der Normung von PEX und der Verfügbarkeit einer PEX-Implementation möglich sein. Die Netzwerkfähigkeit beschränkt sich zur Zeit noch auf die Verwendung von Remote-Shell- und Remote-Procedure-Call-Mechanismen zur Übertragung von Datenströmen.

Visualisierung von Strömungsdaten

H. C. Hege, O. Paetsch

Kooperation: W. Baumann, E. Gürgey (Hermann-Föttinger-Institut für Thermo- und Fluidodynamik, TU Berlin)

Die Visualisierung komplexer Daten erfordert neben dem Einsatz konventioneller, auf Standards (etwa GKS oder PHIGS) beruhender Grafik-Systeme, auch die Verwendung modernerer Visualisierungssysteme. In dem Pilotprojekt sollen Möglichkeiten und Grenzen eines solchen Systems anhand von Darstellungsaufgaben aus dem Gebiet Strömungsmechanik erprobt werden. Dabei sind auf einem Supercomputer berechnete Strömungsdaten, also 2- und 3-dimensionale, zeitlich veränderliche Skalar- und Vektorfelder, auf Workstations darzustellen. Zu Dokumentations- und Präsentationszwecken sollen Strömungsverläufe auch auf (Video-)Film aufgezeichnet werden.

Als Visualisierungssoftware wurde das Programmpaket "apE" (Animation Production Environment) vom Ohio Supercomputer Graphics Project des Ohio Supercomputer Centers ausgewählt. Diese Software läuft auf einer Vielzahl von UNIX-Workstations, weist einen großen Leistungsumfang auf und ist sehr kostengünstig als Quellcode erhältlich. Sie erscheint somit für viele Institute, mit denen das ZIB zusammenarbeitet, interessant.

Die vollständige Version von apE 2.0 (frühere Versionen kamen nicht in Betracht) war erst gegen Ende des Jahres verfügbar. Im davor liegenden Zeitraum wurden anhand einer noch instabilen, für wirkliche Produktion noch ungeeigneten Beta-Testversion erste Erfahrungen gewonnen. So wurde klar, daß das den Strömungsdaten zugrundeliegende Gitter von der derzeitigen Software nicht verarbeitet werden kann. Derzeit wird zusammen mit dem Ohio Supercomputer Center geprüft, ob Änderungen an den Gitterdaten oder an apE dieses Problem beheben können.

Die technische Durchführbarkeit von Videoaufzeichnungen außer Haus wie auch die Möglichkeiten und Voraussetzungen zum Betrieb einer eigenen Aufzeichnungsanlage wurden untersucht.

Elektronische Softwarebibliothek eLib

J. Lügger, W. Dalitz, B. Kirkorowicz

Kooperation: R. Boisvert (National Institute of Standards and Technology - NIST)
Center for Computing and Applied Mathematics, Gaithersburgh, USA
E. Grosse (AT&T Bell Labs, New Jersey, USA)
A.C. Hearn (The RAND Corporation, Santa Monica, USA)
Fachgruppe "Numerische Software" von GAMM, GI und DMV

Das Projekt umfaßt die Entwicklung und den Einsatz einer "electronic Software Library - eLib" für die Weitergabe mathematischer Algorithmen und Softwaresystemen aus allen Bereichen des Wissenschaftlichen Rechnens.

Seit April wurde die eLib in einer Pilotversion 0.9 freigegeben. Sie bot einen on-Line Dienst mit nach dem GAMS-Index (des NIST) klassifizierter Software, einen off-Line Dienst für Anfragen per elektronischer Mail, einen e-Mail Dienst im Rahmen des on-Line Dienstes sowie einen Fernkopier Dienst für Algorithmen aus den USA. In dieser Version gab das ZIB insbesondere auch eigene Software (CodeLib) weiter. Die Version 1.0 der eLib - Anfang Juni freigegeben - enthielt ca. 650 Software-Moduln, die nach dem GAMS-Index klassifiziert waren.

Mit der eLib wurde erstmals ein interaktiver Zugriff ("hot link") auf die international bekannte NetLib von J.J. Dongarra und E. Grosse realisiert. Gleichzeitig wurde die NetLib als eigenständiger Mailer am ZIB installiert. Sie bietet mit ihren über 5000 "Scientific Computing" Algorithmen einen soliden Grundstock an öffentlich verfügbarer mathematischer Software.

Nach demselben Muster wurde die RedLib, i.e. die Reduce-Netlib von A.C. Hearn, als eigenständiger Knoten am ZIB aufgebaut. Sie kann - ab Dezember - ebenfalls interaktiv über die eLib (Version 1.1) abgefragt werden. Die RedLib enthält ca. 400 Module und Dokumente aus der Computeralgebra.

Die eLib kann aus praktisch allen Wissenschaftsnetzen angesprochen werden, insbesondere

im Dialog: via Datex-P (X.25 bzw. WIN), Internet, Telefon-Modem und
per e-Mail : via X.400 (DFN), Internet, EARN/BITNET, uucp etc.

Die Freigabe der eLib erfolgte schrittweise an dedizierte Benutzergruppen: zunächst hausintern (Januar), dann im Berliner Netz des ZIB (April), dann in der Fachgruppe "Numerische Software" (Juni) und bei weiteren ausgewählten Kooperationspartnern des ZIB (August und September).

Die Nutzung der eLib wurde beginnend im September gemessen. Bis Ende Dezember wurden gezählt:

eLib:	1179 Zugriffe, davon	921 interaktiv und	258 per e-Mail
NetLib:	1481 Zugriffe, davon	1115 interaktiv und	366 per e-Mail

Die Weiterentwicklung der eLib erfolgt auf der Basis erster Einsatzerfahrungen insbesondere in Kooperation mit der Fachgruppe "Numerische Software". Auf Anforderung dieser Fachgruppe wurde z.B. eine erste Vorstufe des Conferencing in der Art des NaNet-Verteilers von G. Golub entwickelt. In Vorbereitung ist die Version 2.0 zur Freigabe im europäischen und im amerikanischen Raum.

Vertrieb von REDUCE und PSL

W. Neun, H. Melenk

Kooperation: A.C. Hearn (RAND Corp / USA)

Bereits im Vorjahr waren die rechtlichen Grundlagen für den weltweiten Vertrieb von REDUCE und PSL gelegt worden. Die entsprechenden Aktivitäten liefen dann bereits an und haben, nicht zuletzt wegen der neuen PSL-Implementierungen des ZIB, im Berichtsjahr erheblich zugenommen. Insgesamt wurden über 70 Pakete direkt (gegen Gebühr) weitergegeben. Seit eine Version für die 386-Rechner unter MS-DOS angeboten wird, nimmt diese zahlenmäßig den breitesten Raum ein. Für diese Version hat das ZIB auch einen Agenturvertrag mit CALCODE (Venice, CA) für die direkte Belieferung des amerikanischen und ostasiatischen Marktes abgeschlossen. Eine PSL-Sublizenz für die Unterstützung des Algebra-Systems SHEEP (General Relativity) wurde an das Queen Mary and Westfield College, London, vergeben. Weitere Agenturkontrakte sind in Verhandlung. Mit der Öffnung der Grenzen in Richtung Osten war es auch erstmalig möglich, mehrere Versionen in die neuen Bundesländer und in Länder des RGW zu senden. Auch hier ist die MS-DOS Version auf besonders großes Interesse gestoßen.

Für den Vertrieb von REDUCE und PSL werden zwar Gebühren erhoben (und Lizenzgebühren an Rand und University of Utah abgeführt), jedoch sind die Sätze so niedrig gehalten daß sie kein Hindernis für die Verbreitung der Produkte darstellen. Diese Preispolitik hat eine lange Tradition — Dr. Hearn hat früher REDUCE ganz ohne Kosten weitergegeben. Die Folge davon ist ein sehr großer Verbreitungsgrad von REDUCE, der seinerseits zu qualitativen Erweiterungen des Systems durch von den Anwendern beigesteuerte Pakete führt. Auch direkte fachliche Kontakte bahnen sich auf diesem Wege in wachsendem Maße an.

Europäische Normung von LISP

W. Neun

Unterstützt von der Europäischen Gemeinschaft wird von einer Arbeitsgruppe mit Mitgliedern aus vielen europäischen Ländern an der internationalen Normung der Programmiersprache LISP durch die ISO mitgearbeitet und ein eigener Normungsvorschlag "EuLISP" wurde unterbreitet. Die Definition eines effizienten, kleinen Systems ist eine der Hauptideen des Dialekts EuLISP. Der amerikanischen Normvorschlag "Common LISP" ist dagegen sehr mächtig, aber auch sehr umfangreich und ist in der Verarbeitung nicht von gleicher Effizienz wie EuLISP. Zur Zeit existieren Prototypen von EuLISP im Einsatz sowohl in der Softwareentwicklung als auch in der Lehre bei mehreren Universitäten. Die Prototypen wurden von britischen Universitäten entwickelt (Bath, Edinburgh) und haben eine gute Stabilität und Verarbeitungsgeschwindigkeit erreicht, es existieren bereits Compiler. Ein Einsatz dieser Prototypen, auch im ZIB, ist für das nächste Jahr vorgesehen.

Museumsdokumentation

C. Saro-Lüdecke

Kooperation: Staatliche Museen Preußischer Kulturbesitz

Zwischen dem ZIB und dem Institut für Museumskunde der Staatlichen Museen Preußischer Kulturbesitz (IfM) besteht seit 1981 eine vertragliche Zusammenarbeit. Im Rahmen dieser Kooperation wurden bisher verschiedene Projekte zum Computer-Einsatz im Museumsbereich (besonders bei der Inventarisierung) durchgeführt. Als Basissoftware wurde dafür das von der britischen MDA (Museum Documentation Association) speziell für den Museumsbedarf entwickelte Programmsystem GOS übernommen.

Im Berichtszeitraum wurde die PC-Version des GOS-Programms erheblich weiterentwickelt. Sie übertrifft inzwischen im Funktionsumfang in vielen Punkten die ursprüngliche Großrechnerversion erheblich.

Besonders die Benutzerschnittstelle wurde durch eine Menüführung mit Pull-Down-Menüs, Dialogboxen und integrierter (kontext-sensitiver) Hilfe Funktion (in weitgehender Übereinstimmung mit dem SAA-Standard von IBM) wesentlich verbessert. Durch eine interaktive Auswahl der entsprechenden Parameter lassen sich auch komplexere Anwendungen (wie z.B. systematisches Retrieval mit Hilfe einer Thesaurus-Datei, Erzeugung hierarchisch strukturierter Register) ohne besondere GOS-Vorkenntnisse bedienen.

Das komplette PC-GOS Programmsystem ist mit identischem Funktionsumfang auf allen MS-DOS Rechnern sowie auf verschiedenen UNIX-Systemen lauffähig.

Durch zwei jeweils einwöchige GOS-Kurse für Mitarbeiter der Regionalen Einrichtungen des Museumswesens konnten die Voraussetzungen für eine über den bisherigen Piloteinsatz hinausgehende Verbreitung von PC-GOS geschaffen werden. Bei Besuchen in Tübingen und München konnte die relativ einfache Übertragung einiger Projekte der betreffenden Landesstellen für Museumsbetreuung von anderen Programmen auf PC-GOS bei voller Übernahme der bereits erfaßten Daten demonstriert werden.

BERGATE

(Pilotentwicklung eines modularen Transitsystems zur Kopplung von LANs ISO 8802.3 und ISO 8802.4 für das BERKOM-Testnetz)

A. Gavras, K. Jacobsen, M. Vogelsänger, C. Doelter

Leitung: Th. Luckenbach (GMD-FOKUS)

Kooperation : GMD-FOKUS

Im Berichtszeitraum wurden die Entwicklungsarbeiten am BERGATE-Transitsystem (BTS) abgeschlossen und zwei Prototypen auf der Basis von Sun-3/E-Systemen fertiggestellt. Neben der Fähigkeit dieser Systeme, lokale 802.3-Ethernet und 802.4-Token Bus Netze mit MAP und TOP Protokollarchitektur über einen 140 Mbit/s Breitband-ISDN Kanal des BERKOM-Testnetzes miteinander zu verbinden bietet das BERGATE-System

- TCP/IP Routing über das BERKOM-Testnetz
- Endsystemfunktionalität am BERKOM-Testnetz durch Unterstützung von TCP/IP und der zugehörigen Applikationen und von ISO/OSI Protokollen der Schichten 1 - 7
- Endsystemfunktionalität am BERKOM-Testnetz auf der Grundlage von "low-level" System-schnittstellen (llc, mmap) für eigene Protokollentwicklungen für Hochgeschwindigkeitsnetze.

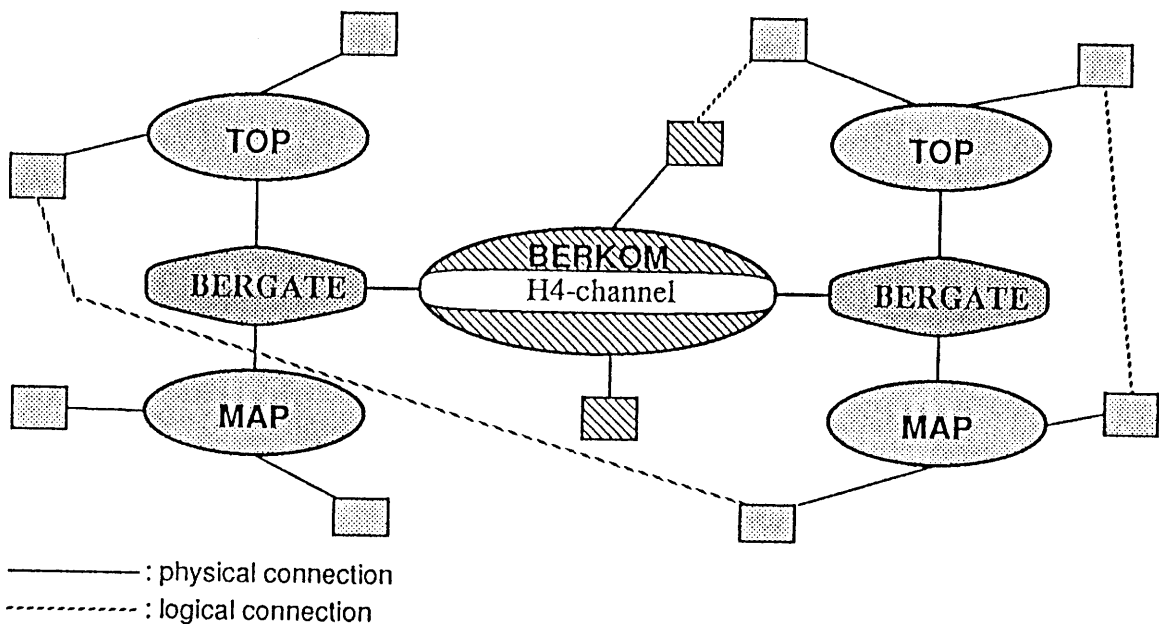


Abbildung 12: BTS - Einsatzbeispiel

Die Prototypen befinden sich derzeit in einer Dauertest-Phase, deren Durchführung u. a. Hinweise auf Möglichkeiten der Durchsatzoptimierung liefern soll und die bei einem geplanten Redesign des Systems berücksichtigt werden. Zu diesem Redesign gehört auch die Realisierung der bisher in Wirewrap-Technik aufgebauten BERKOM-VME-Adapterkarte (PA-Karte) in Multilayer-Technik im eigenen Hause sowie der Einsatz einer zusätzlichen Prozessorkarte mit einem realzeitfähigen Betriebssystem (Wind River Systems Kernel) zur Protokollbearbeitung.

Parallel zu diesen Redesign-Überlegungen wurden die bisherigen BERGATE Hard- und Software-Entwicklungen erfolgreich in ein Sun SPARC-System (SPARCEngine-1/E) portiert sowie an der Kleinserienreifmachung der PA-Karte entscheidend mitgewirkt.

BERMMD (Multimedia-Dokumente im ISDN-B)

K.-D. Engel

Leitung: G. Schürmann (GMD-FOKUS)

Kooperation: GMD-FOKUS

Aufgabe in BERMMD ist es, ein Modell für die verteilte Verarbeitung von multimedialen Informationen (Text, Graphik, Fest- und Bewegtbild, Audio und anwendungsspezifische Typen wie produktdefinierende Daten) in einer Breitbandumgebung unter Berücksichtigung und Beeinflussung von Standardisierungsaktivitäten zu entwickeln. Dazu müssen geeignete Datenstrukturen, Operationen und Komponenten bzw. Dienste für die Unterstützung der verteilten Verarbeitung entwickelt werden. Damit in einer heterogenen Systemumgebung die offene Kommunikation zwischen Kommunikationspartnern ermöglicht wird, müssen künftige Entwicklungen auf internationalen Standards basieren.

Im Berichtszeitraum wurde das sog. BERKOM-Referenzmodell zur Strukturierung verteilter Anwendungen weiterentwickelt. Es definiert einen Rahmen, der Informations- und Datenstrukturprofile, anwendungsorientierte Kommunikationsprofile und Profile für Anwendungsumgebungen klassifiziert. In das Framework, das als interner Bericht verfügbar ist, wurden Administrationsprofile (Directory und Management) und Profile für Realzeitkommunikation integriert. Das Framework basiert auf dem OSI-Basis-Referenzmodell, bereits standardisierten verteilten Anwendungen und Telekommunikationsdiensten und identifiziert eine Reihe von Lücken, in denen bisher keine Lösungen entwickelt wurden. Im Berichtszeitraum wurde dazu ein Bericht, der die Synchronisation bei der Präsentation von Multimedia-Objekten enthält, und ein Vorschlag für eine Audio-Inhaltsarchitektur erarbeitet.

Innerhalb der projektbegleitenden Realisierungsaktivitäten, die den besonderen Anforderungen des Repräsentationstyps Audio Rechnung tragen, wurde die Integration von Audio-Hardware in eine LAN-Umgebung durchgeführt und die Audio-Testumgebung um eine bidirektionale Realzeit-Audio-Kommunikationskomponente ergänzt.

Anwendungen der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM)

J. Gottschewski

Kooperation: W. Müller (BAM)

Mit der BAM existiert seit 1988 ein Kooperationsvertrag. Ziel der Zusammenarbeit ist der effektive Einsatz des Hochleistungsrechners des ZIB für einschlägige Forschungsaufgaben der BAM. Die Kooperation berührt folgende Teilgebiete:

- Sicherstellung angemessener und stabiler Produktionsbedingungen für die Rechenaufträge der BAM
- Laufende Anpassung der technischen Datenkommunikation an den sachlich gebotenen technischen Stand
- Optimierung von Software für Hochleistungsrechner
- Methodische und technische Unterstützung der Endbenutzer in der BAM

Im Rahmen der Kooperation wird ein wissenschaftlicher Mitarbeiter des ZIB für die wissenschaftlich-methodische Unterstützung der Endbenutzer und für die Beantwortung wissenschaftlich-technischer Fragen in der BAM beschäftigt. Ein wesentliches Ziel der Kooperation ist die Erschließung hochwertiger Software für Finite-Element-Berechnungen. In diesem Zusammenhang wurde gegen Ende des Berichtsjahres das Programm ABAQUS beschafft.

Scientific Workstations (SWS)

Ch. Hege

Kooperation: J. Diemer K. Hermann, L. v. Löhneysen, M. Scheibe, D. Weidenhammer
(Hahn-Meitner-Institut Berlin GmbH)

Mit dem HMI besteht seit Nov. 1989 ein Kooperationsvertrag. Ziel der Zusammenarbeit ist die Untersuchung und Anwendung von Methoden der netzweit verteilten Datenverarbeitung, insbesondere zur Kopplung von Workstations mit hoher Grafikleistung und Rechnern mit hoher Rechenleistung (CRAY). Der Schwerpunkt lag im Berichtszeitraum bei der Erschließung, Erweiterung und Anwendung von Diensten zur Entwicklung von verteilten Applikationen. Der diesen Diensten zugrundeliegende Mechanismus ist der Remote Procedure Call (RPC). Bei der Verteilung von Anwendungen mittels RPC treten im wesentlichen folgende Probleme auf:

- Auf verschiedene Rechner verteilte Programm-Module verfügen nicht über einen gemeinsamen Speicher.
- Die Wortlängen und die Darstellung der Gleitkommazahlen können unterschiedlich sein.

- Einige RPC-Dienste benutzen konsequent ein Client-Server-Modell, in dem Callbacks, also Rollenwechsel von Server und Client, nicht vorgesehen sind.
- Die Programmierung der Stubs, also der Programmteile zur Kommunikation, ist sehr aufwendig und komplex. Hier helfen sogenannte "Stubgeneratoren".
- Die Komplexität des RPC führt zu relativ geringen Transferraten.

Näher untersucht wurden die RPC-Dienste ONC (Open Network Computing) von Sun und NCS (Network Computing System) von Apollo. Für beide wurden Zeitmessungen auf verschiedenen Protokollebenen des ISO-Modells ausgeführt. Die qualitative Gegenüberstellung der beiden Dienste führte zur Entscheidung, zunächst ONC als Grundlage für erste größere Anwendungen und eigene Erweiterungen zu nutzen. Für ONC sprechen derzeit die

- **Verfügbarkeit**
Da ONC die Grundlage von NFS (Network File System) ist, werden auf allen Unix-Rechnern, auf denen dieses weitverbreitete Produkt installiert ist, die wichtigsten RPC-Routinen unterstützt.
- Existenz einer Daten-Präsentationsschicht (in NCS nicht vorhanden). Dadurch sind Applikation und Rechnerarchitektur entkoppelt: Anwendungen müssen die Darstellung des sendenden Rechners nicht kennen.
- Möglichkeit von asynchronen Calls und Callbacks (von NCS nicht unterstützt) Asynchrone Calls, bei denen der Client einen Aufruf der Server-Routine initiiert und nicht auf dessen Terminierung wartet, sowie Vertauschung der Server-Client-Rolle sind bei der Verteilung von Applikationen oft erwünscht.

Die Erweiterungen konzentrieren sich derzeit auf den Schwerpunkt Benutzerumgebung für ONC. Bisher wurden für die Benutzerschnittstelle folgende Werkzeuge entwickelt:

- Ein Stubgenerator für Fortran, der anhand einer Beschreibungsdatei den für die Verteilung nötigen Stubcode (in C) erzeugt.
- Ein Tool, das innerhalb eines oder auch mehrerer Netzwerke die eindeutige Vergabe von RPC-Programmnummern automatisiert vornimmt, protokolliert und dem Benutzer eine exemplarische Beschreibungsdatei für den ONC-Stubgenerator liefert.
- Ein Server, der dem Benutzer bei Anwendung des vorangehenden Tools erlaubt, eigene RPC-Server auf der CRAY zu starten, ohne dort vorher eingeloggt zu sein.
- RPC-Routinen, die den Benutzer bei der Verwendung von asynchronen Calls und Callbacks unterstützen.

Derzeit ist eine Umgebung mit graphischer Benutzeroberfläche zur komfortablen Job-Verwaltung an Remote-Rechnern in Arbeit. Sie erlaubt die Darstellung der Batch-Queues der CRAY an der Workstation des Anwenders, sowie Abschicken und Stoppen von Batch-Jobs (RJE-Dienst).

Als beispielhafte Anwendung wurde u.a. ein Programm zur Visualisierung und graphischen Analyse von Schwingungsanregungen an Kristalloberflächen entwickelt. Dabei wird ein Kristallausschnitt betrachtet, in dem die Atome durch harmonische Potentiale untereinander

gekoppelt sind. Ein harmonischer Ansatz für die klassischen Bewegungsgleichungen führt auf ein Eigenwertproblem, dessen numerische Lösung die Normalschwingungen liefert. Der allgemeine Bewegungsverlauf wird durch Superposition der Normalschwingungen dargestellt. Die relativen Beiträge der einzelnen Normalschwingungen werden durch Anfangs- und Randbedingungen bestimmt, welche die eigentliche Anregung simulieren. Sie können durch Auswahl einzelner Atome, die nicht an der Bewegung teilnehmen sollen, durch statische Anfangsauslenkungen ausgewählter Atome sowie durch direkte Angabe der Mischungskoeffizienten festgelegt werden.

Die interaktive Eingabe und die graphische Darstellung des zeitlichen Verhaltens, mit wählbaren Darstellungsarten (realisiert mittels PHIGS+), geschieht auf der Workstation des Anwenders. Der Aufbau der dynamischen Matrix, die Bestimmung der Eigenwerte und -vektoren, der Mischungskoeffizienten aus den Anfangsbedingungen sowie die Berechnung der Auslenkungen wird auf der CRAY vorgenommen.

Die Verteilung ermöglicht somit die gleichzeitige Nutzung der hohen Grafikleistung einer Workstation und der Rechenleistung der CRAY X-MP/24 des ZIB.

3. Anlagenbetrieb

3.1 Übersicht

Der Bereich Anlagenbetrieb des ZIB hat folgende Aufgaben:

Nach außen: Ausbau und Betrieb eines Superrechners als Dienstleistungsangebot des ZIB an Universitäten und Forschungseinrichtungen im Rahmen des Norddeutschen Vektorrechnerverbundes (NVV)

Nach innen: Versorgung des ZIB mit Arbeitsmitteln der Datenverarbeitung sowie Bedienung und Pflege der Maschinen

Der Bereich Anlagenbetrieb beteiligt sich auch an Entwicklungs- und Forschungsprojekten, über die an anderer Stelle berichtet wird.

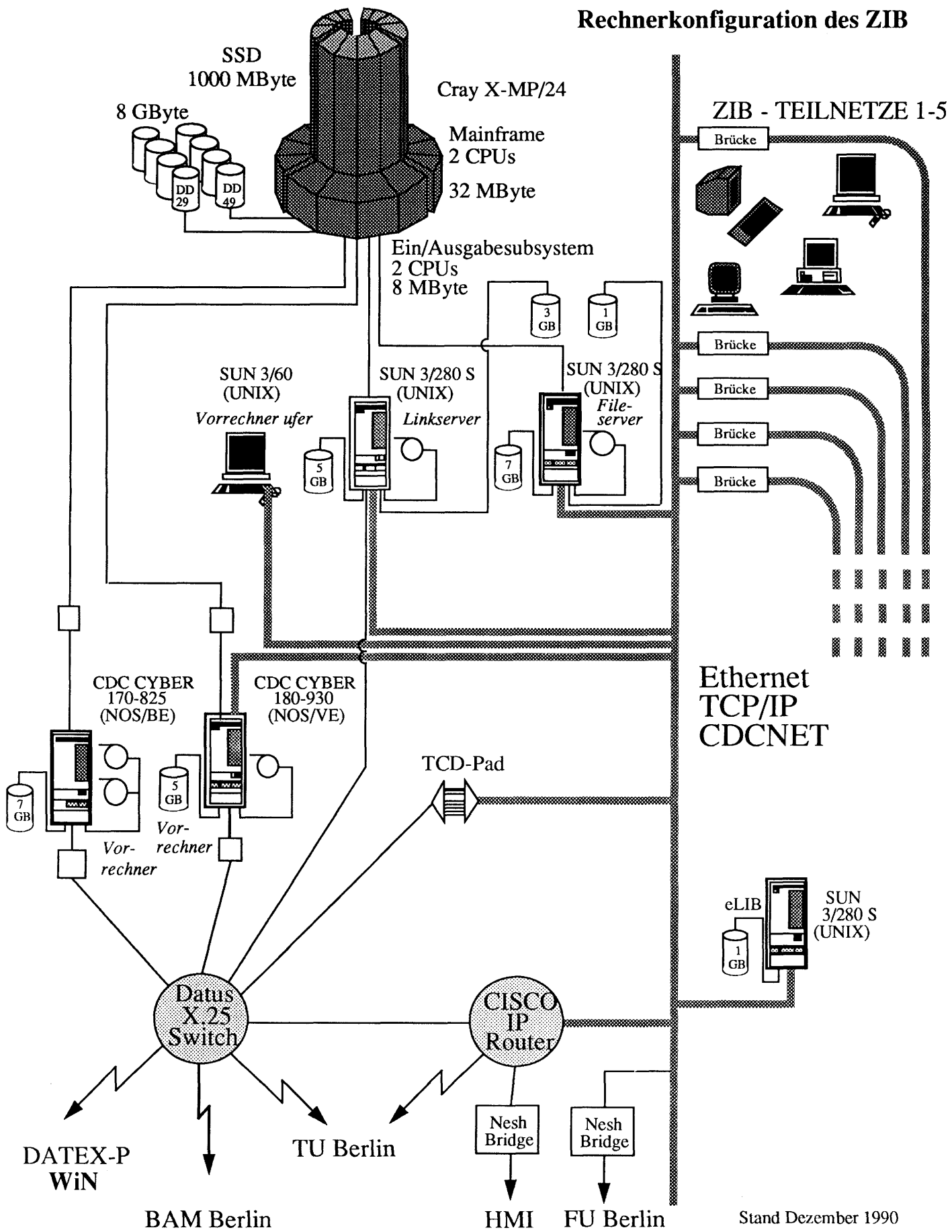
Der im ZIB installierte Vektorrechner CRAY X-MP/24 dient im Verbund mit den Vektorrechnern in Kiel und in Hannover (letzterer seit dem 2. Quartal 1990) der Versorgung der Universitäten und wissenschaftlichen Einrichtungen in Berlin, Schleswig-Holstein und Niedersachsen mit Höchstleistungsrechnerkapazität.

Seit das ZIB im Frühjahr 1989 auf dem Vektorrechner das Betriebssystem UNICOS, eine UNIX-Erweiterung der CRAY Research Inc., eingeführt hatte, vollzog sich in der wissenschaftlichen Datenverarbeitung in Berlin ein deutlicher Wandel von den damals noch vorherrschenden (vernetzten) Zentralrechnern mit firmenspezifischen Betriebssystemen zu einer verteilten Struktur mit Arbeitsplatzrechnern und Spezialrechnern (sogenannten Servern) verschiedener Hersteller, aber durchweg unter dem herstellerunabhängigen Betriebssystem UNIX mit den UNIX-spezifischen Kommunikations- und Kooperationsmechanismen.

Die Skizze auf der folgenden Seite zeigt den Stand der Konfiguration am Ende des Berichtsjahres. Ein Vergleich mit unserem vorigen Jahresbericht würde die erreichten Fortschritte bei der Realisierung eines konsequenten, möglichst einfachen Netz- und Serverkonzeptes zeigen: Die Vielzahl der direkten Leitungen zu den Partnerrechenzentren konnte durch den Anschluß an das Wissenschaftsnetz WiN erheblich reduziert werden. Der gewachsenen Bedeutung der TCP/IP-Kommunikation entsprechen der zusätzliche (dritte) ETHERNET-Anschluß des Vektorrechners und der CISCO-Router, der sozusagen das IP-Gegenstück zum DATUS-X.25-Router ist. Der CISCO-Router ist zugleich die erste Komponente für das 2 MB WiN und kann auch in künftig noch schnelleren Netzen weiterverwendet werden. Die derzeitige Übertragungsleistung von 2 MB/Sek entspricht nicht den Ansprüchen eines fortschrittlichen Superrechnerbetriebes: Die on-line Visualisierung von Simulationsläufen erfordert Datenraten von mehr als 100 MB/Sek. Die Schaffung derartiger Verbindungen erfordert nicht nur den Erwerb zusätzlicher Rechnernetzkomponenten, sondern auch Investitionen im Bereich der Deutschen Bundespost, die erst dann sinnvoll geplant werden können, wenn der künftige neue Standort des ZIB feststeht.

Die Plattenspeicher an den SUN-Servern werden vom Vektorrechner aus mit Hilfe des "Network File System" NFS genutzt, ohne daß der Anwender selbst irgendwelche besonderen Vorkehrungen treffen müßte. Er muß lediglich wissen, daß diese Filesysteme nicht so schnell bearbeitet werden können wie die direkt am Vektorrechner lagernden Filesysteme. Die Plattenspeicher an den Vorrechnern mit herstellereigenen Betriebssystemen werden vom Vektorrechner aus mit speziellen Kommandos der CRAY-Station-Software angesprochen.

Rechnerkonfiguration des ZIB



Weder die vielfältige und umfassende Netzeinbindung noch die Softwareausstattung des Vektorrechners ließen sich in der Konfigurationsskizze deutlich machen. Diese wichtigen Aspekte werden im folgenden Abschnitt zumindest zusammenfassend behandelt.

3.2 Arbeiten im Bereich Anlagenbetrieb

3.2.1 Rechnernetze

Die Verbindung des ZIB mit anderen wissenschaftlichen Zentren über Rechnernetze ist in mehrfacher Hinsicht wichtig:

- Zuverlässige elektronische Post (e-mail) wird mehr und mehr zum wichtigsten Kommunikationsmittel in der wissenschaftlichen Welt. Gemeinsame Arbeit an Publikationen, Absprachen, Terminverabredungen und Diskussionen werden durch dieses inzwischen selbstverständliche Hilfsmittel erheblich erleichtert und beschleunigt.
- Der Zugang zum Höchstleistungsrechner des ZIB erfolgt ausschließlich über Rechnernetze. Zuverlässige Dienste für den Transport von Dateien und für die Auftragsverarbeitung im Netz sind für die Benutzer ebenso unentbehrlich wie der Rechner selbst. Einfache Benutzbarkeit und ausreichende Leistungsfähigkeit dieser Komponenten entscheiden über Möglichkeit oder Unmöglichkeit bestimmter Supercomputeranwendungen.
- Da nicht jeder Maschinentyp für den das ZIB Software entwickelt, im ZIB vorhanden sein kann, ist das ZIB darauf angewiesen, daß Computer anderer Forschungsinstitute mit Hilfe der Rechnernetze von den Forschern und Entwicklern des ZIB möglichst leicht von ihrem Arbeitsplatzcomputer aus benutzt werden können.
- Der weltweit angebotene Softwareinformationsdienst des ZIB sollte von möglichst allen Rechnernetzen und Maschinentypen aus umfassend genutzt werden können.

Vor dem Hintergrund dieser Forderungen muß der Anlagenbetrieb des ZIB möglichst alle Netze und Protokolle unterstützen, die bei den Partnern des ZIB eingesetzt werden und kann sich nicht auf eine einzige Norm festlegen. Andererseits ist es eine wirtschaftliche Forderung, ständig zu überprüfen, wie dringend die unterstützten Netzdienste jeweils benötigt werden und wo Einsparungen und Vereinfachungen möglich sind.

Ende 1990 wurden fast alle verbreiteten höheren Netzdienste, sowohl aus dem Bereich ISO/OSI als auch aus dem Bereich TCP/IP vom ZIB angeboten, auch CDCNET, nicht aber SNA- und DECNET-Dienste. Als Kommunikationsprotokoll wird im Hochgeschwindigkeitsbereich zur Zeit ausschließlich das Internet-Protokoll verwendet, im 64 KBit-Bereich X.25.

Für die Verbindungen im Norddeutschen Vektorrechnerverbund wird derzeit ausschließlich und erfolgreich das WiN eingesetzt. Bemühungen um schnellere Verbindungen zu wirtschaftlich tragbaren Bedingungen laufen unter Federführung des RRZN Hannover. Als Verbindung zu den lokalen Netzen der Benutzer sind innerhalb Berlins zur Zeit drei schnelle Datenleitungen (je 2 Megabit/Sek), einige zusätzliche 64 KBit-Verbindungen und das Wissenschaftsnetz WiN eingesetzt.

Aufbauend auf den in jeder UNIX-Umgebung üblichen Kommunikationsleistungen und modernen Softwarepaketen wie z.B. apE (von der Ohio State University) wurden und werden im Netz verteilte Anwendungen entwickelt, die die technischen Möglichkeiten moderner Arbeitsplatzcomputer als sinnvolle Ergänzung des Supercomputers einsetzen.

3.2.2 Anwendersoftware und Benutzerberatung

Typisch für den Einsatz eines Superrechners in der universitären Forschung ist die Verwendung von selbstentwickelten Programmen der Benutzer bzw. von Programmen, die innerhalb der wissenschaftlichen Gemeinschaft über die Rechnernetze kostenlos ausgetauscht werden. Einige wenige Programme und Bibliotheken werden vom ZIB zentral verwaltet und angeboten:

Basisbibliotheken:

IMSL, NAG, BLAS, EISPACK, LINPACK

Chemie:

GAUSSIAN 86/88, GAMESS-UK, MOPAC

Strukturmechanik:

ADINA

Computeralgebra:

REDUCE

Graphik:

GKS, apE

Darüber hinaus stehen den Benutzern des Superrechners auch die vom ZIB weltweit angebotenen rechnerunabhängigen Dienste eLib netlib und redlib zur Verfügung, über die in Abschnitt 2.3 berichtet wurde.

Die Partnerrechenzentren erhalten die in Abschnitt 3.3.2 aufgeführten Kontingente und verwalten sie so, als handele es sich um Rechner der jeweiligen eigenen Institution. Dazu gehört auch die Verantwortung für den sachgerechten Einsatz des Supercomputers und für die Beratung der Anwender. Zur Unterstützung der Rechenzentren der Berliner Universitäten bei dieser Aufgabe waren im Berichtszeitraum bis zu 8 Mitarbeiter des ZIB dort tätig. Hinsichtlich der Art der Beratungsprobleme ist im Berichtszeitraum eine deutliche Verschiebung eingetreten: Während in früheren Jahren die Vektorisierung und Optimierung der Benutzerprogramme zusammen mit der Organisation der Auftragsverarbeitung das wichtigste Beratungsthema waren, haben in neuerer Zeit inhaltliche Fragen, für deren Beantwortung spezifische Kenntnisse im Fach des Benutzers nötig sind, immer mehr zugenommen. Bei der Neubesetzung von Stellen für die Benutzerberatung wurden daher im letzten Jahr wissenschaftliche Mitarbeiter aus den Arbeitsgebieten der größten Benutzergruppen bevorzugt. Die Tendenz von der technikbezogenen, und somit sinnvollerweise nach Institutionen getrennten Beratung zur fachspezifischen, daher überinstitutionellen Beratung wird sich in den nächsten Jahren zweifellos verstärken.

3.2.3 Ausbauplanung

Erheblichen Raum nahmen im Berichtszeitraum die Überlegungen für den weiteren Ausbau des Supercomputers in Anspruch. Im Frühjahr wurden Gespräche mit allen Benutzergruppen geführt, um für den geplanten Nachfolgerechner des ZIB-Supercomputers eine möglichst umfassende Bedarfsanalyse erstellen zu können. Damals bestand noch die Absicht des Landes Berlin, den Vektorrechner im ZIB Ende 1991 gegen einen Supercomputer nach dem neuesten Stand der Technik für etwa 35 Millionen DM auszutauschen. Diese Absicht wurde im Wissenschaftsrat bezüglich Umfang und Termin der Maßnahme diskutiert und in den Rahmenplan aufgenommen.

Gegen Mitte des Jahres war dann die aktuelle Haushaltslage des Landes Berlin zu berücksichtigen: Die für 1991/1992 vorgesehenen Mittel konnten erst für 1992/1993 eingeplant werden. Diese Verschiebung entspricht im übrigen der Verzögerung der Beschaffung im Land Niedersachsen und ist insoweit konform zur Gesamtsituation im Norddeutschen Vektorrechnerverbund.

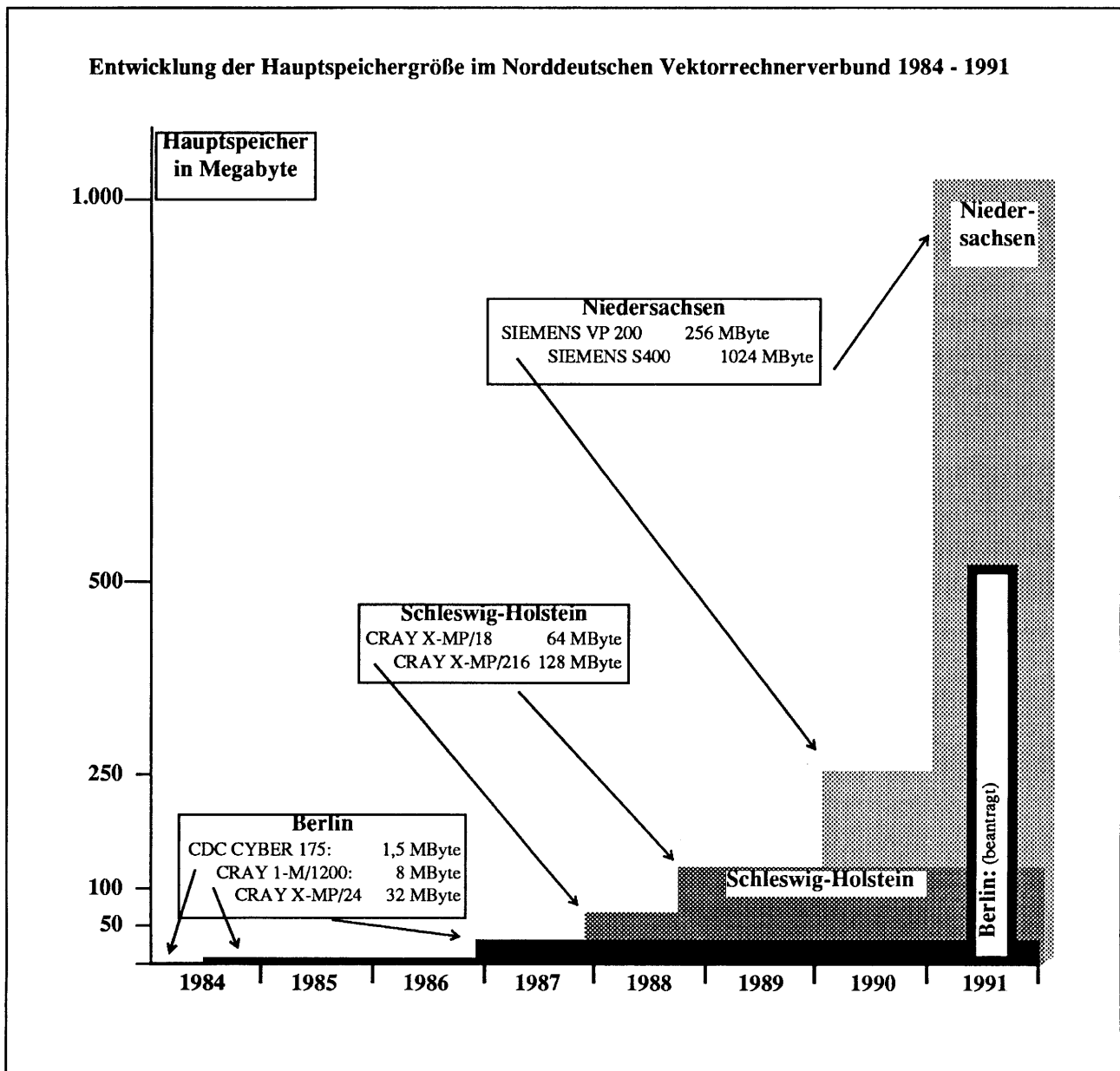
Allerdings macht diese Verschiebung ein zweistufiges Vorgehen zwingend erforderlich, wenn Schaden für die Forschung vermieden werden soll. Tatsächlich bedeutet nämlich der kleine Hauptspeicher des ZIB-Supercomputers eine unerträgliche Behinderung der Arbeit aller derjenigen Forschungsgruppen, die auf einen Supercomputer als einziges Forschungswerkzeug angewiesen sind. Dies hat in einigen Fällen dazu geführt, daß Gruppen, die noch vor drei bis vier Jahren eine internationale Spitzenstellung innehatten, jetzt kaum noch in der Lage sind, auf dem Rechner des ZIB international beachtete Forschungsergebnisse zu produzieren. Ausweichmöglichkeiten sind kaum vorhanden, die Möglichkeiten des Norddeutschen Vektorrechnerverbundes hierfür sind praktisch erschöpft. Zur Veranschaulichung der Situation in Berlin ist auf der umseitigen Skizze die Entwicklung der installierten Hauptspeichergröße bei den Vektorrechnern im Norddeutschen Vektorrechnerverbund dargestellt. Da die Hersteller der international verbreiteten Softwarepakete davon ausgehen, daß die Größe des Hauptspeichers bei den heutigen Supercomputern kein limitierendes Element mehr darstellt, wurden mehrere große Pakete hinsichtlich Vektorisierung und Parallelisierung auf Kosten des Hauptspeicherbedarfs optimiert. Der Einsatz dieser optimierten Programme ist auf dem Berliner Supercomputer wegen seines kleinen Hauptspeichers nicht möglich.

Da eine Erweiterung des Hauptspeichers beim vorhandenen System aus technischen Gründen nicht möglich ist, führt kein Weg an der geplanten Installation eines zusätzlichen Prozessors vorbei. Die erste Ausbaustufe wurde nach folgenden Kriterien geplant:

- Kontinuität der Arbeitsumgebung der Benutzer
- Die Zwischenlösung soll Bestandteil der Nachfolgerechnerkonfiguration sein.
- Kein Präjudiz für den Typ des Nachfolgerechners
- Die Zwischenlösung muß die Berliner Forschungsgruppen wieder mit einem Arbeitsmittel versehen, das wenigstens in einem gewissen Umfang den Ablauf der in der internationalen Forschungslandschaft führenden Softwarepakete erlaubt und Berlin nicht von der internationalen Entwicklung im Supercomputing ausschließt.
- Da etwa 80 % der derzeit laufenden Anwendungen von der unzureichenden Arbeitsspeicherausstattung betroffen sind, sollte die Leistung des zusätzlichen Prozessors möglichst groß sein.

Anfang November 1990 wurde als Zwischenlösung ein "leistungsfähiger Computerserver" und ein kleiner Datenarchivspeicher beim Wissenschaftsrat beantragt. Der Antrag liegt inzwischen der Kommission für Rechenanlagen der Deutschen Forschungsgemeinschaft zur Begutachtung vor.

Im Rahmen dieser Planungsaktivitäten wurden auch die Kontakte zu Herstellern und Entwicklern hochparalleler Computersysteme vertieft, da derartige Geräte zwar nicht die augenblickliche Notsituation bei den Benutzern des ZIB-Supercomputers lindern können, wohl aber bereits in naher Zukunft fester Bestandteil der Anlagenausstattung jedes Supercomputerzentrums sein werden.



3.3 Nutzung der Vektorrechner

3.3.1 Norddeutscher Vektorrechnerverbund (NVV)

Zwischen den Ländern Schleswig-Holstein, Niedersachsen und Berlin besteht ein Vertrag über die wechselseitige Nutzung von Vektorrechnern. Das ZIB verwaltet neben dem eigenen Rechner die Anteile des Landes Berlin auf den Rechnern der Partnerländer. Im Berichtszeitraum wurde das Leistungsangebot des NVV, das bis dahin neben dem Berliner Vektorrechner nur die Kieler CRAY X-MP/216 umfaßte, durch die Installation eines Siemens VP200 in Hannover ergänzt.

Die folgende Tabelle zeigt die Inanspruchnahme von Vektorrechnerkapazität im NVV seit 1984:

Wechselseitige anteilige Rechnernutzung im NVV				
Jahr	System	Nutzung durch		
		Berlin	Schleswig-Holstein	Niedersachsen
1984	CRAY 1-M/1200 (Berlin)	85 %	10 %	5 %
1985	CRAY 1-M/1200 (Berlin)	68 %	13 %	19 %
1986	CRAY 1-M/1200 (Berlin)	66 %	17 %	17 %
1987	CRAY X-MP/24* (Berlin)	65 %	16 %	19 %
1988	CRAY X-MP/24 (Berlin)	81 %	4 %	15 %
	CRAY X-MP/216** (Kiel)	17 %	82 %	1 %
1989	CRAY X-MP/24 (Berlin)	86 %	2 %	12 %
	CRAY X-MP/216 (Kiel)	12 %	79 %	9 %
1990	CRAY X-MP/24 (Berlin)	87 %	4 %	9 %
	CRAY X-MP/216 (Kiel)	16 %	79 %	5 %
	SIEMENS VP 200*** (Hannover)	2 %	0 %	98 %

* Installiert am 12. Januar 1987

** Installiert Dezember 1987 als CRAY X-MP/18, erweitert zur CRAY X-MP/216 im 4. Quartal 1988

*** Installiert Januar 1990 als SIEMENS VP200, Erweiterung zur SIEMENS S400/10 Ende 1990, geplante Erweiterung zur SIEMENS S400/40 Ende 1991

Superrechner sind in vielen Forschungsdisziplinen das einzige Werkzeug der Forschung, in anderen Disziplinen sind sie ein unentbehrliches Hilfsmittel neben anderen Geräten. Der Bedarf an Rechenleistung übersteigt die technischen Möglichkeiten dermaßen, daß viele Projekte nicht in Angriff genommen werden, weil die verfügbare Rechenleistung viel zu gering ist. Dies erklärt die Beobachtung, daß Höchstleistungsrechner immer voll ausgelastet sind, und daß lange Wartezeiten für die Bearbeitung größerer Aufträge bestehen. Wegen der besseren Vergleichbarkeit wurden in vorstehender Tabelle daher nur die prozentualen Anteile der Partner im Norddeutschen Vektorrechnerverbund an den durchweg voll ausgelasteten Systemen aufgeführt.

Wie von Anfang an geplant zeigt sich aufgrund der unterschiedlichen Installationstermine und Leistungscharakteristika eine deutliche Tendenz zum Kapazitätsausgleich zwischen Kiel und Berlin, während die Nutzung der ersten Ausbaustufe des niedersächsischen Vektorrechners von anderen Bundesländern aus eher zögerlich angelaufen ist. Als Ursache hierfür glauben wir erkannt zu haben, daß auf dem niedersächsischen Vektorrechner das Betriebssystem UNIX noch nicht angeboten werden kann und daß diese Inkompatibilität zu den vorhandenen Systemen nicht durch überzeugende Leistungsvorteile ausgeglichen wird. Nach der vorgesehenen Installation des Systems S400/40 und des Betriebssystems UNIX in Hannover wird die Symmetrie im Norddeutschen Vektorrechnerverbund erstmalig erreicht sein.

3.3.2 Berliner Nutzung im NVV

Insgesamt wurden am Berliner Vektorrechner 14.620 Stunden CPU-Zeit beziehungsweise 6.134 Stunden Systemzeit* abgegeben.

Vor der Berechnung der Anteile der einzelnen Partner des ZIB an der Leistung des Berliner Vektorrechners ist der Eigenverbrauch des ZIB in Abzug zu bringen:

	CPU-Zeit (Stunden)	System-Zeit (Stunden)
Eigene Forschungsprojekte des ZIB	166	71
Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung	618	247
Hahn-Meitner-Institut Berlin GmbH	470	200

Somit betrug der eigene Anteil des ZIB etwa 8 % der insgesamt abgegebenen Kapazität. (Alle Anteile beziehen sich auf die Systemzeit.)

Also wurden an die Partner des ZIB abgegeben:	13.366	5.616
---	---------------	--------------

* Die Systemzeit, deren Verhältnis zur CPU-Zeit ein gutes Maß für die Ausnutzung sämtlicher Betriebsmittel des Supercomputers (CPU, Hauptspeicher, Ein/Ausgabe) gibt, ist sehr gut geeignet für den Vergleich von Leistungen (Definition von Anteilen etc.), sie ist aber kein absolutes Maß, weil sie vom Betreiber des Rechners individuell für die jeweilige Maschine definiert wird.

In der folgenden Zusammenstellung sind diejenigen Fachbereiche der Berliner Hochschulen aufgeführt, die 1990 mehr als 100 Stunden System-Zeit auf den Supercomputern im NVV verbraucht haben. In den ausgewiesenen Rechenzeiten sind "Bagatellprojekte" (Jahresverbrauch < 1 Stunde) nicht enthalten. Da der Berliner Vektorrechner nach Möglichkeit nur für große Projekte eingesetzt wird, bedeuten die oben beschriebenen Einschränkungen kaum einen Informationsverlust: Die in der folgenden Tabelle ausgewiesenen Rechenzeiten betragen in der Summe etwa 97 % der an Benutzer abgegebenen Rechenzeit.

Es werden nicht die einzelnen Projekte erwähnt, sondern lediglich die Institute und Forscher mit besonders großem Rechenbedarf. Verbrauchswerte ohne Zusatz beziehen sich auf den Berliner Vektorrechner, Werte aus Kiel oder Hannover sind entsprechend gekennzeichnet.

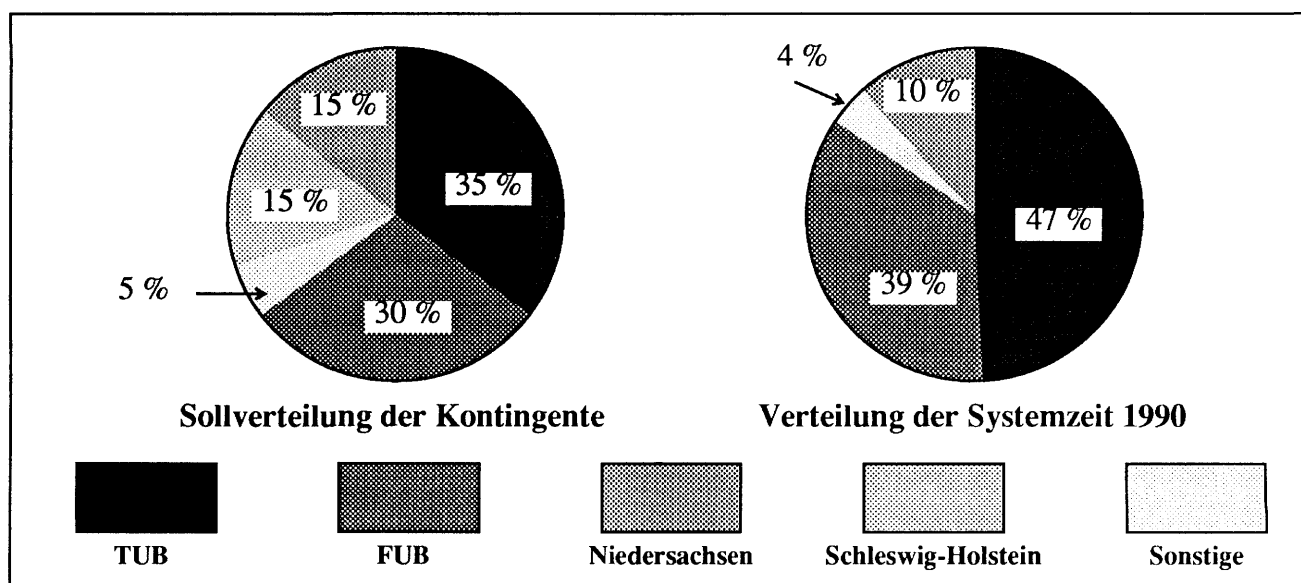
Technische Universität Berlin

	CPU-Zeit (Stunden)	System-Zeit (Stunden)
Fachbereich 4, Physik	2.052	839
Institut für Theoretische Physik der Technischen Universität Berlin (Prof. Dr. Scherz, Dipl.-Phys. Weider)		
Institut für Astronomie und Astrophysik der Technischen Universität Berlin (Prof. Dr. Beuermann, Prof. Dr. Sedlmayr)		
Fachbereich 5, Synthetische und Analytische Chemie	929	405
Institut für Organische Chemie der Technischen Universität Berlin	(Kiel) 588	252
(Prof. Dr. Schwarz, Dipl.-Chem. Sülzle)	(Hannover) 4	
Fachbereich 6, Physikalische und Angewandte Chemie	782	316
Iwan-N.Stranski-Institut für Physikalische und Theoretische Chemie der Technischen Universität Berlin (Prof. Dr. Ziessow, Prof. Dr. Bruns, Prof. Dr. Helfrich, Dipl.-Chem. Komorowski, Dr. v. Hirschhausen)		
Fachbereich 9, Physikalische Ingenieurwissenschaft	1.081	443
Hermann-Föttinger-Institut für Thermo- und Fluidodynamik der Technischen Universität Berlin (Dr. Thiele, Dr. Baumann)		
1. Institut für Mechanik der Technischen Universität Berlin (Prof. Dr. Böhm, Dipl. -Ing. Aus der Fünten, Dipl. -Ing. Oertel)		
Sonderforschungsbereich 181, "Hochfrequenter Rollkontakt der Fahrzeugräder" (Prof. Dr. Böhm, Prof. Dr. Knothe, Prof. Dr. Willumeit)		
Fachbereich 10, Verfahrenstechnik und Energietechnik	915	377
Institut für Verfahrenstechnik der Technischen Universität Berlin (Prof. Dr. Brauer, Dipl. -Ing. Gupta, Dipl. Ing. Klippe)		
Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft		
Projekte in Kooperation mit der TUB	276	130

Freie Universität Berlin

	CPU-Zeit (Stunden)	System-Zeit (Stunden)
Fachbereich Physik	2.939	1.178
Institut für Theoretische Physik der Freien Universität Berlin (Prof. Dr. Linke, Dr. Nakamura, Dipl.-Phys. Plewnia, Dipl.-Phys. Sinclair, Dipl.-Phys. Stüben, Prof. Dr. Kleinert, Dr. Janke)	(Kiel) 1.831	758
Institut für Experimentalphysik der Freien Universität Berlin (Prof. Dr. Möbius, Dr. Plato, Dr. Tränkle, Dr. Borczykowski)	(Hannover) 102	
Fachbereich Chemie	663	286
Institut für Physikalische und Theoretische Chemie der Freien Universität Berlin (Prof. Dr. Bonacic-Koutecky, Dr. Schöffel)	(Kiel) 188	82
Institut für Kristallographie der Freien Universität Berlin (Prof. Dr. Saenger, Dr. Egner)		
Fachbereich Geowissenschaften	1495	668
Institut für Meteorologie, Fachrichtung Theoretische Meteorologie (Prof. Dr. Warnecke, Dr. Blumhagen, Dipl.-Met. Scherer, Dipl.- Met. Schubert, Dipl.-Met. Scholl)		
Institut für Meteorologie, Fachrichtung Globales Klima (Prof. Dr. Labitzke, Dr. Meyer, Dipl.-Met. Langematz, Dipl.-Math. Leder, Dr. Pawson)		
Institut für Geologie, Geophysik und Geoinformatik (Prof. Dr. Götze, Dr. Burger, Prof. Dr. List)		
Land Niedersachsen	1.291	541
Land Schleswig-Holstein	567	246

Die folgende Graphik zeigt die Verteilung der Systemzeit auf die Partner des ZIB:



4. Wissenschaftlich-Technische Dienste

4.1 Bibliothek

Das im Vorjahr eingeführte Datenbanksystem LARS hat die Erwartungen erfüllt mit den Einschränkungen, auf die schon im letzten Bericht hingewiesen wurde. Auch die neue Version 4 weist weiterhin Ungereimtheiten auf, so daß auf SAS als Reportgenerator nicht verzichtet werden kann.

Als Ärgernis erwiesen sich weiterhin die z.T. langen Lieferfristen für Bücher. Wir haben teilweise andere Distributoren -auch ausländische- eingeschaltet, mußten jedoch feststellen, daß eine Verbesserung so nicht zu erzielen ist. Die Lieferfristen der 1990 gelieferten Bücher stellt sich so dar:

< 30 Tage	30 - 60 Tage	60 - 90 Tage	>90 Tage
57%	17%	13%	13%

4.2 Reportwesen

Im Berichtszeitraum wurden 21 Preprints und 13 Technical Reports herausgegeben (s. Liste der Veröffentlichungen im Abschnitt 5.1 und 5.2). Die Zahl der wissenschaftlichen Einrichtungen, mit denen ein gegenseitiger Austausch der Veröffentlichungen vereinbart ist, erhöhte sich auf 41, weitere ca. 175 Interessenten erhalten regelmäßig Veröffentlichungen des ZIB. Der Bestand der eingegangenen Reports und Sonderdrucke beträgt zur Zeit reichlich 4.300 Titel.

Eine neue Reihe "Manuals" wurde eingerichtet, in der Beschreibungen und Anleitungen für Produkte und Dienstleistungen des ZIB herausgegeben werden.

4.3 Elektronik-Labor

Die im Labor entwickelte Überwachungseinrichtung für das lokale Netzwerk wurde endgültig in Betrieb genommen, nachdem der Probetrieb 1989 erfolgreich war. Es wurden 10 Überwachungsgeräte gefertigt und die folgenden LAN-Segmente damit ausgestattet:

- 5 ZIB - Etagen-Teilnetze
- 1 ZIB - Backbone
- 1 FUB - Teilnetz
- 1 HMI - Teilnetz
- 1 TUB - Teilnetz

Die Geräte messen Auslastung, Fehler und Kollisionen im jeweiligen Segment und melden die Daten im 5-Sekunden-Takt an die Management-Station, die im Labor steht. Dort kann der Zustand des gesamten Netzes einschließlich der drei über 2 MBit-Leitungen angeschlossenen auswärtigen Segmente mit einem Blick graphisch oder tabellarisch erfaßt werden. Unterbrechungen führen zu einem Alarm.

Die Überwachungseinrichtung erwies sich als äußerst stabil.

Folgende Erfahrungen mit Fehlersituationen wurden im Berichtszeitraum gemacht:

- Die lokalen Bridges, die die Etagen-Teilnetze mit dem Backbone verbinden, erwiesen sich als störanfällig. 6 Bridges mußten als fehlerhaft zur Reparatur eingeschickt werden, darunter auch einige der ersatzweise gelieferten Bridges. Der einfachste Störfall, der Totalausfall, ließ sich sofort erkennen und durch Aus/Einschalten der Netzspannung beheben. Schwieriger waren die Fälle, in denen gelegentlich Datenblöcke nicht übertragen wurden. Dann ließ sich auf der Management-Station beobachten, daß die Meßwertframes ebenfalls nicht kontinuierlich übertragen wurden. Die schwierigsten Fälle waren die lastabhängigen Fehler, die man nur durch probeweises Austauschen der Bridge gegen eine Reservebridge entdecken konnte.
- Die 2 MBit-Übertragungstrecken erwiesen sich als stabil, bis auf einige unerklärliche Unterbrechungen, ausschließlich zur Nachtzeit für mehrere Minuten.
- Bei der Verfolgung individueller Fehler gab es gelegentlich die Situation, daß unser Überwachungssystem Fehler anzeigte, die der HP-LAN-Analyser nicht erkannte, und umgekehrt. Zur Erklärung kann man eine Erfahrung nutzen, die im HMI gemacht wurde. Dort mit einem Network Quality Analyser durchgeführte Messungen zeigen, daß selbst namhafte Hersteller (wie z. B. SUN) die Spezifikationen nach IEEE 802.3 nicht immer einhalten; in diesem Fall war die zulässige Signal-Rate von $10 \cdot 10^6$ Bit/sec $\pm 0,01\%$ überschritten. Eine Ursache liegt sicherlich darin, daß Gerätehersteller sich auf die Einhaltung der normgerechten Bauteilspezifikationen verlassen und nicht bereit oder in der Lage sind, diese nachzumessen.
- Gelegentlich wurde von Benutzern träges Netzverhalten, d.h. ungewohnt hohe Antwortzeiten beklagt. Der Blick auf die Management-Station ergab jedoch immer ein auf der Ebene 2 normal arbeitendes Netz mit geringer Netzauslastung. Erklären kann man das Verhalten dann nur mit Engpässen in den beteiligten Workstations oder Servern oder mit Softwareproblemen. Ein bestimmtes Softwareproblem trat relativ häufig auf und ist auf der Management-Station besonders gut zu sehen. Zwei Workstations tauschen laufend die gleichen Daten-Pakete miteinander aus, obwohl kein Benutzer "eingeloggt" ist. Das führt zu einer konstanten Netzlast von einigen Prozent und ist nur durch Rebooten der Workstations zu beseitigen.

Inzwischen haben andere Einrichtungen in Berlin Interesse an unserer Überwachung gezeigt. Da die Herstellung weiterer Geräte im ZIB-Labor aus Kapazitätsgründen nicht möglich ist, wurde ein Redesign auf einem PC-AT durchgeführt. Hierbei muß nur eine kleine Adapterkarte zur Kollisionsmessung selbst angefertigt werden. Die restliche Hardware kann von beliebigen Herstellern gekauft werden.

Erste Vorbereitungen wurden unternommen, um in Zusammenarbeit mit dem HMI die ZIB-LAN-Überwachung unter SNMP (Simple Network Management Protocol) laufen zu lassen.

SNMP hat sich praktisch zu einem ersten firmenübergreifenden Industriestandard für das Netzwerkmanagement entwickelt. Unter Einbeziehung einer Station, die als PROXY AGENT die Verbindung zwischen den ZIB-LAN-Überwachungsgeräten und einer zentralen SNMP-Netzwerk-Management-Station herstellt, wird sich die ZIB-Entwicklung in die Überwachung einer großen, heterogenen Netzstruktur integrieren lassen.

5. Sonstige Aktivitäten des ZIB

5.1 Preprints

SC 90-1. M. Wulkow; P. Deuflhard. *Towards an Efficient Computational Treatment of Heterogeneous Polymer Reactions.*

Abstract: The discrete Galerkin method developed by the authors has turned out to be an efficient tool for the computational treatment of very large scale ODE systems arising in polyreaction kinetics. Up to now, this approach has been worked out in detail for homogeneous polymer reactions. The present paper deals with one line of possible extensions of the method to the case of so-called heterogeneous processes, which may appear e. g. in smog reactions. The associated mathematical models involve reaction coefficients depending on the chain length of the reacting polymer. The herein suggested extension is worked out in some detail on the basis of the earlier paper. In addition, a numerical example describing polymer degradation is included.

SC 90-2. Peter Deuflhard. *Global Inexact Newton Methods for Very Large Scale Nonlinear Problems.*

Abstract: Newton methods for nonlinear problems are known to require the solution of a sequence of linear problems of the same type. For very large scale problems, as understood herein, the arising linear systems can only be solved by iterative methods. Then Newton's iteration appears as outer iteration. The question of interest will be to control the accuracy of the inner iteration such that the convergence speed of Newton's method is preserved. The purpose of the paper is to combine the concept of inexact Newton methods with the concept of the affine invariant exact Newton methods - which is important for problems with ill-conditioned Jacobian matrices (such as typical 2-D or 3-D discretized partial differential equations).

SC 90-3. Karin Gatermann. *Symbolic solution of polynomial equation systems with symmetry.*

Abstract: Systems of polynomial equations often have symmetry. The Buchberger algorithm which may be used for the solution ignores this symmetry. It is restricted to moderate problems unless factorizing polynomials are found leading to several smaller systems. Therefore two methods are presented which use the symmetry to find factorizing polynomials, decompose the ideal and thus decrease the complexity of the system a lot. In a first approach projections determine factorizing polynomials as input for the solution process, if the group contains reflections with respect to a hyperplane. Two different ways are described for the symmetric group S_m and the dihedral group D_m . While for S_m subsystems are ignored if they have the same zeros modulo G as another subsystem, for the dihedral group D_m polynomials with more than two factors are generated with the help of the theory of linear representations and restrictions are used as well. These decomposition algorithms are independent of the finally used solution technique. We used the REDUCE

package Groebner to solve examples from Caprasso, Demaret and Noonburg which illustrate the efficiency of our REDUCE program. A short introduction to the theory of linear representations is given.

In a second approach problems of another class are transformed such that more factors are found during the computation; these transformations are based on the theory of linear representations.

Examples illustrate these approaches. The range of solvable problems is enlarged significantly.

SC 90-4. Folkmar A. Bornemann. *An Adaptive Multilevel Approach to Parabolic Equations I. General Theory & 1D-Implementation.*

Abstract: A new adaptive multilevel approach for parabolic PDE's is presented. Full adaptivity of the algorithm is realized by combining multilevel time discretization, better known as extrapolation methods, and multilevel finite element space discretization. In the theoretical part of the paper the existence of asymptotic expansions in terms of time-steps for single-step methods in Hilbert space is established. Finite element approximation then leads to perturbed expansions, whose perturbations, however, can be pushed below a necessary level by means of an adaptive grid control. The theoretical presentation is independent of space dimension. In this part I of the paper details of the algorithm and numerical examples are given for the 1D case only. The numerical results clearly show the significant perspectives opened by the new algorithmic approach.

SC 90-5. P. Deuflhard; R. Freund; A. Walter. *Fast Secant Methods for the Iterative Solution of Large Nonsymmetric Linear Systems.*

Abstract: A family of secant methods based on general rank-1 updates has been revisited in view of the construction of iterative solvers for large non-Hermitian linear systems. As it turns out, both Broyden's "good" and "bad" update techniques play a special role - but should be associated with two different line search principles. For Broyden's "bad" update technique, a minimum residual principle is natural - thus making it theoretically comparable with a series of well-known algorithms like GMRES. Broyden's "good" update technique, however, is shown to be naturally linked with a minimum "next correction" principle - which asymptotically mimics a minimum error principle. The two minimization principles differ significantly for sufficiently large system dimension. Numerical experiments on discretized PDE's of convection diffusion type in 2-D with internal layers give a first impression of the possible power of the derived "good" Broyden variant.

SC 90-6. Daoliu Wang. *On Symplectic Difference Schemes for Hamiltonian Systems.*

Abstract: Symplectic difference schemes have been shown to be a right formalism for numerical computation of Hamiltonian systems. They are suitable to long time computation and of good qualitative properties. These properties are ensured by the fact that a symplectic difference scheme approximating to a time-independent Hamiltonian system can be regarded as a perturbed time-dependent Hamiltonian system of the original one. That is, a solution of a symplectic difference scheme is a solution of a certain perturbed time dependent Hamiltonian system evaluated at discrete (time) points. This is the main result of the paper. Moreover, linear symplectic difference schemes approximating to a linear time-independent Hamiltonian system can be regarded as a perturbed time-independent Hamiltonian system. So it has all properties that a linear Hamiltonian system has. Based on these results,

stochastic webs and chaos in symplectic difference schemes are also discussed. They will appear in numerical simulation for Hamiltonian systems, even with one degree of freedom.

SC 90-7. P. Deuflhard; U. Nowak; M. Wulkow. *Recent Developments in Chemical Computing.*

Abstract: The paper surveys three aspects of chemical computing, which seem to play a role in recent developments. First, extrapolation methods for the numerical treatment of differential-algebraic equations are introduced. The associated extrapolation code LIMEX has reached a certain level of sophistication, which makes it a real competitor to the elsewhere widely used multi-step code DASSL of Petzold. Second, adaptive methods of lines for partial differential equations such as those arising in combustion problems are treated. Both static and dynamic regridding techniques are discussed in some detail. Finally, some new ideas about the treatment of the kinetic equations arising from polymer reactions are presented. The new feature of the suggested approach is the application of a Galerkin procedure using sets of orthogonal polynomials over a discrete variable (which, of course, in the case of polymer reactions is the polymer degree). The new approach may open the door to a new reliable low dimensional treatment of complex polymer reactions.

SC 90-8. C. Chevalier; H. Melenk; J. Warnatz. *Automatic Generation of Reaction Mechanisms for Description of Oxidation of Higher Hydrocarbons.*

Abstract: Oxidation mechanisms even for rather simple hydrocarbons like heptane consist due to the occurrence of many isomeric structures of thousands of reactions of hundreds of species. The automatic generation of these reaction mechanisms using artificial intelligence means is described. Results are presented for *n*-heptane-air mixtures, where a hand-written reaction mechanism tested against experimental data is available.

SC 90-9. Peter Deuflhard; Florian A. Potra. *Asymptotic Mesh Independence of Newton-Galerkin Methods via a Refined Mysovskii Theorem.*

Abstract: The paper presents a theoretical characterization of the often observed asymptotic mesh independence of Newton's method, which means that Newton's method applied to discretized operator equations behaves essentially the same for all sufficiently fine discretizations. The theory does not need any *uniform* Lipschitz assumptions that were necessary in comparable earlier treatments. The refined Newton-Mysovskii theorem, which will be of interest in a wider context, gives both existence and uniqueness of the solution and quadratic convergence for sufficiently good starting points. Attention is restricted to Galerkin approximations even though similar results should hold for finite difference methods - but corresponding proofs would certainly be more technical. As an illustrative example, adaptive 1-D collocation methods are discussed.

SC 90-10. Ralf Kornhuber; Rainer Roitzsch. *Self Adaptive Finite Element Simulation of Reverse Biased *pn*-Junctions.*

Abstract: The potential distribution of reverse biased *pn*-junctions can be described by a double obstacle problem for the Laplacian. This problem is solved by a self adaptive Finite Element Method involving automatic termination criteria for the iterative solver, local error estimation and local mesh refinement. Special attention is paid to the efficient resolution of the geometries typically arising in semiconductor device simulation. The algorithm is applied

to a reverse biased *pn*-junction with multi-step field plate and stop-electrode to illustrate its efficiency and reliability.

SC 90-11. Karin Gatermann; Andreas Hohmann. *Symbolic Exploitation of Symmetry in Numerical Pathfollowing.*

Abstract: Parameter-dependent systems of nonlinear equations with symmetry are treated by a combination of symbolic and numerical computations. In the symbolic part of the algorithm the complete analysis of the symmetry occurs, and it is here where symmetrical normal forms, symmetry reduced systems, and block diagonal Jacobians are computed. Given a particular problem, the symbolic algorithm can create and compute through the list of possible bifurcations thereby forming a so-called tree of decisions correlated to the different types of symmetry breaking bifurcation points. The remaining part of the algorithm deals with the numerical pathfollowing based on the implicit reparametrisation as suggested and worked out by Deuffhard/Fiedler/Kunkel. The symmetry preserving bifurcation points are computed using recently developed augmented systems incorporating the use of symmetry.

SC 90-12. Artur Walter. *Improvement of Incomplete Factorizations by a Sparse Secant Method.*

Abstract: In the present paper, the improvement of an incomplete factorization of a non-symmetric matrix A is discussed. Starting from the ideas of sparsity preserving quasi-Newton methods, an algorithm is developed which improves the approximation of A by the incomplete factorization maintaining the sparsity structure of the matrices. No renumbering of the unknowns or the admittance of additional fill-in is necessary. The linear convergence of the algorithm is proved under the assumption, that L and U^* have the same sparsity structure and an incomplete factorization with some reasonable approximation property exists. In combination with this algorithm, the method of incomplete factorization and its several modifications are applicable to a wider class of problems with improved convergence qualities. This is shown by a numerical example.

SC 90-13. Folkmar A. Bornemann. *An Adaptive Multilevel Approach to Parabolic Equations II. Variable-Order Time Discretization Based on a Multiplicative Error Correction.*

Abstract: In continuation of part I this paper develops a variable-order time discretization in Hilbert space based on a multiplicative error correction. Matching of time and space errors as explained in part I allows to construct an adaptive multilevel discretization of the parabolic problem. In contrast to the extrapolation method in time, which has been used in part I, the new time discretization allows to separate space and time errors and further to solve fewer elliptic subproblems with less effort, which is essential in view of the application to space dimension greater than one. Numerical examples for space dimension one are included which clearly indicate the improvement.

SC 90-14. Jörg Ackermann; Michael Wulkow. *MACRON - A Program Package for Macromolecular Kinetics.*

Abstract: This paper presents the new program package MACRON for the simulation of macromolecular kinetics including standard chemical reactions. Such problems lead to countable (possibly) infinite systems of ordinary differential equations (ODE's), which are numerically treated by the so-called discrete Galerkin method here. By a chemical compiler

the required analytical preprocessing is performed, such that the complete reaction system, standard kinetics as well as macromolecular reactions, can be entered in the chemical formalism. Typical macromolecular reaction steps are chain addition, termination, chain transfer and degradation (cracking). In order to ensure efficiency and reliability, high sophisticated numerical routines are built within the package. MACRON can be used without a detailed knowledge of the used numerical methods. As an illustration the application of MACRON to some realistic problems is presented.

SC 90-15. Michael Wulkow; Jörg Ackermann. *Numerical Simulation of Macromolecular Kinetics - Recent Developments.*

Abstract: The mathematical modeling of macromolecular reactions leads to countable (possibly infinite) systems of ordinary differential equations (CODE's). This paper reviews two recent developments of the so-called discrete Galerkin method, which has been developed for the numerical treatment of countable systems, which arise e.g. in polymer chemistry. The first approach can be considered as a method of lines with moving basis functions and has been implemented recently in the program package MACRON. The second type of the Galerkin method is characterized by a so-called outer time discretization of the complete problem and an appropriate and efficient solution of the arising subproblems. This method is realized in the research code CODEX.

SC 90-16. Hans-Christian Hege; Hinnerk Stüben. *Vectorization and Parallelization of Irregular Problems via Graph Coloring.*

Abstract: Efficient implementations of irregular problems on vector and parallel architectures are generally hard to realize. An important class of problems are Gauß-Seidel iteration schemes applied to irregular data sets. The unstructured data dependences arising there prevent restructuring compilers from generating efficient code for vector or parallel machines. It is shown, how to structure the data dependences by decomposing the underlying data set using graph coloring techniques and by specifying a particular execution order already on the algorithm level. Methods to master the irregularities originating from different types of tasks are proposed. An application is given and some open issues and future developments are discussed.

SC 90-17. Daoliu Wang. *Symplectic Difference Schemes for Perturbed Hamiltonian Systems.*

Abstract: In this paper we consider symplectic difference schemes for perturbed Hamiltonian systems of integrable ones, which can cover many important problems. Symplectic difference schemes for general Hamiltonian systems can also be used to these problems. But the perturbation property has not been paid proper attention to, which is important in the method proposed here. Numerical simulation shows that, for this method the time step size can be taken quite large and the qualitative property, such as preserving invariant tori, is also better than usual symplectic difference schemes.

SC 90-18. H. Caprasse; J. Demaret; K. Gatermann; H. Melenk. *Power-Law Type Solutions of Fourth-Order Gravity for Multidimensional Bianchi I Universes.*

Abstract: We study the power-law type solutions of the fourth order field equations derived from a *generic* quadratic Lagrangian density in the case of multidimensional Bianchi

I cosmological models. All the solutions of the system of algebraic equations have been found, using computer algebra, from a search of the Groebner bases associated to it. While, in space dimension $d = 3$, the Einsteinian Kasner metric is still the most general power-law type solution, for $d > 3$, no solution, other than the Minkowski space-time, is common to the three systems of equations associated with the three contributions to the Lagrangian density. In the case of a pure Riemann-squared contribution (suggested by a recent calculation of the effective action for the heterotic string), the possibility exists to realize a splitting of the d -dimensional space into a $(d - 3)$ -dimensional internal space and a physical 3-dimensional space, the latter expanding in time as a power bigger than 2 (about 4.5 when $d = 9$).

SC 90-19. U. Nowak. *A Note on Dynamic Sparsing in Stiff Extrapolation Methods.*

Abstract: Based on a simple stability analysis for the semi-implicit Euler discretization a new dynamic sparsing procedure is derived. This procedure automatically eliminates "small" elements of the Jacobian matrix. Thus, the amount of work needed to handle the linear algebra within a semi-implicit extrapolation integrator can be reduced drastically. Within the course of integration the sparsing criterion, which decides what "small" means, is dynamically adapted to ensure stability of the discretization scheme. Thus, stepsize restrictions due to instability can be avoided. Numerical experiments for quite different problems show robustness and efficiency of this dynamic sparsing technique.

SC 90-20. Arthur Walter. *Sparse Secant Methods for the Iterative Solution of Large Nonsymmetric Linear Systems.*

Abstract: A variety of secant methods has been revisited in view of the construction of iterative solvers for large nonsymmetric linear systems $Ax = b$ stemming from the discretization of convection diffusion equations. In the first section, we tried to approximate A^{-1} directly. Since the sparsity structure of A^{-1} is not known, additional storage vectors are needed during the iteration. In the next section, an incomplete factorization LU of A is the starting point and we tried to improve this easy invertible approximation of A . The update is constructed in such a way that the sparsity structure of L and U is maintained. Two different sparsity preserving updates are investigated from theoretical and practical point of view. Numerical experiments on discretized PDE's of convection diffusion type in 2-D with internal layers and on "arbitrary" matrices with symmetric sparsity structure are given.

SC 90-21. Arthur Walter. *Convergence Behavior of Sparse Secant Methods for Incomplete Factorization*

Abstract: Recently, secant methods for large sparse nonsymmetric linear systems were introduced and investigated in a series of papers by the author. They are very interesting since they need to additional storage vectors and renumbering of the unknowns during the iteration. This paper is focused on sparsity preserving updates of incomplete factorization of a matrix A . This matrix is given by the finite element discretization of a convection diffusion type PDE in two dimensions with the streamline diffusion method. In different numerical examples it is shown, that the proposed method behaves like the conjugate gradient method for symmetric positive definite matrix A . This is also shown theoretically. As a consequence, some improvements of the numerical convergence behavior are proposed and tested.

5.2 Technical Reports

TR 90-1. Karin Gatermann. *Gruppentheoretische Konstruktion von symmetrischen Kubaturformeln.*

Abstract: G -invariant cubature formulas for numerical integration over n -dimensional, G -invariant integration regions are computed symbolically. The nodes are the common zeros of some d -orthogonal polynomials which build an H -basis of an ideal. Approaches for these polynomials depending on parameters are made with the help of the theory of linear representations of a group G . This theory is also used for the effective computation of necessary conditions which determines the parameters. Another approach uses invariant theory and gröbner bases.

TR 90-2. Gerhard Maierhöfer; Georg Skorobohatyj. *Implementierung von parallelen Versionen der Gleichungslöser EULEX und EULSIM auf Transputern.*

Abstract: Im vorliegenden Bericht wird die Parallelisierung zweier numerischer Algorithmen zur Lösung gewöhnlicher Differentialgleichungssysteme 1. Ordnung (explizite und semi-implizite Euler-Diskretisierung und h -Extrapolation) beschrieben. Implementiert wurden die Algorithmen mit OCCAM2 unter TDS (Transputer Development System) mit bis zu 4 Transputern T800. Meßwerte für die erreichten Beschleunigungen werden anhand mehrerer Beispiele von Differentialgleichungssystemen angegeben.

TR 90-3. *CRAY-Handbuch. Einführung in die Benutzung der CRAY X-MP unter UNICOS 5.1*

Abstract: Das CRAY-Handbuch des ZIB beschreibt nach einer grundlegenden Übersicht detailliert die Handhabung von UNICOS-Dateien, die Verwendung von UNICOS-Kommandos und schließlich die (für Benutzer allein zugelassene) Ausführung von Batchjobs auf der CRAY. Neben der Erreichbarkeit der CRAY über das TCP/IP-Netz werden die Compiler FORTRAN, PASCAL und C beschrieben und schließlich auf die Optimierung der Rechenzeit ebenso wie auf die Fehlersuche eingegangen. Ein umfangreicher Anhang führt bereitgestellte Programmpakete, weiterführende Literatur, Zahlenbereiche und Zeichendarstellung an der CRAY auf.

TR 90-4. Hans-Christian Hege. *Datenabhängigkeitsanalyse und Programmtransformationen auf CRAY-Rechnern mit dem FORTRAN-Präprozessor fpp.*

Abstract: The FORTRAN preprocessor **fpp** in the newly introduced Autotasking System of CRAY Research allows automatic vectorization and parallelization on basis of a data dependence analysis. An introduction into data dependence analysis is given, showing how data dependence graphs unveil opportunities for program transformations like vectorization and concurrentization. The report contains a complete description of the preprocessor's functionality, its options and directives for increasing the effectiveness of the dependence analyzer and steering the code transformations. Finally, some advice is given for the practical use of **fpp** on CRAY computers.

TR 90-5. M. Grammel; G. Maierhöfer; G. Skorobohatyj. *Parallel Trapex in POOL-T Die Implementierung eines adaptiven numerischen Algorithmus in einer parallelen objektorientierten Sprache.*

Abstract: Die Parallelisierung eines vorhandenen sequentiellen Programmes erfolgt im allgemeinen in der Weise, daß es auf Grund einer Analyse der Datenabhängigkeiten in mehrere parallel ausführbare Teile zerlegt wird, die ihrerseits sequentiell ablaufen und untereinander Daten austauschen. Eine parallele Programmiersprache sollte diese Vorgehensweise unterstützen, indem sie Sprachmittel zur Verfügung stellt, mittels derer sich die Modularisierung und Kommunikation bequem formulieren läßt. Nun läßt sich prinzipiell jede vorhandene sequentielle Programmiersprache um solche Konstrukte erweitern; günstiger in Hinblick auf die Strukturierung eines parallelen Programmes erscheint es aber möglicherweise, eine solche Programmiersprache zu verwenden, die die genannten Konzepte als elementare zur Verfügung stellt. Dies ist offensichtlich bei objektorientierten Programmiersprachen der Fall. Im vorliegenden Bericht wird an Hand eines Beispiels - TRAPEX -, das in POOL-T implementiert wurde, untersucht, inwieweit eine objektorientierte Sprache zur effektiven Programmierung eines numerischen Algorithmus geeignet ist.

TR 90-6. Peter Deuflhard; Andreas Hohmann. *Einführung in die Numerische Mathematik.*

Abstract: Diese Vorlesung ist eine Einführung in die Numerische Mathematik als einem der drei Bereiche (neben den Naturwissenschaften und der Informatik) des am besten mit dem Begriff *Scientific Computing* charakterisierten Forschungsgebietes. Aufgabe dieser relativ jungen Wissenschaft ist die Entwicklung von Rechenverfahren für Probleme aus den Naturwissenschaften mit Hilfe mathematischer Methoden.

TR 90-7. Peter Deuflhard. *Zuses Werk weiterdenken.*

Festvortrag anlässlich des 80. Geburtstages von Konrad Zuse gehalten am 29. Oktober 1990 an der Technischen Universität Berlin - redigierte Fassung -.

TR 90-8. Michael Wulkow. *Numerical Treatment of Countable Systems of Ordinary Differential Equations.*

Abstract: Countable systems of ordinary differential equations appear frequently in chemistry, physics, biology and medicine. They can be considered as ordinary differential equations in sequence spaces. In this work, a full adaptive algorithm for the computational treatment of such systems is developed. The method combines time discretization with extrapolation in Hilbert spaces with a discrete Galerkin approach as discretization of the stationary subproblems. The Galerkin method is based on orthogonal functions of a discrete variable, which are generated by certain weight functions. A theory of countable systems in the associated weighted sequence spaces is developed as well as a theory of the Galerkin method. The Galerkin equations can be assembled either by use of analytical properties of the orthogonal functions or numerically by a multilevel summation algorithm. The resulting algorithm CODEX is applied to many examples of technological interest, in particular from polymer chemistry.

TR 90-9. R. Roitzsch; R. Kornhuber. *BOXES - a Program to Generate Triangulations from a Rectangular Domain Description.*

Abstract: BOXES computes a triangulation from a 2D domain description which consists of an arbitrary set of rectangles. Each rectangle may have attributes to control the triangulating process, define subdomain classes, or specify boundary conditions. The output of the program can be used as a coarse grid for KASKADE or one of its variants. Additional features are extensive checking of the user input, graphical display, and simple editing.

TR 90-10. U. Nowak; L. Weimann. *A Family of Newton Codes for Systems of Highly Nonlinear Equations Algorithm, Implementation, Application.*

Abstract: This report presents new codes for the numerical solution of highly nonlinear systems. They realize the most recent variants of affine invariant Newton techniques due to Deuffhard. The standard method is implemented in the code NLEQ1, whereas the code NLEQ2 contains a rank reduction device additionally. The code NLEQ1S is the sparse version of NLEQ1, i.e. the arising linear systems are solved with sparse matrix techniques. Within the new implementations a common design of the software in view of user interface and internal modularization is realized. Numerical experiments for some rather challenging examples illustrate robustness and efficiency of algorithm and software.

TR 90-11. U. Nowak; L. Weimann. *GIANT - A Software Package for the Numerical Solution of Very Large Systems of Highly Nonlinear Equations.*

Abstract: This report presents the final realization and implementation of a global inexact Newton method proposed by Deuffhard. In order to create a complete piece of software, a recently developed iterative solver due to Deuffhard, Freund, Walter is adapted and serves as the standard iterative linear solver. The new software package GIANT (Global Inexact Affine Invariant Newton Techniques) allows an efficient and robust numerical solution of very large scale highly nonlinear systems. Due to the user friendly interface and its modular design, the software package is open for an easy adaptation to specific problems. Numerical experiments for some selected problems illustrate performance and usage of the package.

TR 90-12. U. Nowak; U. Pöhle. *A Family of Extrapolation Codes for ODEs and DAEs - Part I.*

Abstract: This report presents the new implementation of three h-extrapolation integrators. All methods are based on the well-known Euler discretization. The code EULEX is suited to solve non-stiff ordinary differential equations, whereas the code EULSIM is intended for stiff ODEs. The code LIMEX can be applied to solve linearly implicit systems of differential-algebraic equations up to index 1. Within the new implementations a common design of the software in view of user interface and internal modularization is realized. Furthermore, the new codes are now fully vectorizable and a procedure to adapt dynamically the cost coefficients for the order and stepsize control is available. Numerical results for the usual standard test sets are presented.

TR 90-13. Wolfgang K. Giloi. *Konrad Zuses Plankalkül als Vorläufer moderner Programmiermodelle.*

Vortrag, gehalten anlässlich der Akademischen Feier der Technischen Universität Berlin am 29. Oktober 1990 aus Anlaß des 80. Geburtstages von Konrad Zuse.

5.3 Sonstige Reports

1. K.-D. Engel, G. Schurmann, A. Scheller, J. Dittrich, Chr. Egelhaaf, P. Helbig, U. Holzmann, S. Lehnert, E. Moeller, K.-H. Weiss
BERKOM Referenzmodell II, Version 2.0, Application-Oriented Recommendations
Januar 1990
2. K.-D. Engel, G. Schurmann, A. Scheller, J. Dittrich, Chr. Egelhaaf, P. Helbig, U. Holzmann, S. Lehnert, E. Moeller, K.-H. Weiss
BERKOM Referenzmodell II, Version 3.0, Application-Oriented Recommendations
Juni 1990
3. K.-D. Engel, G. Schurmann, A. Scheller, J. Dittrich, Chr. Egelhaaf, P. Helbig, U. Holzmann, S. Lehnert, E. Moeller, K.-H. Weiss
BERKOM Referenzmodell II, Version 3.1, Application-Oriented Recommendations
September 1990
4. K.-D. Engel, G. Schurmann, A. Scheller, J. Dittrich, Chr. Egelhaaf, P. Helbig, U. Holzmann, S. Lehnert, E. Moeller, K.-H. Weiss
Synchronizing the Presentation of Multimedia Objects, Version 1.0
September 1990
5. K.-D. Engel, G. Schurmann, A. Scheller, J. Dittrich, Chr. Egelhaaf, P. Helbig, U. Holzmann, S. Lehnert, E. Moeller, K.-H. Weiss
Definition of an Audio Architecture including a proposal for an ODA Audio Content Architecture, Version 1.0
September 1990
6. A. Gavras, G. Goldacher, K. Jacobsen, T. Luckenbach, R. Ruppelt, R. Schmidt
M. Vogelsänger
Systemdokumentation BERGATE I
Projektbericht Juni 1990
7. J. Diemer, H. C. Hege, M. Scheibe, D. Weidenhammer
SWS (Scientific Workstations) - Einsatz von Workstations bei netzverteilten Anwendungen
HMI-Bericht: Präsentation 1987 - 1990, Bereich Datenverarbeitung und Elektronik, HMI,
S. 25 - 31, August 1990
8. J. Lügger, W. Dalitz
M 4.001.02
Die elektronische Softwarebibliothek eLib - mit NetLib Fernleihe
eLib Prospekt, eLib-Manualseiten, Mai 1990
9. J. Lügger, W. Dalitz
M 4.002.01
NetLib & RedLib - im Dialog mit der eLib
NetLib & RedLib Prospekt, eLib-Manualseiten, Dezember 1990
10. G. Goldacker, K. Jacobsen, T. Luckenbach, R. Ruppelt, R. Schmidt, M. Vogelsänger:
Netzkopplungen im BERKOM-Projekt: BERGATE,
GMD-Jahresbericht 1989: Sankt Augustin, 1990

5.4 Veröffentlichungen

1. J. Ackermann, M. Wulkow:
Numerical Simulation of Macromolecular Kinetics - Recent Developments
Tagungsband IUPAC Working Party (1990)
2. F.A. Bornemann:
An Adaptive Multilevel Approach to Parabolic Equations
IMPACT of Computing in Science and Engineering, Vol. 2, No. 4 (1990)
3. B. Butscher, A. Gavras, T. Luckenbach, X. Xu:
BERGATE - A System for Interconnecting Local Area Networks via Broadband-ISDN
Proceedings of the 5th Jerusalem Conference on Information Technology, p. 195 - 205
Jerusalem, Israel 1990
4. P. Deuflhard:
Uniqueness Theorems for Stiff ODE Initial Value Problems.
In: D. F. Griffiths and G. A. Watson (ed.): Numerical Analysis 1989, Proceeding 13th
Biennial Conference on Numerical Analysis 1989, Dundee, Longman Scientific &
Technical, Harlow, Essex, UK, p. 74 - 205, (1990)
5. P. Deuflhard, R. Freund, A. Walter:
Fast Secant Methods for the Iterative Solution of Large Nonsymmetric Linear Systems.
IMPACT of Computing in Science and Engineering, Vol. 2, No. 3, p. 244 - 276, (1990)
6. P. Deuflhard, U. Nowak, M. Wulkow:
Recent developments in chemical computing
Computers & Chemical Engineering, Vol. 14, No. 11, p. 1249 - 1258, (1990)
7. K. Gatermann:
Symbolic Solution of Polynomial Equation Systems with Symmetry.
Proceedings of ISSAC '90 (Tokyo / Japan, August 20 - 24, 1990) ACM Press, New York,
p. 112 - 119, (1990)
8. H. C. Hege, A. Nakamura, H. Stüben:
The nonlinear $O(3)$ -sigma-model on random lattices with different topology
Phs. Lett. B 244, p. 473 - 478, (1990)
9. R. H. W. Hoppe, R. Kornhuber:
*Multi-Grid Solution of Two Coupled Stefan Equations Arising in Induction Heating
of Large Steel Slabs.*
Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 30, p. 779 - 801 (1990)
10. R. Kornhuber, R. Roitzsch:
On Adaptive Grid Refinement in the Presence of Internal or Boundary Layers.
IMPACT of Computing in Science and Engineering, Vol. 2, No. 1, p. 40 - 72 (1990)
11. G. Maierhöfer:
Ein paralleler adaptiver Algorithmus für die numerische Integration.
In: G. Grebe (Hrsg.): Parallele Datenverarbeitung mit dem Transputer
Informatik Fachberichte 237, Springer Verlag Berlin-Heidelberg-New York (1990)

12. H. Melenk:
Solving Polynomial Equation Systems by Groebner Type Methods.
CWI Quarterly, Vol. 3, No. 2, Amsterdam, p. 121 - 136, (June 1990)

5.5 Vorträge

F. BORNEMANN

21.2.1990
Adaptive Methoden für parabolische Differentialgleichungen
Universität Stuttgart

23.2.1990
Adaptive Multilevel Discretization in Time and Space
GAMM-Seminar on Adaptive Methods
Universität Heidelberg

27.4.1990
An Adaptive Multilevel Approach to Parabolic Equations in One Space Dimension
Halbleiterseminar AdW - ZIB - TUB
Konrad-Zuse-Zentrum Berlin

4.12.1990
An Adaptive Multilevel Approach to Parabolic Equations in Two Space Dimension
TU Dresden

13.12.1990
Simultane adaptive Zeit- und Multilevel-Ortsdiskretisierung bei parabolischen
Differentialgleichungen in zwei Raumdimensionen
Mathematik-Tagung Berlin
Freie Universität Berlin

H. BUSCH

6. 6. 1990 und 5. 12. 1990
UNICOS auf der CRAY: Aktuelle Fragen und Ausblicke
Benutzerkolloquium der ZRZ, Technische Universität Berlin

25./26. 10. 1990
UNICOS- und TCP/IP-Vernetzung im Land Berlin
UNICOS-Arbeitskreis/Regionales Rechenzentrum der Universität Stuttgart (RUS)

P. DEUFLHARD

2.3.1990
Adaptive Multilevel-Methoden
Halbleiterseminar ZIB - TUB,
Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB), Berlin

29.3.1990

Adaptive Multilevel Finite Element Methods for PDE's
Seminarvortrag, Istituto Di Analisi Numerica
Universität Pavia / Italien

4.4.1990

Global Inexact Newton Methods for the Solution of Nonlinear PDE's
Copper Mountain Conference
Denver, Colorado / USA
Invited talk

6.4.1990

Adaptive Multilevel Finite Element Methods
Seminarvortrag, Rice University
Houston, Texas / USA

27.4.1990

Adaptive Newton-Multilevel-Methoden für nichtlineare partielle Differentialgleichungen
Halbleiterseminar Akademie der Wissenschaften Berlin-Ost (AdW) - ZIB - TUB,
Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB), Berlin

22.10.1990

Iterative Lösung sehr großer linearer und nichtlinearer Gleichungssysteme
Christian Doppler Laboratorium
Wien / Österreich

27.11.1990

Moderne numerische Methoden für Anlagenbau, Verbrennungsprozesse und Aidsausbreitung
Institut für Mathematik der Universität Augsburg
Vorlesungsreihe "Überblicke Mathematik"
Augsburg

4.12.1990

Asymptotische Gitterunabhängigkeit von Newton-Galerkin-Methoden
Institut für Numerische Mathematik der Technischen Universität Dresden
Dresden

H.-H. FRESE

19. 4. 1990

Auswahl und Beschaffung von Großrechnern für wissenschaftliche Rechenzentren
Humboldt-Universität zu Berlin

23. 4. 1990

Nutzung des Vektorrechners Siemens VP200 im RRZN Hannover
ZIB

21. 6. 1990

Die Programmiersprache ADA und ihre Sprachübersetzer im BS2000
Benutzerkolloquium der ZEDAT, Freie Universität Berlin

8. 11. 1990
Der Norddeutsche Vektorrechnerverbund
Benutzerkolloquium der ZEDAT, Freie Universität Berlin

29. 11. 1990
Die NAG Fortran Library
Humboldt-Universität zu Berlin

5. 12. 1990
Der niedersächsische Vektorrechner
Benutzerkolloquium der ZRZ, Technische Universität Berlin

K. GATERMANN

20.–24.8.1990
Symbolic Solution of Polynomial Equation Systems with Symmetry
International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation (ISSAC-90)
Tokyo, Japan

29.11.1990
Ausnutzung der Symmetrie durch Computer Algebra bei numerischer Pfadverfolgung
Karl-Weierstraß-Institut, Berlin

A. GAVRAS

28.11.1990
BERGATE - Connecting VMEbus System to MAP, TOP and Broadband ISDN
Second IFIP International Workshop on Protocols for High-Speed Networks,
Palo Alto, California

J. GOTTSCHESKI

9. 2. 1990
Organisatorische Aspekte der Datenverarbeitung für die Wissenschaft
Rechenzentrum des Ministeriums für Wissenschaft und Technik Berlin, DDR

20. 2. 1990
Sicherung: Erfordernisse und Möglichkeiten im Bereich der Organisation
Arbeitstagung zum Thema "COCOM-Regelungen und deren Handhabung"
Rechenzentrum der RWTH Aachen

H. C. HEGE

9. 10. 1990
Optimierung und Vektorisierung an CRAY-Rechnern - ein systematischer Zugang
Workshop "Vektor- und Parallelverarbeitung", TU Braunschweig

1. 11. 1990
Optimierung und Vektorisierung von Programmen am Beispiel der CRAY X-MP
Benutzerkolloquium der ZEDAT, Freie Universität Berlin

D. KEHL

14. 2. 1990

Anwendung des Textverarbeitungs-Programms TeX im Rahmen der TUB-Sammellizenz auf MS-DOS-Rechnern

Benutzerkolloquium der ZRZ, Technische Universität Berlin

M. KLATTE

14.6.1990

Arbeitsweisen von Bildhauer und Maler für die Computergraphik

Seminarvortrag, Wilhelm Schickhard Institut, Eberhard-Karls-Universität, Tübingen

25.9.1990

Bezierdreiecke in der Visibilitätsrechnung

Seminarvortrag, Universität Kaiserslautern

R. KORNHUBER

23.2.1990

On adaptive grid refinement in the presence of internal and boundary layers

GAMM - Seminar on Adaptive Methods,
Universität Heidelberg

27.4.1990

Adaptive anisotrope Verfeinerungsstrategien in 2D

Halbleiterseminar Akademie der Wissenschaften Berlin-Ost (AdW) - ZIB - TUB,
Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB), Berlin

14.5.1990

Multigrid methods for the two phase Stefan problem

5. Multigridseminar der Akademie der Wissenschaften Berlin-Ost (AdW)
Eberswalde

15.5.1990

Zum Berufsbild des Mathematikers

Schülerinformationstage der TUB,
Technische Universität Berlin

14.11.1990

Adaptive Finite Elemente Simulation bei Halbleitern

Einladung des "Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen der
Universität Heidelberg,

4.12.1990

Adaptive Finite Elemente Simulation von gesperrten pn-Übergängen

TU Dresden,
Dresden

M. LIEBCHEN

16. 1. 1990

E-Mail - Angebot und Planungen der ZEDAT im Bereich der elektronischen Post
Benutzerkolloquium der ZEDAT, Freie Universität Berlin

5. - 10. 2. 1990

TeX - Einführung in das Textverarbeitungssystem TeX
Benutzerkursus der ZEDAT, Freie Universität Berlin

13. 11. 1989 bis 14. 2. 1990

Kompakteinführung UNIX
Mitwirkung am Benutzerkursus der ZEDAT, Freie Universität Berlin

J. LÜGGER, W. DALITZ

10.1.1990

Präsentation der elektronischen Softwarebibliothek eLib
Leitungsgremium der Fachgruppe "Numerische Software" der GI
IBM Wissenschaftszentrum, Heidelberg

6.4.1990

Demonstration der elektronischen Softwarebibliothek eLib
Leitungsgremium der Fachgruppe "Computer Algebra" der GI
IBM Wissenschaftszentrum, Heidelberg

11.7.1990

Verteilung von Software mittels elektronischer Netze
Technische Universität Hamburg-Harburg, Fachbereich Mathematik und Rechenzentrum

12. 7.1990

Demonstration des Einsatzes der elektronischen Softwarebibliothek eLib
Technische Universität Hamburg-Harburg, Fachbereich Mathematik und Rechenzentrum

G. MAIERHÖFER

17./18.9.1990

Der Einfluß der Programmiersprache auf die Implementierung paralleler adaptiver Algorithmen
TAT '90, Aachen

H. MELENK

2.2.1990

Practical Application of Groebner Bases for the Solution of Polynomial Equation Systems
Conference on Computer Algebra — Developments & Applications,
Laboratoire de Physique Mathématique, Facultés Universitaires de Namur, Brussels
Invited talk

22.-26.5.1990

Practical Application of Groebner Bases for the Solution of Polynomial Equation Systems
IV International Conference on Applications of Computer Algebra in Physical Research,
Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, USSR
Invited talk

15.–20.7.1990

Solution of Polynomial Systems of Equations by Groebner Bases

Minisymposium talk

SIAM Annual Meeting, Chicago, Illinois

W. NEUN

9.5.1990

Very Large Groebner Basis Calculations

Computer Algebra & Parallelism (CAP'90)

Mathematical Sciences Institute, Cornell University, New York

Invited talk

U. NOWAK

16.1.1990

Numerische Lösung von eindimensionalen parabolischen Systemen mit adaptiven und bewegten Gittern

Seminar-Vortrag KFA Jülich, Institut für Festkörperphysik

R. ROITZSCH

8.3.1990

Programmiertechniken und Datenstrukturen für adaptive Verfeinerungen von Triangulierungen

Oberseminar für transonische Strömungen

Institut für Mathematik und Informatik, Universität Stuttgart

C. SARO-LÜDECKE

7.7.1990

Museumsspezifische Anforderungen an die Software

Arbeitstagung des Museumsverbandes Baden-Württemberg, Karlsruhe

20.9.1990

Das Datenbanksystem GOS

EDV Forum am Bergbau- und Industriemuseum Ostbayern, Theuern

11/12.12.1990

EDV-Einsatz in der Museumsdokumentation

Fortbildungsveranstaltung: "Grundlagen der Inventarisierung und Dokumentation kulturhistorischer Museumsbestände" an der Museumsschule Brauweiler

H. SCHULZ

24. 1. 1990

Migrationshilfe für WOTAN

Job- und Filetransfer zwischen der NOS/BE-Cyber der TUB und Rechnern im WOTAN-Netz

Benutzerkolloquium der ZRZ, Technische Universität Berlin

R. WESEL

10.1. / 7. 2. 1990

Das Arbeiten auf der CD-Anlage unter dem Betriebssystem NOS/VE
Mitwirkung am Benutzerkursus der ZEDAT, Freie Universität Berlin

9. 5. / 18. 7. 1990

Das Arbeiten auf der CD-Anlage unter dem Betriebssystem NOS/VE
Mitwirkung am Benutzerkursus der ZEDAT, Freie Universität Berlin

A. WALTER

22.2.1990

Fast Secant Methods for the Iterative Solution of Large Scale Nonsymmetric Linear Systems
GAMM-Seminar "Adaptive Methods", Heidelberg

M. WULKOW

22.2.1990

Computational Treatment of Differential Equations in Banach Spaces
The Fourth International Conference on Computational Mathematics,
University of Benin, Nigeria

20.9.1990

Erfahrung und Überraschungen mit dem Taschenrechner
Schülerseminar
Freie Universität Berlin, FB Mathematik

25.10.1990

Neue Entwicklungen zur numerischen Simulation von Polyreaktionen
Roehm GmbH
Darmstadt

16.11.1990

Rechnermethoden in der Polymerkinetik
DECHEMA, Fachausschuß Reaktorberechnung,
Frankfurt

30.11.1990

Numerical Simulation of Macromolecular Kinetics - Recent Developments
IUPAC Working Party, "Modelling of Polymerization Kinetics and Processes",
Macro Group,
Frankfurt

5.6 Verfügbare Produkte

GRAZIL

GRAZIL ist ein Programm zur Darstellung von Kurven und Funktionsverläufen im 2D-Koordinatensystem. GRAZIL ist in FORTRAN implementiert und benutzt GKS zur grafischen Ausgabe. GRAZIL läuft auf SUN-Workstations unter UNIX mit dem GKS der FU-Berlin sowie auf VAX-Rechnern unter VMS mit dem GKS von GTS-Gral.

eLib on-Line Dienst mit interaktivem Netlib und Redlib-Zugriff

Datex-P: (+Germany) 45050331033 (gleichzeitig WIN-Nummer)
Internet: eLib.ZIB-Berlin.DE (130.73.108.11)
Telefon-Modem: siehe eLib Prospekt

eLib off-Line Dienst

X.400: S=eLib; OU=sc; P=ZIB-Berlin; A=dbp; C=de

EARN/BITNET: eLib@sc.ZIB-Berlin.dbp.de
Internet: elib@eLib.ZIB-Berlin.de
uucp: unido!sc.ZIB-Berlin.dbp.de!eLib

NetLib off-Line Dienst

X.400: S=netlib; OU=sc; P=ZIB-Berlin; A=dbp; C=de

RedLib off-Line Dienst

X.400: S=redlib; OU=sc; P=ZIB-Berlin; A=dbp; C=de

EARN/BITNET: redlib@sc.ZIB-Berlin.dbp.de
Internet: redlib@sc.ZIB-Berlin.de
uucp: unido!sc.ZIB-Berlin.dbp.de!redlib

CODELIB

Das ZIB entwickelt und unterhält eine Sammlung von Algorithmen, genannt CODELIB, für Anwendungen auf dem Gebiet "Scientific Computing". Die folgende Aufstellung umfaßt die Namen der bisher von der Abteilung "Numerische Software-Entwicklung" des ZIB nach Software-Gesichtspunkten bearbeiteten Produkte und ihre kurze Charakterisierung. Ein ausführlicheres Verzeichnis der CODELIB sowie Produktinformationen können vom ZIB angefordert werden.

1. *Große nichtsymmetrische lineare Gleichungssysteme*

GBIT 1 Iterative Sekanten-Methode basierend auf "good Broyden updates" mit passender optimaler Schrittweitenbestimmung

2. *Nichtlineare Gleichungssysteme und Ausgleichsrechnung*

NLEQ1 Newton-Verfahren, vollbesetzte Jacobi-Matrix, ohne Rangentscheidung

NLEQ1S Newton-Verfahren, dünnbesetzte Jacobi-Matrix, ohne Rangentscheidung

NLEQ2 Newton-Verfahren, vollbesetzte Jacobi-Matrix, mit Rangentscheidung

NLSCON Gauß-Newton-Verfahren für nichtlineare Ausgleichsrechnung (evtl. mit nichtlinearen Gleichungsbeschränkungen)

GIANT Inexaktes Newton-Verfahren für sehr große Systeme, iterative Lösung der linearen Gleichungssysteme

3. *Lösung von Anfangswertaufgaben gewöhnlicher Differentialgleichungen*

EULEX Nichtsteife Systeme erster Ordnung, explizite Euler-Diskretisierung mit h-Extrapolation

DIFEX1 Nichtsteife Systeme erster Ordnung, explizite Mittelpunktsregel mit h²-Extrapolation

DIFEXM Nichtsteife Systeme zweiter Ordnung, Störmer-Diskretisierung mit h²-Extrapolation

KEPLEX Nichtsteife Systeme zweiter Ordnung, Kepler-Diskretisierung mit h²-Extrapolation.

EULSIM Steife Systeme erster Ordnung, semi-implizite Euler-Methode mit h-Extrapolation

METAN1 Steife Systeme erster Ordnung, semi-implizite Mittelpunktsregel mit h²-Extrapolation

LIMEX Extrapolationsverfahren mit h-Extrapolation, linear-implizite
differentiell-algebraische Systeme

LARKIN Simulation großer chemischer Reaktionskinetik

4. Lösung von Randwertaufgaben gewöhnlicher Differentialgleichungen

BVPSOL Mehrzielmethode mit explizitem oder semi-implizitem Integrator und Newton Verfahren mit condensing Algorithmus für 2-Punkt-Randwertprobleme (Standardprobleme)

BVPSOG Mehrzielmethode mit explizitem oder semi-implizitem Integrator und Newton Verfahren mit globalem linearen Löser für 2-Punkt-Randwertprobleme (Standardprobleme)

BVPLSQ Mehrzielmethode mit explizitem Integrator DIFEX1 und Gauß-Newton-Verfahren für überbestimmte 2-Punkt-Randwertprobleme

MULCON Mehrzielmethode mit Pfadverfolgungsmethode und condensing Algorithmus für parameterabhängige 2-Punkt Randwertprobleme

5. Stationäre partielle Differentialgleichungen

ELLKASK Adaptives Multilevel-Verfahren mit linearen finiten Elementen für skalare, lineare elliptische Probleme auf beliebigen Gebieten in 2-D

REDUCE

REDUCE ist ein umfangreiches Programmsystem für die interaktive symbolische (und zunehmend auch numerische) Bearbeitung mathematischer Ausdrücke. Neben den Leistungen aus dem Bereich der reinen Computeralgebra (Polynome, rationale Funktionen, komplexe, rationale und modulare Zahlen, Faktorisierung etc.) verfügt REDUCE über einen reichen Schatz an Hilfsmitteln für die verschiedensten Anwendungsbereiche von der reinen Mathematik (Algebra, Matrizen) über Analysis (Differentiation, Integration, Reihenentwicklung, Gleichungslösen, ...) bis hin zu speziellen Wissensgebieten (z. B. Hochenergiephysik). REDUCE wird unter der Leitung von A. C. Hearn (RAND Corporation) an verschiedenen Orten weiterentwickelt, u. a. auch am ZIB. Das ZIB vertreibt REDUCE weltweit für zahlreiche Typen von Workstations und für Supercomputer.

PORTABLE STANDARD LISP (PSL)

PORTABLE STANDARD LISP (PSL) ist ein Dialekt der Programmiersprache LISP, der speziell für hohe Ausführungsgeschwindigkeit ausgelegt ist. Das System REDUCE baut auf PSL auf, jedoch hat PSL einen weiteren Einsatzbereich, z. B. für die Unterstützung von Expertensystemen. PSL wurde im ZIB auf zahlreiche Rechnertypen übertragen und weltweit vertrieben, meist im Zusammenhang mit REDUCE.

5.7. Gastvorträge im ZIB

16.1.1990

Dr. Jos Maubach, University of Nijmegen, Nijmegen / Niederlande
Sparsity Patterns of Hierarchical Matrices

23.1.1990

Prof. Dr. Martin Grötschel, Universität Augsburg
Optimale Auslegung von Kommunikationsnetzwerken

30.1.1990

Prof. Dr. Harry Yserentant, Universität Dortmund
Vorkonditionierung bei Multilevel-FEM in 2-D und 3-D

6.2.1990

Dr. Alastair Spence, School of Mathematical Sciences, University of Bath / England
The Calculation of Hopf Bifurcation Points in Large Systems with Application to the Navier-Stokes Equations

13.2.1990

Dipl.-Phys. Dipl.-Math. Jürgen Lorenz, Fraunhofer Institut, Arbeitsgruppe für integrierte Schaltungen, Erlangen
Physikalische und mathematische Probleme bei der Simulation halbleitertechnologischer Fertigungsprozesse

16.2.1990

Prof. Dr. Christian Lengauer, University of Edinburgh / England
Systolierende Kompilation

20.2.90

Dr. Klaus Gärtner, Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Berlin (O)
Iterative Algorithmen zur numerischen Lösung des van-Roosbroeck-Systems im 3D-Fall

3.4.1990

Dr. Ronald F. Boisvert, National Institute of Standards and Technology (NIST)
The NIST Guide to Available Mathematical Software Project

24.4.1990

Dr. Tom W. Fogwell, Gesellschaft für Mathematik und Datenverarbeitung (GMD), St. Augustin
Multigrid Methods in Modelling Multiphase Fluid Flow in Porous Media

22.5.1990

Prof. Franco Brezzi, Università degli Studi di Pavia / Italien
Finite Elements for Mindlin-Reissner Plates

31. 5. 1990

John A. Berton, Ohio State University, Supercomputer Center, Ohio / USA
Introduction to the Animation Production Environment (apE)

7.6.1990

Prof. Tony F. Chan, University of California at LA (UCLA), Los Angeles / USA
Parallel Multilevel Algorithms for PDEs

12.6.1990

Prof. George D. Byrne, EXXON Research and Engineering Company, Annandale / USA
Latest developments with VODPK, the Krylov variant of VODE

26.6.1990

Prof. Pieter W. Hemker, Mathematisch Centrum Amsterdam / Niederlande
An adaptive multigrid approach for the solution of the 2D semiconductor equations

3.7.1990

Prof. Li Kaitai, Xi'an University / China
Approximate Inertial Manifold Method for Turbulent Flow

17.7.1990

Dipl.-Math. E. Bänsch, Universität Bonn
Lokale Verfeinerung von Tetraedernetzen

19.7.1990

Dr. rer. nat. Wolfhard Janke, Institut für Theoretische Physik der FU Berlin
Neue Methoden in Monte-Carlo-Simulationen von Gittermodellen der statistischen Physik

9.10.1990

Dr. Anthony C. Hearn, The RAND Corporation, Santa Monica / USA
Algebraic Computation Comes of Age

16.10.1990

Prof. Dr. Johan Van Hulzen, University of Twente, Enschede / Niederlande
Construction of Jacobians and Hessians: A Case Study in Automated Program Generation

18. 10. 1990

Dr. M. F. Guest, S.E.R.C. Daresbury Laboratory / U. K.
Concurrent Supercomputing at S.E.R.C. Daresbury Laboratory

13.11.1990

Prof. Dr. Roland Bulirsch, TU München
Optimale Steuerungen in Luft- und Raumfahrt

11.12.1990

Prof. Dr. Achi Brandt, The Weizmann Institute of Science, Rehovot / Israel
Recent Projects in Multigrid Methods

18.12.1990

Dr. Gerhard Wachutka, ETH Zürich / Schweiz
Das thermodynamische Modell: Ein vereinheitlichter theoretischer Rahmen zur Simulation von Halbleiterbauelementen

5.8 Arbeitskreise, Kurse, Tagungen im ZIB

19.1.1990 und 2.3.1990

Gemeinsames Halbleiter-Seminar TUB - ZIB

6. 3. 1990

Internes Seminar ZIB / Regionales Rechenzentrum der Universität Stuttgart

5. 4. 1990

Seminar der CRAY Research GmbH (Dr. R. Johanni)

Einführung in X-Windows

27.4.1990

Gemeinsames Halbleiter-Seminar AdW - ZIB - TUB

16. 5. 1990

Fachgespräch *Supercomputeranwendungen in der Chemie*

18. 5. 1990

Fachgespräch *Supercomputeranwendungen in der Physik*

22. 5. 1990

Fachgespräch *Supercomputeranwendungen in der Klima- und Umweltforschung*

Fachgespräch *Supercomputeranwendungen in den Ingenieurwissenschaften*

17./18.9.1990

Arbeitskreis *Software für Benutzer von Parallel- und Vektorrechnern an wissenschaftlichen Rechenzentren.*

Leiter des AK: H. Busch

6. Tagung, Universität Kiel

9.11.1990

Sitzung des DECHEMA-Fachausschusses "Anwendung elektronischer Rechengereäte in der Chemischen Technik";

Präsentation "Chemical Computing am ZIB"

5.9 Gäste

4.2. - 9.2.1990

Dr. Roland Freund, Universität Würzburg

Kooperation mit P. Deuflhard, A. Walter

1.3. - 2.3.1990

Univ.-Doz. Dr. Christian Lubich, Helsinki University of Technology / Finnland

Zusammenarbeit mit P. Deuflhard

1.7. - 29.7.1990

Prof. Dr. Florian Potra, University of Iowa / USA

Zusammenarbeit mit P. Deuflhard

29.7. - 14.8.1990

Prof. Dr. Christian Lengauer, University of Edingburgh / England

Zusammenarbeit mit P. Deuflhard, B. Erdmann, H. Melenk, U. Maierhöfer, U. Nowak, R. Roitzsch

4.9. - 5.9.1990

Dr. Uwe Risch, TU Magdeburg

Zusammenarbeit mit A. Walter

4.9. - 5.9.1990

Dr. G. Lube, TU Magdeburg

Zusammenarbeit mit A. Walter

21.10. - 14.10.1990

Dr. Bernhard Schmidt, Universität Köln

Zusammenarbeit mit P. Deuflhard, U. Nowak, U. Pöhle

22.10. - 14.10.1990

Prof. Dr. Jürgen Weyer, Universität Köln

Zusammenarbeit mit P. Deuflhard, U. Nowak, U. Pöhle

6.11. - 9.11.1990

Prof. Dr. Bernold Fiedler, Universität Stuttgart

Zusammenarbeit mit F. Bornemann, K. Gatermann, U. Nowak

9.11. - 17.11.1990

Prof. Dr. Christian Lubich, Universität Innsbruck / Österreich

Zusammenarbeit mit U. Nowak, U. Pöhle

27.11. - 29.11.1990

Prof. Dr. Ronald Hoppe, Universität München

Zusammenarbeit mit R. Kornhuber, P. Deuflhard

5.10 Zeitschrift IMPACT

Die Zeitschrift

IMPACT of Computing in Science and Engineering

oder kurz IMPACT erscheint seit 1989. Sie wird von **P. Deuflhard** als **Managing Editor** bei Academic Press, USA, herausgegeben.

Mitherausgeber sind:

I. Babuska, University of Maryland, USA

F. Brezzi, Università di Pavia, Italien

J. Dongarra, University of Tennessee, Knoxville, USA

I. Duff, Harwell Lab., Oxfordshire, Großbritannien

A. M. Erisman, Boeing, Seattle, USA

K. Feng, Academia Sinica, Beijing, VR China

J. Glimm, State University of New York at Stony Brook, USA
W. Hackbusch, Universität Kiel, Bundesrepublik Deutschland
A. C. Hearn, The RAND Corporation, Santa Monica, USA
W. Jäger, Universität Heidelberg, Bundesrepublik Deutschland
E. Krause, RWTH Aachen, Bundesrepublik Deutschland
S. Levin, Cornell University, USA
O. McBryan, University of Colorado, Boulder, USA
J. Murray, University of Oxford, Großbritannien
O. Pironneau, INRIA, Le Chesnay, France
W. C. Rheinboldt, University of Pittsburgh, USA
U. Trottenberg, SUPRENUM GmbH, Bonn, Bundesrepublik Deutschland
J. Warnatz, Universität Stuttgart, Bundesrepublik Deutschland

Die relativ junge Zeitschrift dient als Plattform für einen Dialog zwischen Mathematik und Informatik auf der einen Seite sowie Natur- und Ingenieurwissenschaften auf der anderen Seite.

6. Organisatorisches

Das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) wurde durch Gesetz über das Zentrum für Informationstechnik (ZInfG) vom 17. Juli 1984 gegründet. Das ZIB ist eine rechtsfähige Anstalt des öffentlichen Rechts mit kaufmännischer Buchführung. Zur Erfüllung seiner Aufgaben erhält das ZIB einen Zuschuß des Landes Berlin, das auch Dienstherr und Arbeitgeber für die Beschäftigten des ZIB ist.

6.1 Organe

Organe des ZIB sind der Verwaltungsrat und der Präsident. Der **Verwaltungsrat** setzte sich im Berichtszeitraum wie folgt zusammen:

Prof. Dr.-Ing. Klaus Dierks, TUB, Vorsitzender
Prof. Dr. Dr. Walter Schunack, FUB
StS Dr. Hans Kremendahl, Senatsverwaltung für Wissenschaft und Forschung
Dr. Reinhard Baumgarten, Senatsverwaltung für Wirtschaft
Prof. Dr. Gerhard Wilhelm Becker, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung
Prof. Dr. Hans H. Stiller, Hahn-Meitner-Institut Berlin GmbH

Im Jahre 1990 tagte der Verwaltungsrat am 15. März und am 19. Juli 1990.

Präsident des ZIB ist Prof. Dr. Peter Deuflhard. Auch im Jahr 1990 ist es nicht gelungen, einen Vizepräsidenten, der zugleich Professor an der Technischen Universität Berlin sein soll, zu gewinnen.

6.2 Wissenschaftlicher Beirat

Der wissenschaftliche Beirat setzt sich unverändert wie folgt zusammen:

Prof. Dr.-Ing. Konrad Zuse	-	Ehrevorsitzender
Prof. Dr. Clemens Baack	-	Heinrich-Hertz-Institut für Nachrichtentechnik Berlin GmbH
Prof. Dr. Karl Ganzhorn	-	IBM Deutschland GmbH, Stuttgart
Herr Lebrecht Metzger	-	Nixdorf GmbH, Berlin
Dr. Heinz Schwärtzel	-	Siemens AG, München
Prof. Dr. Ulrich Trottenberg	-	SUPRENUM GmbH
Prof. Dr. Karl Zander	-	Hahn-Meitner-Institut Berlin GmbH

6.3 Personalrat

Dem Personalrat gehörten 1990 an:

Peter Ertmann - Vorsitzender
Detlef Bayer
Klaus-Dietrich Engel
Jörg-Achim Jacob
Gabriele Kempf

Vertrauensmann der Schwerbehinderten war Wolfgang Maibauer.

6.4 Satzung

Der Entwurf einer Satzung liegt vor. Mit Rücksicht auf den noch nicht berufenen Vizepräsidenten ist diese noch nicht verabschiedet worden.

6.5 ZIB-Fellows

Das Konrad-Zuse-Fellowship wird von Präsident oder Vizepräsident des ZIB vergeben an wenige, ausgewählte Wissenschaftler aus den Bereichen Scientific Computing oder Computer Science. Gedacht ist insbesondere an jüngere Wissenschaftler (ab Promotion), die zwar innovative Ideen haben, denen aber die für ihre Ideen notwendige Ausstattung und Infrastruktur an ihrem jeweiligen Arbeitsort nicht zur Verfügung steht.

Im Jahre 1990 wurden von Zuse-Fellows die folgenden Projekte aktiv bearbeitet:

Prof. Dr. M. Möller
Gröbner-Basis-Algorithmen

Prof. Dr. J. Weyer
AIDS-Ausbreitungsmodelle

Prof. Dr. B. Fiedler
Dynamische Systeme

Dr. E. Schrüfer
I. Symbolisch-numerische Algorithmen
II. Parallele Symbolik

Prof. Dr. R. Hoppe
Numerische Lösung freier Randwertprobleme

Dr. Chr. Lubich
Dynamische Simulation von Mehrkörpersystemen

Prof. Dr. Chr. Lengauer
Systolik adaptiver Algorithmen

Dr. G. Wittum
Unvollständige LU-Zerlegung auf lokal strukturierten Gittern

Der Zuse-Fellow Prof. H. Yserentant (früher Universität Dortmund) erhielt 1990 zwei C 4 - Rufe (Universität Ulm, Universität Tübingen). Seit dem 1.4.1990 hat er an der Universität Tübingen einen Lehrstuhl inne. Gemäß den Statuten erlischt damit sein ZIB-Fellowship. Die Kooperation läuft jedoch in veränderter Form weiter.

Der Zuse-Fellow Dr. B. Fiedler (früher Universität Heidelberg) hat seit dem 1.4.1990 eine C 3- Professur an der Universität Stuttgart inne. Sein Fellowship läuft unverändert weiter.

6.6 Mitgliedschaften

Das ZIB ist Mitglied folgender Organisationen:

1. DFN, Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes e. V.
2. Ecudo
3. Forum für Zukunftsenergien
4. NAG Users Association
5. SIAM
6. CUG, CRAY User Group

6.7 Wirtschaftliche Situation

Die wirtschaftliche Situation des ZIB zeichnete sich durch Kontinuität aus. Ausgabenseitig wurde weiterhin mit Rücksicht auf die Berufung eines Vizepräsidenten Zurückhaltung geübt.

Ohne die Gehälter und Dienstbezüge der planmäßigen Mitarbeiter beliefen sich die Aufwendungen im Berichtsjahr auf 7.165 TDM, wovon auf Investition 650 TDM entfielen.

Das Land Berlin leistete einen Zuschuß von 6.670 TDM. Die eigenen Erträge aus Kooperationen und Drittmittelprojekten betrugen im Berichtsjahr 495 TDM.

Ein besonderes Problem bestand darin, daß es auch im Jahr 1990 nicht gelungen ist, für den Neubau des ZIB ein geeignetes Grundstück zu finden. Der Neubau selbst ist finanziell abgesichert und muß wegen vertraglicher Verpflichtungen bis spätestens Ende 1994 beziehbar sein.

6.8 Personal

Für die planmäßigen Mitarbeiter (7 Beamten- und 87 Angestelltenstellen) waren im Haushaltsplan des Landes Berlin nach Durchschnittssätzen 6.610 TDM ausgewiesen.

Der Personalstand entwickelte sich wie folgt:

	<u>1.1.90</u>	<u>31.12.90</u>
Leitung	4	3
Wiss. Personal	32	35
Drittmittelpersonal	4	4
Projektpersonal	--	3
Programmierer und DV-Personal	27,5	27,5
Technisches Personal / Bibliothek	6	6
Verwaltungspersonal	10,5	9,5
Studentische Hilfskräfte	6	7
	=====	=====
Insgesamt	90	95

6.9 Organisationsplan des ZIB

(Stand: Dezember 1990)

