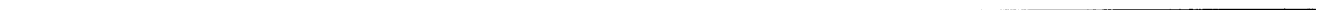


---

Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin



## Jahresbericht 1988



Herausgegeben vom  
Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin  
Heilbronner Strasse 10  
1000 Berlin 31  
Verantwortlich: Dr. Klaus André  
Umschlagsatz und Druck: Verwaltungsdruckerei Berlin

ISSN 0934-5892

# Inhalt

<b>1. Vorbemerkung</b>	<b>1</b>
<b>2. Allgemeines</b>	<b>2</b>
2.1 Rechtliche Grundlage.....	2
2.2 Linien- und Projektorganisation.....	2
2.3 ZIB-Fellows.....	2
2.4 Verwaltungsrat.....	3
2.5 Wissenschaftlicher Beirat.....	4
2.6 Personalrat.....	4
<b>3. Bereich Scientific Computing</b>	<b>5</b>
3.1 Abteilung Numerik.....	5
3.2 Abteilung Symbolik.....	7
3.3 Abteilung Graphik.....	10
3.4 Abteilung Software.....	11
3.5 Abteilung Systolik.....	14
3.6 Abteilung Verteilte Systeme.....	15
<b>4. Bereich Anlagenbetrieb</b>	<b>18</b>
4.1 Entwicklung der Maschinenausstattung.....	18
4.2 Norddeutscher Vektorrechnerverbund.....	22
4.3 Aufbau der Rechnernetze und Dienste.....	26
4.4 Vorbereitung der Migration zu UNICOS.....	28
<b>5. Bereich Wissenschaftlich-Technische Dienste</b>	<b>30</b>
5.1 Bibliothek.....	30
5.2 Reportwesen.....	30
5.3 Labor.....	30
<b>6. Ausstattung</b>	<b>32</b>
6.1 Personal.....	32
6.2 Jahresabschluß 1988.....	32

<b>7. Veröffentlichungen, Vorträge, Produkte</b>	<b>33</b>
7.1 Preprints.....	33
7.2 Technical Reports.....	36
7.3 Sonstige Reports.....	37
7.4 Veröffentlichungen.....	37
7.5 Vorträge.....	38
7.6 Produkte.....	44
7.7 Gastvorträge im ZIB.....	45
7.8 Arbeitskreise, Tagungen im ZIB.....	48
7.9 Informationsbesuche / Präsentationen im ZIB.....	48
7.10 Gäste.....	49
7.11 Zeitschrift IMPACT.....	50

# 1. Vorbemerkung

Das Berichtsjahr 1988 war das *zweite* Jahr, in dem das Konrad-Zuse-Zentrum mit neuer Struktur und Zielsetzung tätig war. Verglichen mit dem vorigen Jahresbericht 1987 zeigt sich, daß der neugegründete Forschungs- und Entwicklungsbereich *Scientific Computing* einen erfreulichen Aufschwung genommen hat - ohne daß der Bereich *Anlagenbetrieb* an Qualität eingebüßt hätte. Die Ergebnisse der Abteilungen *Numerik* (Kap. 3.1) und *Symbolik* (Kap. 3.2) werden inzwischen weltweit zitiert und anerkannt. Es darf wohl gesagt werden, daß das ZIB als Ganzes weitere Schritte in die richtige Richtung unternommen hat. Dies ist ein Resultat der Bemühungen aller einzelnen Mitarbeiter und, nicht zuletzt, der konstruktiven Zusammenarbeit aller Gruppen des Hauses unter Einschluß des Personalrats.

Leider ist es auch in diesem Jahr wiederum nicht gelungen, die der Technischen Universität Berlin zugeordnete Stelle des Vizepräsidenten des ZIB zu besetzen. Es besteht die Gefahr, daß die bereits allzu lange Dauer dieser Berufung zu strukturellen Belastungen innerhalb des ZIB führt. Sämtliche Bemühungen, die Position des Vizepräsidenten mit einem qualifizierten Kollegen zu besetzen, werden vom ZIB voll unterstützt.

Ein erfreulicher Beleg der internationalen Anerkennung des Konrad-Zuse-Zentrums ist die Gründung der neuen Zeitschrift *IMPACT of Computing in Science and Engineering*, für die mir der Verlag Academic Press, USA, die Herausgeberschaft übertragen hat (siehe Kap. 7.9). Dies wird sicherlich dem gesamten ZIB zugute kommen durch weitere Entwicklung internationaler Kontakte.



Prof. Dr. Peter Deufhard

Präsident

## **2. Allgemeines**

### **2.1 Rechtliche Grundlage**

Durch das Gesetz über das Zentrum für Informationstechnik (ZInfG) vom 17. Juli 1984 wurde das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) mit Wirkung vom 1. August 1984 als rechtsfähige Anstalt des öffentlichen Rechts gegründet.

Gesetzliche Aufgabe des ZIB ist, in enger Zusammenarbeit mit den Hochschulen und wissenschaftlichen Einrichtungen in Berlin Forschung und Entwicklung auf dem Gebiet der Informationstechnik zu betreiben und den dazugehörigen Dienstleistungsbedarf zu decken.

Der Senator für Wissenschaft und Forschung übt die Staatsaufsicht aus. Personalwirtschaftsstelle ist der Präsident des ZIB, der insofern der Fachaufsicht des Senators für Wissenschaft und Forschung unterliegt. Präsident und Vizepräsident, die zugleich Professoren an der Freien Universität Berlin beziehungsweise der Technischen Universität Berlin sind, werden für die Dauer von acht Jahren ernannt. Seit dem 22. Mai 1987 ist Prof. Peter Deuflhard Präsident des ZIB. Die Berufung eines Vizepräsidenten war leider auch im Jahr 1988 nicht erfolgreich.

### **2.2 Linien- und Projektorganisation**

Die Grundorganisation des ZIB hat sich prinzipiell bewährt. Dennoch haben im Laufe des Berichtsjahres Entwicklungen zu Überlegungen geführt, einige strukturelle Anpassungen vorzunehmen. Nachdem feststand, daß die Berufung des Vizepräsidenten sich weiter verzögert, wurden die organisatorischen Änderungen schließlich Anfang 1989 vollzogen.

Vorhaben des Forschungs- und Entwicklungsprogramms werden in den Abteilungen durchgeführt. Daneben werden im ZIB Projekte bearbeitet, die abteilungsübergreifend organisiert sind. Insbesondere im Rahmen von Projekten ist die Zusammenarbeit mit Wissenschaftlern aus anderen Einrichtungen üblich und erwünscht.

### **2.3 ZIB-Fellows**

Das Konrad-Zuse-Fellowship wird vom Präsidenten oder Vizepräsidenten des ZIB an wenige, ausgewählte deutsche Wissenschaftler vergeben, die zwar innovative Ideen haben, denen aber die für ihre Ideen notwendige Ausstattung und Infrastruktur an ihren Arbeitsorten nicht zur Verfügung steht.

Im Jahr 1988 wurden von ZIB-Fellows in Kooperation mit ZIB-Mitgliedern die folgenden Projekte bearbeitet:

Prof. Dr. H. Yserentant

*Hierarchische Finite Elemente*

Prof. Dr. M. Möller

*Gröbner-Basis-Algorithmen*

Prof. Dr. J. Weyer

*AIDS-Ausbreitungsmodelle*

Dr. B. Fiedler

*Dynamische Systeme*

Dr. E. Schrüfer

*I. Symbolisch-numerische Algorithmen*

*II. Parallele Symbolik*

## **2.4 Verwaltungsrat**

Dem Verwaltungsrat des ZIB gehörten im Berichtsjahr an:

Prof. Dr. Kurt Kutzler, TUB, Vorsitzender

Prof. Dr. Michael Erbe, FUB

Prof. Dr. George Turner, Senator für Wissenschaft und Forschung

Dr. Wolfgang Watter, Staatssekretär bei Senator für Wirtschaft und Arbeit

Prof. Dr. Gerhard Wilhelm Becker, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung

Prof. Dr. Heinz Lindenberger, Hahn-Meitner-Institut Berlin GmbH

- ausgeschieden im Oktober 1988 -

Prof. Dr. Hans H. Stiller, Hahn-Meitner-Institut Berlin GmbH, seit November 1988.

Im Jahre 1988 tagte der Verwaltungsrat am 28. April und am 5. Dezember.

## 2.5 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

## 2.6 Personalrat

Im Jahre 1988 setzte sich der Personalrat wie folgt zusammen:

Peter Ertmann - Vorsitzender

Detlef Bayer

Klaus-Dietrich Engel

Jörg-Achim Jacob

Gabriele Kempf

Vertrauensmann der Schwerbehinderten ist Wolfgang Maibauer.



## 3. Bereich Scientific Computing

Schwierige Rechenprobleme aus den Natur- und Ingenieurwissenschaften richten sich, was die Methoden zu ihrer Lösung angeht, nicht nach der klassischen Fächereinteilung etwa an Universitäten. Sie verlangen vielmehr ein interdisziplinäres Vorgehen. Typischerweise spielen Methoden der Mathematik (etwa Analysis, Numerische Mathematik, Graphentheorie, Algebra) zusammen mit Methoden der Informatik (Datenstrukturen, formale Sprachen, Parallelverarbeitung) die Schlüsselrolle. Diese Problemlösungsvielfalt wird in jüngster Zeit zunehmend unter dem Begriff *Scientific Computing* zusammengefaßt.

Im folgenden berichten die einzelnen Abteilungen gesondert über ihre Tätigkeit 1988. Es entspricht der oben erläuterten Grundsituation, daß eine Reihe von Projekten abteilungsübergreifend durchgeführt wurden.

### 3.1 Abteilung Numerik

Aufgabe dieser Abteilung ist Forschung im Bereich der algorithmisch orientierten numerischen Mathematik. Schwerpunkt der Arbeit ist die Entwicklung und Untersuchung von Algorithmen für gewöhnliche und partielle Differentialgleichungen, wobei besonderes Augenmerk auf große und nichtlineare Systeme gerichtet wird.

#### Gewöhnliche Differentialgleichungen

Im Berichtszeitraum wurde intensiv an einem Skriptum "Numerik von Anfangswertmethoden für gewöhnliche Differentialgleichungen" gearbeitet, das jedoch erst 1989 erscheint. An neu behandelten Einzelthemen sind zu nennen: a) die Entwicklung einer neuen *internen Skalierung*, welche zu einer Gleichverteilung der globalen Fehler bei der Lösung von Anfangswertproblemen führt, b) ein automatischer Präprozessor zur Erstellung von Randbedingungen bei *asymptotischen Randwertproblemen*, basierend auf dem Funktionalkalkül, c) ein neuer Vorschlag zur Behandlung von Grenzschichtproblemen (Halbleiter, Flammenfronten), die sich in einer Raumdimension modellieren lassen.

Im Rahmen der Zusammenarbeit mit dem Institut für Systemdynamik und Regelungstechnik der Universität Stuttgart wurde eine spezielle Variante des Codes LIMEX (Extrapolationsverfahren für differentiell-algebraische Systeme) entwickelt. Die Integration in das dortige Programmpaket DIVA (numerische Simulation verfahrenstechnischer Prozesse und Anlagen) konnte erfolgreich abgeschlossen werden.

## Affin-invariante Newton-Methoden

Im Berichtszeitraum wurde intensiv an dem Buchmanuskript "Newton Techniques for Highly Nonlinear Problems - Theory, Algorithms, Codes" weitergearbeitet. Dabei haben sich zahlreiche neue Resultate ergeben. Das Buch soll 1989 fertiggestellt werden.

Im Rahmen der Zusammenarbeit mit der Arbeitsgemeinschaft TECFLAM (Mathematische Modellierung technischer Flammen) wurden die Methoden innerhalb eines größeren Programmpaketes zur Untersuchung von vorgemischten laminaren Flammen implementiert und kommen damit in einem technologisch wichtigen Gebiet zum Einsatz (Nowak, Warnatz [8]).

## Adaptive hierarchische Finite-Element-Methoden

In Zusammenarbeit mit dem Zuse-Fellow H. Yserentant sowie seinem Mitarbeiter P. Leinen (beide Universität Dortmund) wurde der adaptive Finite-Element-Code KASKADE für lineare skalare elliptische Probleme zweiter Ordnung über allgemeinem 2-D-Gebiet als Testversion fertiggestellt. Das Konzept des neuen Codes KASKADE gestattet einen flexiblen Ausgleich zwischen iterativem Löser, lokalem Fehlerschätzer und lokaler Gitterverfeinerung - den wesentlichen Komponenten eines adaptiven Codes für partielle Differentialgleichungen. Ohne explizite Benutzung von üblichen Mehrgittertechniken wird die gleiche rechnerische Komplexität erzielt - unabhängig von irgendwelchen Uniformitätseinschränkungen an die gewählten Gitter. Darüberhinaus ist die neue Methode extrem einfach, und alle Rechnungen sind rein lokal - was die Methode insbesondere attraktiv macht mit Blick auf *Parallelrechnen*. Einige wohlbekannt kritische Testprobleme dokumentieren die Effizienz des gewählten algorithmischen Zugangs (Preprint SC 88-5). Als nächstes wurde die Methode erweitert auf den konvektiv-dominierten Fall, der besonders bei Problemen der Flammenausbreitung oder der Halbleiter-Bauelemente-Simulation von Bedeutung ist. Als stabile Erweiterung des üblichen Galerkin-Verfahrens wurde das Stromlinien-Diffusions-Verfahren durch physikalische Überlegungen motiviert und kurz diskutiert. Aufgrund dieser Überlegungen wurden neue Techniken vorgeschlagen: lokale Anpassung der Kantenrichtung, richtungsorientierte Verfeinerungsstrategie ("blaue" Verfeinerung). Es konnte gezeigt werden, daß auf diese Weise die numerische Methode sowohl schneller als auch genauer und stabiler ist als herkömmliche Methoden (Preprint SC 88-9). Diese Arbeit wurde im Rahmen der Arbeitsgemeinschaft TECFLAM vom BMFT gefördert.

## Diffusions-Konvektions-Reaktions-Differentialgleichungen

Die Entwicklung eines Verfahrens zur Lösung von parabolischen Differentialgleichungen in einer Raumdimension wurde weiter vorangetrieben. Die *simultane* Kontrolle des Orts- und des Zeitdiskretisierungsfehlers konnte durch eine spezielle Extrapolationstechnik bzgl. der Orts- und Zeitschrittweite auf eine solide mathematische Basis gestellt werden. Aufbauend auf so gewonnene Fehlerschätzungen wurde eine automatische Schrittweitensteuerung entwickelt, die simultan die optimale Kombination von Ortsschrittweite, Zeitschrittweite und Extrapolationsordnung bzgl. der Zeit wählt. Um die Verwendung von simultan mitbewegten Raumbittern auch in einem derartigen Algorithmus zu ermöglichen, wurde eine spezielle Ankopplungstechnik erarbeitet, die einerseits den Extrapolationsprozess nicht stört und andererseits im asymptotischen Fall (travelling wave) die Verwendung von sehr großen Zeitschrittweiten zuläßt.

## **Diskrete Galerkin-Methoden für Probleme der Polymer-Chemie**

Die rechnerische Behandlung von Differentialgleichungen der Polyreaktionskinetik (mathematisch: Differentialgleichungen im Banachraum) ist ein Problem von technologischer Relevanz. Es wurde eine neue Methode vorgeschlagen, die sich als Galerkin-Methode auf der Basis von Orthogonal-Polynomen von diskreten Variablen charakterisieren läßt. Im Vergleich mit bekannten konkurrierenden Zugängen (statistische Momentenmethode, Galerkin-Methoden für kontinuierliche Polymermodelle) gestattet die neue Methode, die Nachteile der früheren Methoden zu vermeiden sowie ihre jeweiligen Vorteile zu erhalten. Ausgangspunkt ist die Konstruktion eines diskreten, inneren Produkts zu einer vernünftig gewählten Wahrscheinlichkeitsverteilung. Für die "Schulz-Flory-Verteilung" erhält man die diskreten Laguerre-Polynome, während die Poisson-Verteilung auf Charlier-Polynome führt. Numerische Experimente für ausgewählte Polyreaktionsmechanismen illustrieren den Gewinn der vorgeschlagenen Methode. Auf dieser Basis wurde eine Kooperation mit dem Institut für Technische Chemie der TU Berlin (Prof. Reichert) sowie innerhalb einer Working party in IUPAC (=International Union of Pure and Applied Chemistry) begonnen.

## **Mehrgittermethoden für freie Randwertprobleme**

Für das klassische Stefan-Problem der Wärmeleitung mit Phasenwechsel (Preprint SC 88-8) wurden bereits bekannte Mehrgitteralgorithmen erfolgreich modifiziert. Als Beispiel wurde die Methode angewandt auf ein Problem der stahlverarbeitenden Industrie, nämlich die Aufheizung von Stahlstäben durch elektromagnetische Induktion. Dieses industriell relevante Problem führt auf ein System von zwei gekoppelten Stefan-artigen Differentialgleichungen (Preprint SC 88-8). Innerhalb eines Projektes "Numerische Simulation von Verfestigungsprozessen bei mehrkomponentigen Metallegierungen" wurden verwandte Mehrgitterverfahren bereits erfolgversprechend zur Bestimmung der Temperaturverteilung und der Konzentrationsprofile bei stranggegossenen Stählen eingesetzt.

## **Restringierte Singulärwertzerlegung**

Die restringierte Singulärwertzerlegung wurde eingeführt als Verallgemeinerung der wohlbekannteren Singulärwertzerlegung. Die entsprechenden Arbeiten erscheinen erst 1989, wurden jedoch bereits 1988 vorgetragen (siehe Kap. 7.4).

## **3.2 Abteilung Symbolik**

Im Berichtsjahr wurden die bereits in den Vorjahren begonnenen Projekte fortgesetzt, die ja alle einen eher langfristigen Charakter haben.

## **Implementierung von LISP und REDUCE für Cray Rechner**

Aufbauend auf den Arbeiten der Vorjahre wurden die Implementierungen von Portable Standard Lisp (PSL) und REDUCE für die Cray-Rechner weiter angereichert. So sind beide Pakete jetzt nicht nur für die Rechner der Serien Cray 1 und Cray X-MP mit den Betriebssystemen COS und UNICOS verfügbar, sondern auch für Anlagen der Serien Cray Y-MP (im native Mode) und Cray2. Erwähnenswert ist hier auch eine deutliche Steigerung der Verarbeitungsleistung durch eine Verbesserung der Speicherstrukturen (komprimierte Zahldarstellung, vektorielle Garbage-collection). Die Spitzenstellung ("Weltrekord") bezüglich der algebraischen Verarbeitungsleistung (REDUCE Standard Benchmark) konnte gehalten werden.

REDUCE wird vom ZIB weltweit für die Rechner der Cray Serien vertrieben. Bisher wurden zwölf Nutzungslizenzen vergeben nach USA, Großbritannien, Japan und Bundesrepublik Deutschland. Dazu kommen einige Weitergaben von PSL direkt durch Cray Research, Inc.

PSL ist ein LISP-Dialekt, der an dem Bedarf der Computeralgebra orientiert ist und besonders hohe Verarbeitungsgeschwindigkeit aufweist. Cray Research, Inc. hat beschlossen, neben PSL eine eigene LISP Implementierung nach dem COMMON LISP Standard zu erstellen. Auf Grund der im ZIB vorliegenden Erfahrung wurden Mitarbeiter der Abteilung Symbolik gebeten, Cray dabei vor Ort beratend zu unterstützen. Als Gegenleistung stellte Cray Research, Inc. dem ZIB eigene und fremde Softwareprodukte zur Nutzung zur Verfügung und vermittelte dem ZIB die Lizenz zur Weitergabe von PSL an Dritte (Voraussetzung für den Vertrieb von REDUCE). Die vertrauensvolle Zusammenarbeit zwischen der Abteilung Symbolik des ZIB und Cray Research, Inc. konnte so weiter vertieft werden.

## **Lösung polynomialer Gleichungssysteme mit Hilfe von Groebner-Basen**

Gemeinsam mit dem ZIB-Fellow H.M. Möller (Fernuniversität Hagen) wurde das Software-Paket zur Berechnung von Groebnerbasen durch neue Algorithmen angereichert. Es gelang, ein allgemein einsetzbares Programm zu erstellen, das ein System polynomialer Gleichungen automatisch und in den meisten Fällen optimal auflöst; dieses Programm verwendet den Buchberger-Algorithmus zur Erstellung von Groebner-Basen nur noch intern verdeckt, so daß sich der Anwender mit deren theoretischer Grundlagen nicht mehr direkt auseinandersetzen braucht. Damit wird der Computeralgebra ein neuer Anwendungsbereich eröffnet.

Aber auch für den kenntnisreichen Algebraiker wurden zusätzliche Werkzeuge erstellt, die aus dem Groebner-Paket ein vollständiges Toolkit für die Rechnung in polynomialen Idealen machen. Das Paket wurde inzwischen in einer ersten Version "marktreif" gemacht und bereits zweimal außerhalb des ZIB installiert (FB20 der Technischen Universität Berlin und RAND Corporation, Californien). Ab Januar 1989 wird es für alle Anwender von REDUCE 3.3 über den Software-Verteiler der RAND Corporation weltweit zur Verfügung stehen und integraler Bestandteil der nächsten Version von REDUCE sein. Mit dem Paket lassen sich schon recht komplexe Gleichungssysteme lösen.

Die bereits im Vorjahr begonnene Untersuchung der stationären Lösung chemischer Reaktionssysteme wurde erfolgreich fortgesetzt (Preprint SC 88-7).

## **Parallelverarbeitung für algebraische Algorithmen**

Der Bedarf an CPU-Zeit stellt nach wie vor ein großes Problem bei dem Einsatz algebraischer Algorithmen dar. Die Verwendung der Vektortechnik hat hier zwar eine gewisse Entlastung gebracht und den Bereich der berechenbaren Probleme deutlich erweitert; trotzdem muß nach neuen Wegen gesucht werden, um die Rechenkapazität auszuweiten. Ein zeitmäßiger Ansatz liegt in der Parallelverarbeitung, da zunehmend parallele Rechnerarchitekturen verfügbar werden. Allerdings gibt es insgesamt noch wenig Ansätze für parallele algebraische Algorithmen. In Grenoble fand im Sommer 1988 ein internationaler Workshop über dieses Thema statt, bei dem auch vektorielle und parallele Ansätze des ZIB in diesem Bereich vorgestellt wurden (Preprints SC 88-1 und SC 88-4). Inzwischen wurde mit E. Schrüfer (GMD, St. Augustin) ein weiterer erfahrener Spezialist der Computeralgebra als Zuse-Fellow gewonnen, der ebenfalls auf diesem zukunftsreichen Gebiet arbeitet.

## **Entwicklung informationstechnischer Werkzeuge für die Museums-Dokumentation**

Der Schwerpunkt der Arbeit des ZIB für das Projekt lag im Jahre 1988 bei der Durchführung einer Portierung der GOS-Grundsoftware von Großrechnern (Siemens BS2000) auf Personal-Computer (mit Betriebssystem MS-DOS). GOS ist ein von der britischen Museum Documentation Association entwickeltes Katalogisierungssystem, welches seit 1981 vom Institut für Museumskunde (IfM) und vom ZIB für verschiedene Projekte im Dokumentationsbereich benutzt wird. Die zur Vorbereitung der Portierung notwendigen Arbeiten wurden daher in der ersten Jahreshälfte fast ausschließlich an SUN-Workstations (mit UNIX Betriebssystem) durchgeführt. Mitte April wurde dann ein PC der IBM-Personalsystem/2-Serie (Modell 80) installiert, der vor allem als Referenzgerät eingesetzt wird. Unter Verzicht auf die teilweise betriebssystem-spezifischen (und sehr hardwarenah programmierten) Erweiterungen der BS2000-Version wurde zunächst die Entwicklung einer lauffähigen Version eines Standard-GOS in Angriff genommen. Darunter soll hier eine GOS-Version verstanden werden, die mindestens alle ursprünglich von der Museum Documentation Association vorgesehenen Leistungen erbringt.

Eine erste Rohversion der zum Standard-GOS gehörenden Programmquellen (etwa 80 Module mit zusammen ca. 20.000 Zeilen Quellcode) wurde durch ein vom ZIB entwickeltes Umsetzprogramm erzeugt.

Nach einer Überarbeitung dieser Rohquellen konnte Ende April eine erste lauffähige C-Version des Standard-GOS unter UNIX erstellt werden. Die Übertragung dieser UNIX-Version auf die inzwischen zur Verfügung stehenden MS-DOS Rechner gestaltete sich schwieriger als in der Planung angenommen. Da keine Erfahrungen mit der Entwicklung umfangreicher Programm-Systeme im PC-Bereich vorhanden waren, wurden die Restriktionen (besonders die starre Obergrenze für den Hauptspeicher unter dem Betriebssystem MS-DOS) unterschätzt.

Im August konnte die erste lauffähige standard-GOS-Version für MS-DOS testweise in Betrieb genommen werden. Trotz des in dieser ersten Version noch sehr kleinen zur Verfügung stehenden Arbeitsspeichers konnten einige Anwendungen aus dem Projekt "Kleine Museen" direkt auf den PC übertragen werden. Insbesondere die im April 1986 an die Datenzentrale Westfalen-Lippe in

Münster weitergegebenen Erfassungs- und AusgabeprozEDUREN waren ohne größere Änderungen ablauffähig.

Durch Anpassung eines als Quellprogramm im Handel erhältlichen Dateiverwaltungssystems an GOS konnte der für Datenbank-Anwendungen unbedingt erforderliche direkte Dateizugriff (ISAM-Verwaltung) vollständig in C und damit betriebssystemunabhängig realisiert werden. Die Verwaltung der Satz-Schlüssel wurde weitestgehend in die aufrufenden GOS-Programme verlegt, wodurch die Stellung des Schlüssels im Satz variabel sein kann; an der internen GOS-Satzstruktur muß nichts verändert werden.

Bei der MDA-Conference Ende September in Cambridge wurde vereinbart, die vom ZIB entwickelte C-Version des GOS-Programms an die Museum Documentation Association zu Testzwecken weiterzugeben. Da die GOS-Anwendungen der MDA sehr unterschiedlich von denen des IfM sind, werden davon interessante Anregungen zur Weiterentwicklung erwartet. Alle portierten Programme und Anwendungen sind auch unter dem verbreiteten Betriebssystem UNIX lauffähig. Damit ist eine sehr große Klasse von Systemen der mittleren Datentechnik für die Anwendung von GOS geeignet. (Bei der Umsetzung der Programmquellen in C wurde auf die strenge Einhaltung des ANSI-Standards geachtet, so daß weitere Portierungen keine Probleme machen sollten).

### **3.3 Abteilung Graphik**

Die Arbeit der Abteilung Graphik hatte im Berichtszeitraum zwei Schwerpunkte: den Umstieg von den bisherigen IBM-, CDC- und PC-Rechnersystemen auf die UNIX-Welt und die Durchführung von Entwicklungsprojekten zur Erzeugung von Graphiken hauptsächlich für die Abteilung Numerik.

#### **Umstellung der Rechnersysteme**

Es wurde begonnen, die vorhandenen Graphiksysteme GKS, BIZEPS, FUGE, GRAZIL, GRAZIL-3D und TDLG auf UNIX-Rechner zu portieren und anzupassen und Treiber für SUN-Bildschirme zu entwickeln, die auch Spezialeigenschaften der Workstations unterstützen, z. B. Mauseingabe und Ansteuerung von Graphik-Windows vom Programm aus. Diese Arbeiten waren am Ende des Berichtszeitraums noch nicht abgeschlossen. Darüberhinaus wurde eine Infrastruktur an graphischen Ausgabegeräten für die Abteilung geschaffen, von der andere Abteilungen ebenfalls profitieren.

#### **GRAZIL / ZUGRIFF**

Das Programmsystem GRAZIL zur Darstellung von Kurven und Funktionsverläufen wurde gemäß den Anregungen und Wünschen der Nutzer weiterentwickelt, z. B. Darstellung von Flächen zwischen Kurven, variables Layout der Zeichenfläche, Erzeugung von Zeit- und Datumsstempeln.

## **GRAZIL-3D**

Die Entwicklung des Programmsystems GRAZIL-3D, das, auf der gleichen ZUGRIFF-Dateischnittstelle aufsetzend wie GRAZIL, im Vorjahr nur als Prototyp-Version bereitstand, wurde im Berichtszeitraum weiterentwickelt. Es hat nunmehr die gleiche Benutzeroberfläche wie GRAZIL, ermöglicht aber zusätzliche Benutzereingaben zur Steuerung der dreidimensionalen Darstellung. Mit diesem Programm können beliebige dreidimensionale Kurven- und Funktionsverläufe im dreidimensionalen Koordinationssystem dargestellt werden. Dabei kann der Anwender die Viewing-Transformationen in Form von sphärischen Koordinaten, d. h. von zwei Betrachtungswinkeln, spezifizieren.

## **TDLG**

Das Programm TDLG 3.1 (Three Dimensional Layer on GKS) dient zur Visualisierung dreidimensionaler, auf triangulierten Flächen aufbauender Modelle. Das auf der Basis von GKS arbeitende Programm wurde von der Technischen Universität Berlin beschafft und am ZIB erweitert.

Die an das Programm gestellten Erwartungen hinsichtlich der Darstellung von Lösungen des FEM-Paketes KASKADE konnten nicht erfüllt werden. Die Nutzung von TDLG wird daher nicht weiterverfolgt.

## **3.4 Abteilung Software**

Die Abteilung Software betreibt Entwicklung und Dienstleistung im Bereich Software für Scientific Computing. Ihre Aufgaben sind:

1. Aufbau einer Software-Bibliothek für Scientific Computing (CODELIB) in den Bereichen
  - lineare Algebra,
  - lineare und nichtlineare Optimierung,
  - gewöhnliche Differentialgleichungen,
  - partielle Differentialgleichungen

und Entwicklung von anwendungsorientierten Programmsystemen im Rahmen von Kooperationen mit Großanwendern.

Besonderes Augenmerk soll auf große und nichtlineare Systeme gerichtet werden.

Projektübergreifend sind insbesondere folgende Teilaufgaben wahrzunehmen:

- Standardisierung (insbesondere der Benutzerschnittstellen),
- Modularisierung (in wiederverwendbare Bausteine),
- Test (insbesondere Entwicklung von Testbatterien und Testrahmen)

Die Arbeiten erfordern eine enge Zusammenarbeit mit den Abteilungen Numerik (Umsetzung von Forschungscode in Produktionscode), Symbolik (Schnittstellen zu Präprozessoren) und Graphik (Schnittstellen zu Postprozessoren).

## 2. Weitergabe von ZIB-Entwicklungen und Produktinformation

Entwicklung eines Softwareinformationssystems, das Informationen zu folgenden Bereichen interaktiv und über Rechnernetze bereitstellen soll:

- ZIB-Codes (Programmquellen)
- Dokumentation
- Public Domain Software
- Test- und Vergleichsergebnisse

Weiterentwicklung in Richtung auf ein Dialogsystem, in dem ausgewählte Software getestet werden kann.

Diese Aufgaben wurden durch Mitarbeit in den Projekten Hochnichtlineare Methoden, Extrapolationsmethoden, Finite Elemente mit hierarchischen Basen (KASKADE), durch Fortführung des Projektes Software-Produktions- und Transformationssystem und (ab September 1988) durch Aufnahme des Projektes Softwareinformationssystem in Angriff genommen.

### **Hochnichtlineare Methoden**

Im Rahmen dieses Projekts werden Codes zur Lösung von hochnichtlinearen Gleichungssystemen und Ausgleichsproblemen bearbeitet.

Im Berichtszeitraum wurden die Programme BVPSOL und BVPSOG (Lösung von nichtlinearen gewöhnlichen Randwertproblemen mittels Mehrzielmethode) überarbeitet. Die Programme unterscheiden sich in der Behandlung der zu lösenden linearen Gleichungssysteme: BVPSOL reduziert die Größe der auftretenden Blocktridiagonal-Systeme mittels des Condensing-Algorithmus, während BVPSOG ein Softwarepaket für dünnbesetzte Matrizen aufruft.

Weiterhin wurde eine Version des Programms NLEQ1 (Lösung hochnichtlinearer Systeme ohne Rangstrategie), geeignet für große Systeme mit dünnbesetzter Jacobi-Matrix, erstellt.

Für einen gründlichen Test und den Vergleich verschiedener nichtlinearer Gleichungslöser wurde ein Programm erstellt, das eine umfangreiche Sammlung von Testaufgaben enthält.

### **Extrapolationsmethoden**

In diesem Projekt werden Codes zur numerischen Lösung von Anfangswertaufgaben gewöhnlicher Differentialgleichungen bearbeitet.



Im Berichtszeitraum wurde das Verfahren LIMEX überarbeitet, das für die Lösung impliziter und differentiell-algebraischer Systeme geeignet ist. Es basiert auf dem Code EULSIM mit semi-impliziter Euler-Diskretisierung und h-Extrapolation.

Für beide Codes wurde eine neue Benutzerschnittstelle entwickelt, die bequemere Anwendung und zusätzliche Optionen (u.a. Arbeitsspeicher und lineare Gleichungssysteme mit Bandstruktur) bietet.

Im Rahmen der Benutzerberatung wurden neben EULSIM und LIMEX auch die beiden Codes mit expliziter Diskretisierung EULEX und DIFEX1 auf die Cray X-MP portiert.

### **Anwendersysteme**

Das Programmpaket LARKIN für chemische Kinetik wurde in FORTRAN 77 angepaßt und auf den Rechnern Cray X/MP unter COS, IBM 370 unter MVS, SUN unter UNIX und Apple Macintosh II zum Ablauf gebracht und getestet.

### **Adaptive Hierarchische Finite Elemente Methoden**

Die Arbeiten an dem adaptiven Finite Elemente Code KASKADE zur Lösung von zwei-dimensionalen elliptischen Problemen zweiter Ordnung auf allgemeinen Gebieten wurden fortgesetzt. Im Mittelpunkt standen die Entwicklungsarbeiten an einer C-Version des Programms. Diese Version wurde auch als Ausgangspunkt für Forschungsarbeiten der Abteilung Numerik verwendet.

Die Dortmunder Pascal-Implementierung von KASKADE, die P. Leinen und der Zuse-Fellow H. Yserentant entwickelten, wurde in Zusammenarbeit mit P. Leinen für eine Apple Macintosh II Workstation angepaßt und damit die Beispielrechnungen für den Report SC 88-5 durchgeführt.

Die Abteilung Numerik wurde bei der Verwendung der C-Implementierung von KASKADE für Konvektions-Diffusionsgleichungen unterstützt (siehe Report SC 88-9). Die dabei gemachten Erfahrungen flossen in die weitere Entwicklung ein.

### **Software-Produktions- und -Transformationssystem**

Im Rahmen dieses Projektes sollten die numerischen Basis-Algorithmen des ZIB softwaretechnisch so aufbereitet werden, daß sie für verschiedene Programmiersprachen transformiert werden können.

Der in diesem Zusammenhang entwickelte abstrakte LOGO-Code (ACode) wurde so erweitert, daß die Klasse der nichtlinearen Methoden des ZIB in diesem Formalismus darstellbar ist. Insbesondere wurden im Berichtszeitraum die Programme BVPSOL und BVPSOG (s.o) im ACode formuliert.

Das ACode-Laufzeitsystem wurde entsprechend erweitert, so daß nunmehr größere Programme objektorientiert strukturierbar und hantierbar sind.

Im ACode selbst wurde ein Testsystem für Transformationen entwickelt. Außerdem wurde ein Satz von Transformationen in Richtung auf Macintosh-Pascal geschrieben, so daß im ACode formulierte Newton- und Gauß-Newton-Verfahren nun in Pascal implementiert bzw. nach Pascal transformiert werden konnten.

Das ACode-Laufzeitsystem und das Transformationssystem wurden in eine Fenster-orientierte Benutzeroberfläche eingebettet.

Trotz der technischen Fortschritte bei der Entwicklung eines am abstrakten Code orientierten Produktions- und Transformationssystems wurde die Entwicklungslinie eingestellt, weil die Einschätzung bestand, daß das System an andere Entwickler numerischer Algorithmen, die überwiegend in FORTRAN arbeiten, weder vermittelbar noch weitergebbar sein werde.

### **Softwareinformationssystem**

Die Arbeiten konnten nach der entsprechenden Stellenbesetzung im September dieses Jahres aufgenommen werden. Die Anforderungen orientieren sich an den im letzten Jahresbericht vorgegebenen Rahmen. In der ersten Phase wurden die Punkte

- Informationen über Algorithmen und Dokumente,
- Dateitransfer und
- Nachrichtenaustausch

in Angriff genommen. Bisher wurden als Arbeitsunterlagen eine Anforderungsdefinition und eine Funktionsspezifikation erstellt.

### **3.5 Abteilung Systolik**

Im Berichtszeitraum war bis April zunächst nur ein wissenschaftlicher Mitarbeiter, danach dann ein weiterer auf folgenden Arbeitsgebieten eingesetzt:

- 1.) Forschung und Entwicklung auf dem Gebiet Parallelisierung vorhandener sequentieller adaptiver Algorithmen.
- 2.) Forschung und Entwicklung auf dem Gebiet adaptiver Architekturen für parallele Algorithmen.

Schwerpunkt der Arbeit war die Übertragung eines sequentiellen adaptiven Algorithmus zur numerischen Berechnung eines Integralwertes (Romberg Quadratur mit polynomialer Extrapolation) in verschiedene parallele Versionen (vertikal-, horizontal-parallel) für eine SUPRENUM-artige Architektur, eine Nearest-Neighbour-Architektur (Transputer) und eine optimale Architektur. Die Adaptivität des Algorithmus konnte auch auf die parallele Version übertragen werden und zusätzlich eine adaptive Lastverteilung mit variabler Prozessorzahl erreicht werden. Die SUPRENUM-Version wurde mit Hilfe des SUPRENUM-Simulators SUSI

implementiert. Für verschiedene Varianten wurden ausführliche Zeitmessungen vorgenommen (Technical Report TR 88-5). Es bestehen wissenschaftliche Kontakte zu der Gruppe um T. O. Espelid (Department of Informatics, Bergen, Norwegen), die ebenfalls adaptive Algorithmen zur numerischen Berechnung eines Integralwertes (auf einer Hypercube Architektur) untersuchen.

Seit Mitte des Jahres stehen 2 Boards mit je 4 Transputern T800 im ZIB zur Verfügung. Damit wird das Zeitverhalten des Algorithmus auf Nearest-Neighbour-Architekturen mit verschiedenen Topologien und synchronem Message Passing untersucht. Mit S. Eichholz (Mathematisches Institut und Institut für Informatik München) wurde eine Zusammenarbeit auf dem Gebiet der Simulation einer optimalen adaptiven Architektur verabredet. Die von S. Eichholz entwickelte Sprache ParMod und ein auf dieser Sprache basierendes Simulationssystem sollen dafür eingesetzt werden.

Derzeit laufen in Zusammenarbeit mit anderen Abteilungen im Hause Forschungsarbeiten zur Parallelisierung steifer und nichtsteifer Differentialgleichungen, auch hier mit der Zielrichtung, adaptive Architekturen einzusetzen.

Vom Philips Research Laboratories Eindhoven wurde der Abteilung Systolik im Rahmen eines kostenlosen Lizenzvertrages der im ESPRIT Projekt 435 entwickelte Interpreter für die Sprache POOL (Parallel Object Oriented Language) überlassen. Mit ihr soll untersucht werden, ob sich objektorientierte Sprachen zur Formulierung adaptiver Algorithmen vorteilhaft verwenden lassen.

Es laufen Voruntersuchungen zur Definition eines Simulators, der in der Lage ist, für nichtsequentielle Algorithmen (auch systolische) auf unterschiedlichen Topologien (z. B. Gitter, Bäume, Sterne) und unterschiedlichen Kommunikationsverfahren (synchron, asynchron über Busse oder Nearest-Neighbour oder auch Busse und Nearest-Neighbour) ein einheitliches Testbett zur Verfügung zu stellen.

### **3.6 Abteilung Verteilte Systeme**

#### **Kooperation des ZIB mit der GMD-FOKUS im Rahmen der BERKOM-Aktivitäten**

Das Projekt Berliner Kommunikationssystem (BERKOM) wurde 1986 in Berlin ins Leben gerufen, um den Einsatz von Breitband-ISDN (ISDN-B) im Rahmen der Deutschen Bundespost zu erproben und zu unterstützen. Im ISDN-B werden dem Benutzer Übertragungsraten von 140 Mbit/s in einem leitungsvermittelnden Netz zur Verfügung stehen. Daraus ergeben sich völlig neue Qualitäten im Hinblick auf die zu übertragenden Datenmengen und Informationstypen (z. B. auch Bewegtbild) in einem öffentlichen Netz.

Die Abteilung Verteilte Systeme des ZIB hat sich vom Start des Projektes an im BERKOM-Rahmen engagiert. Die Leitung des Gesamtprojektes wurde von der DETECON (Deutsche Telepost Consult GmbH) übernommen. Mitarbeiter des ZIB waren in den vorbereitenden Arbeitskreisen und der Projektleitung bei der DETECON aktiv.

Im Juni 1987 wurde ein Kooperationsvertrag zwischen der GMD-FOKUS (Gesellschaft für Mathematik und Datenverarbeitung - Forschungsstelle für offene Kommunikationssysteme, ehemals Bereich FOKUS im HMI) und dem ZIB abgeschlossen. Die Mitarbeiter der Abteilung Verteilte Systeme des ZIB arbeiten in den im folgenden erläuterten Projekten **BERGATE** und **Multimedia-Dokumente (MMD) im ISDN-B** mit.

### **BERKOM-Projekt BERGATE**

Im Projekt BERGATE wird ein anwendungsunabhängiges und auf internationalen Standards basierendes Transitsystem entwickelt. Aufgabe dieses Systems ist die Kopplung von LANs über Breitband-ISDN (B-ISDN). Ein solches Transitsystem in Verbindung mit Hochgeschwindigkeitskanälen soll einen zeittransparenten Datenaustausch, - d. h. eine Übertragung ohne durch Kopplungsfunktionen verursachte Durchsatzverluste - zwischen Endsystemen verschiedener LANs ermöglichen.

Das System muß Schnittstellen zu Token Bus-LANs (MAP), zu CSMA/CD-LANs (TOP) und zum BERKOM-Testnetz aufweisen sowie die Kommunikation zwischen den Endsystemen dieser Netze unterstützen. Die Realisierung des Transitsystems erfolgt auf der Grundlage am Markt verbreiteter Hard- und Softwarekomponenten (SUN-3 Eurocard, UNIX).

Angesichts der Übertragungsrates von ca. 140 Mbit/s (duplex) auf dem H4-Kanal ist eine reine Software-Realisierung der H4-Kanal-Protokolle derzeit nicht durchführbar. Ziel im Projekt BERGATE ist es daher u. a., eine Protokolladapterkarte zu entwickeln, die das Schicht-2-Protokoll "in Hardware" abwickelt.

Im Berichtszeitraum sind u. a. die folgenden Arbeiten durchgeführt worden:

- Erarbeitung eines modularen Konzepts
- Definition der Schnittstellen und Dienste (VME/VSB-Bus, D-Kanalprotokollmaschine, Nutzkanalinterface) in Absprache mit anderen BERKOM-Projektnehmern
- Auswahl geeigneter Hardware-Technologie und Einrichtung einer entsprechenden Entwicklungsumgebung
- Auswahl marktüblicher Hard- und Software für das Basissystem und die anzuschließenden LANs

## **BERKOM-Projekt MMD**

Das Projekt *Multimedia-Dokumente (MMD) im ISDN-B* ist ein Studien- und Konzeptionsprojekt in den Bereichen *Büro* und *Informationssysteme* der Pilotanwendungen des BERKOM-Referenzmodells. Es befaßt sich zunächst rein konzeptionell mit der Verarbeitung von Multimedia-Dokumenten in einer Breitband-Umgebung.

Ziel des Projektes ist die Bildung eines Modells, das auf dem ISO/OSI-Referenzmodell basiert und als Grundlage für die Realisierung aller künftiger Telekommunikationsdienste dienen soll. Dieses Modell soll sowohl in die internationale Standardisierung eingebracht werden, als auch die Basis für eine überarbeitete Version des BERKOM-Referenzmodells bilden.

Zur Verwirklichung der im Rahmen des BERKOM-Referenzmodells angedachten Anwendungen ist die Definition eines Multimedia-Dokumentenmodells (MMD-Modell) notwendig, das den Austausch und die Bearbeitung von Multimedia-Dokumenten (MMDs) ohne Einschränkung bezüglich der verwendeten Systeme ermöglicht. Dieses Architekturmodell beinhaltet eine Reihe von Kommunikationsdiensten und -protokollen und muß mit dem entsprechenden Datenmodell abgestimmt sein. Da die Dokumente im BERKOM-Rahmen neben den heute bereits gängigen Informationen wie Text, Graphiken oder Fotografien auch Bewegtbilder und Audio- bzw.. Sprachinformationen enthalten werden, reicht die heute in öffentlichen Netzen verfügbare Bandbreite für die Übertragung nicht mehr aus. Durch die Einführung von ISDN-B kann dieser Engpaß jedoch überwunden werden.

Ein System zur Verarbeitung von Multimedia-Dokumenten in offenen Rechnernetzen kann sich nur allgemein durchsetzen, wenn die zugrunde liegenden Konzepte in die internationale Standardisierung eingebracht werden. Bei der Funktionalität von Standards werden in der Regel nur die Wünsche der an ihrer Entwicklung beteiligten Personen berücksichtigt. Der potentielle Anwenderkreis des künftigen BERKOM-MMD-Modells ist jedoch so groß, daß als Grundlage für die Definition dieses Modells eine detaillierte Analyse der Benutzeranforderungen vorgenommen werden muß. Auf dieser Basis wird in der folgenden Projektphase die erste Version eines MMD-Modells entworfen. Dieses MMD-Modell wird neben einem Datenmodell, das die Multimedia-Strukturen beschreibt, auch ein Kommunikationsmodell beinhalten, das die notwendigen Dienste und Protokolle sowie deren Wechselwirkungen beschreibt.

Im Berichtszeitraum sind u. a. die folgenden Arbeiten durchgeführt worden:

- Analyse der Anforderungen an MMDs
- Analyse relevanter Standardisierungsbestrebungen
- Beginn der Definition eines MMD-Kommunikationsmodells
- Beginn der Definition eines MMD-Datenmodells

## 4. Bereich Anlagenbetrieb

Der Bereich Anlagenbetrieb des ZIB ist als Rechenzentrum für die Planung und den Betrieb aller Rechanlagen des ZIB zuständig. Die Aufgaben des Bereiches wurden im wesentlichen drei Arbeitsgebieten zugeordnet und jeweils einer Abteilung übertragen:

- Ausbau und Betrieb eines Superrechners als hauptsächlich nach außen gerichtetes Dienstleistungsangebot des ZIB im Norddeutschen Vektorrechnerverbund (NVV)
- Interne Versorgung des ZIB mit Arbeitsmitteln der Datenverarbeitung
- Bedienung und Pflege der Maschinen.

Die wichtigsten Arbeiten des Bereiches 1988 waren die Ausstattung des ZIB mit einem lokalen Netzwerk von UNIX-Workstations, die Erschließung des Kieler Vektorrechners für Berliner Benutzer, die Inbetriebnahme eines neuen Vorrechners unter dem Betriebssystem NOS/VE, die Einführung neuer Rechnernetzdienste und die Inbetriebnahme des Erweiterungsspeichers SSD an der CRAY X-MP/24. Weniger sichtbar, aber von zentraler Bedeutung, waren die Konsolidierung der ISO-Rechnernetze und die Vorbereitung der für das erste Quartal 1989 vorgesehenen Einführung des Betriebssystems UNIX für den Supercomputer (UNICOS an der CRAY X-MP/24).

### 4.1 Entwicklung der Maschinenausstattung

Das Konzept, ein Verbundnetz von Rechnern unterschiedlicher Hersteller, Leistungsklassen und Architekturen zu schaffen, in dem Anwendungen auf unterschiedlichste Geräte so verteilt werden können, daß kurze Bearbeitungszeiten, lokale graphische Ausgaben und sonstige Arbeitserleichterungen für Benutzer in besonders wirtschaftlicher Weise realisiert werden, wurde in Berlin bereits 1979 als Leitlinie für die EDV-Planung akzeptiert (Der Senator für Wissenschaft und Forschung: Bericht der DV-Strukturkommission, Berlin 1979). Vor dem Hintergrund dieser Zielvorstellung entstanden die heterogenen Rechnernetze (BERNET, DFN), die sich in der Anlagenkonfiguration des ZIB widerspiegeln.

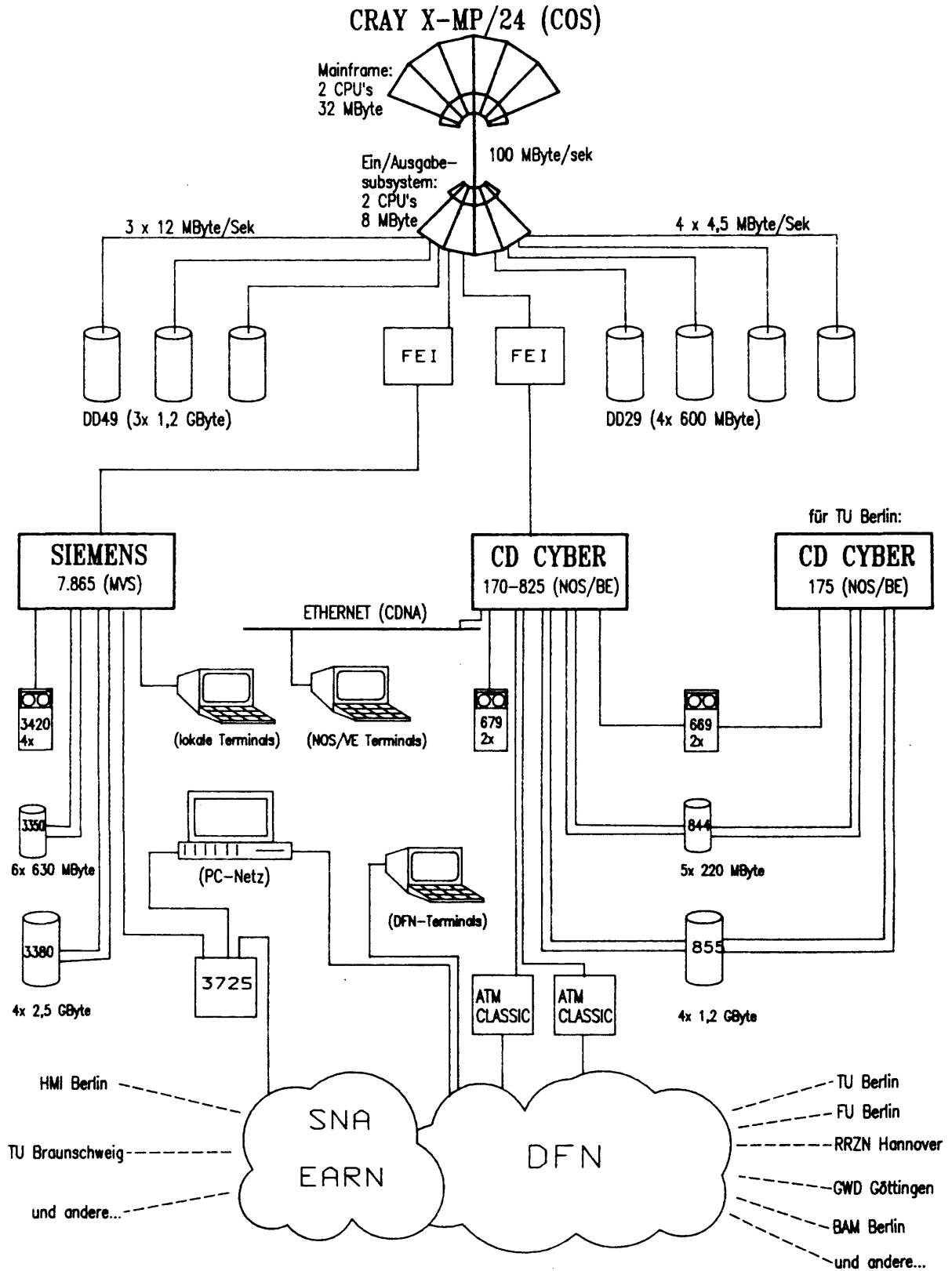
Inzwischen ist eine vor 10 Jahren kaum vorstellbare Tendenz zur Vereinheitlichung der Betriebssysteme in Richtung UNIX zu beobachten, die die damalige Utopie in den Bereich der Realisierbarkeit bringt, ohne dabei von einem einzelnen Hersteller abhängig zu werden. Im Abschnitt "Vorbereitung der Migration zu UNICOS" werden die Gründe skizziert, die das ZIB dazu geführt haben, die Anlagenkonfiguration schrittweise in ein Netz von "UNIX-Rechnern" umzuwandeln. Hier soll lediglich geschildert werden, wie die Konfiguration mit Hilfe der Kommission für Rechanlagen der Deutschen Forschungsgemeinschaft 1988 weiter entwickelt wurde.

Am Anfang des Berichtszeitraums bestand die Anlagenausstattung des ZIB aus COS-, NOS/BE- und MVS-Maschinen, einem Netz von IBM-Personalcomputern, verschiedenen APPLE-Macintosh und zwei SUN-Workstations (Abb.Seite 20).

Folgende Komponenten wurden im Herbst 1987 beantragt und im Laufe des Berichtszeitraums beschafft und in Betrieb genommen:

- Ein schneller Hintergrundspeicher SSD für den Vektorrechner CRAY X-MP/24 (Kapazität 1 Gigabyte). Dieser Speicher ist über einen schnellen Kanal (1 Gigabyte/Sekunde) mit dem Hauptspeicher des Vektorrechners verbunden und ermöglicht die Bearbeitung von Anwendungen mit großen Speicheranforderungen oder mit extremen Ein- / Ausgabeanforderungen. Gleichzeitig kann der SSD aber auch vom Betriebssystem u. a. als Verdrängungsraum eingesetzt werden. Wegen der zuletzt erwähnten Möglichkeit wurde der SSD seitens des ZIB als unabdingbare Voraussetzung für die Einführung von UNICOS angesehen, da der kleine Arbeitsspeicher und der beschränkte Hintergrundspeicher der hiesigen CRAY X-MP/24 nicht erlaubt hätten, die Vorzüge von UNIX beim Aufbau verteilter Anwendungen zu nutzen.
- Für den eigenen Bedarf des ZIB wurden UNIX-Workstations beschafft. Für jede Arbeitsgruppe wurde mindestens eine UNIX-Workstation mit eigenem Plattenspeicher installiert, die als lokaler "File-Server" für die in der Regel plattenlosen "Clients" in den Arbeitsräumen der Mitarbeiter dient. Alle Rechner jeweils einer Etage des ZIB-Gebäudes bilden ein lokales Teil-Netz (Thin ETHERNET). Die lokalen Teil-Netze wurden über "Filterbrücken" mit einem zentralen local area network (LAN auf ETHERNET-Basis) verbunden, das dem Verkehr zwischen den Stockwerken dient. Im Maschinenraum des ZIB ist zentral ein gemeinsamer File-Server installiert, dessen Daten von den Operateuren gesichert werden. Ein weiterer Server (Kommunikationsserver) ist über eine Kanal-VME-Bus-Kopplung mit dem Vektorrechner verbunden. Die Zielvorstellung ist, daß jeder im ZIB tätige Wissenschaftler jederzeit Zugang zu einer seinen Bedürfnissen optimal entsprechenden Workstation haben soll. Weiterhin ergab sich die Notwendigkeit, die lokalen File-Server in klimatisierten "Abstellräumen" in den einzelnen Stockwerken unterzubringen, da die Geräusch- und Wärmeentwicklung dieser Geräte mit der Arbeitsatmosphäre eines wissenschaftlichen Institutes nicht in Einklang zu bringen waren.
- Da zwei Universitäten im Bereich des NVV als eigene Arbeitsumgebung NOS/VE-Systeme betreiben, wurde ein System CDC CYBER 930 beschafft und als NOS/VE-Vorrechner an den Vektorrechner angeschlossen. Dieses System verfügt über einen serienmäßigen ETHERNET-Anschluß und bietet somit einen weiteren Anschluß des Vektorrechners an das LAN des ZIB.
- Durch die Installation sogenannter Remote-Filter-Bridges ist die Möglichkeit gegeben, über schnelle Postleitungen (2 - 10 Megabit/Sekunde) die lokalen Netze der Partner des ZIB mit dem hiesigen LAN zu verbinden. Die erforderlichen Geräte wurden gründlich untersucht und einem Funktionstest unterzogen. Leider konnten die ausgewählten Geräte 1988 nicht mehr geliefert und installiert werden, auch war die Post im Berichtszeitraum nicht in der Lage, die von uns beantragten Verbindungen zu schalten, so daß an dieser Stelle noch nicht über Betriebserfahrungen berichtet werden kann.

# Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin Rechnerkonfiguration



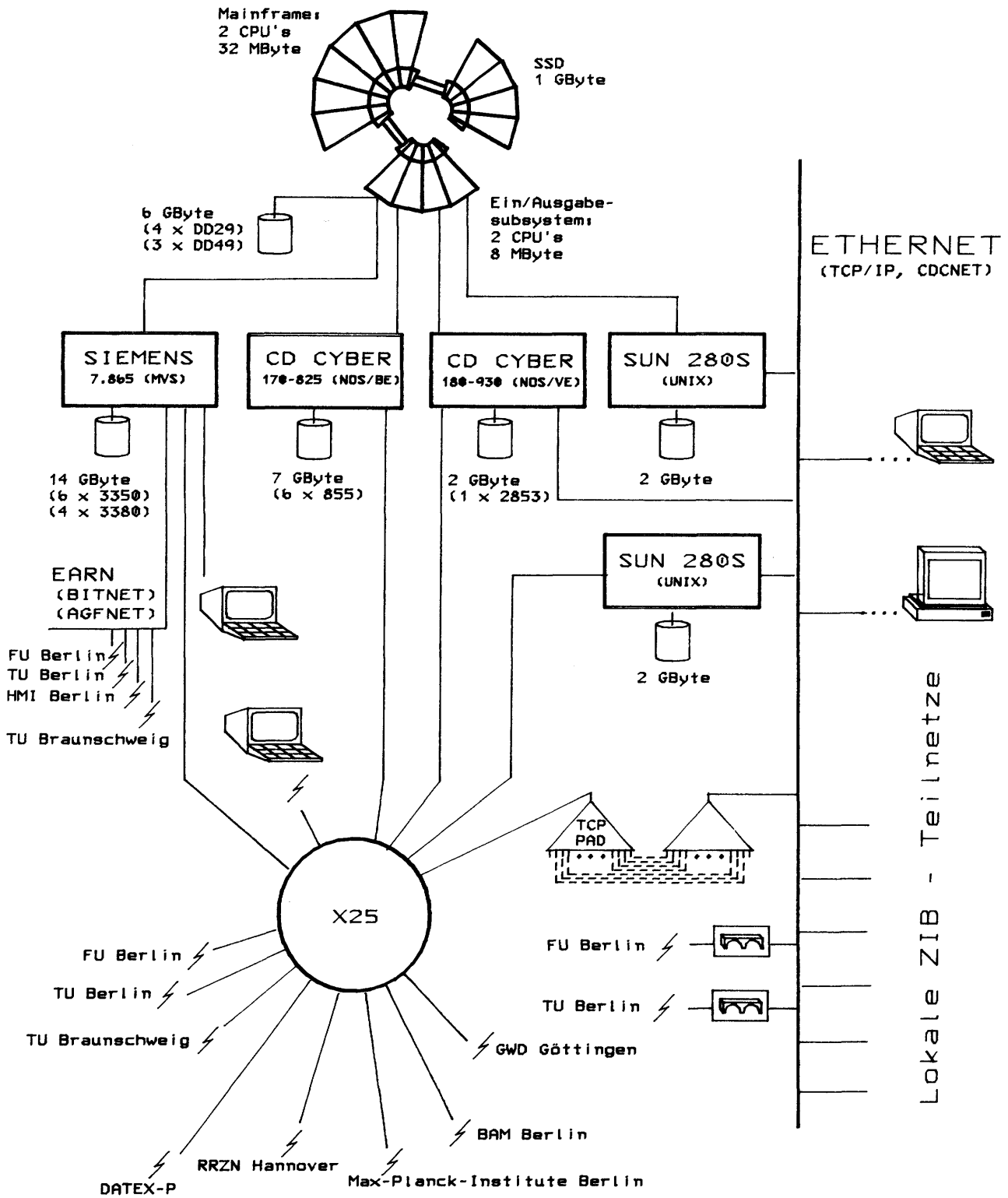


# Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin

## Rechnerkonfiguration



### CRAY X-MP/24 (COS)



Die Installation der NOS/VE-Maschine kann als Abweichung von dem hier erläuterten Konzept einer einheitlichen UNIX-Umgebung betrachtet werden. Sie basiert auf der Erkenntnis, daß aus Sicht der Benutzer der Vorrechner des im Batch-Betrieb eingesetzten Superrechners möglichst das gleiche Betriebssystem haben sollte wie das eigene System des Benutzers. (Hierauf wird im Abschnitt "Nutzung der Kieler Anlage" nochmals eingegangen). Entsprechend der Ausstattung der Universitäten und Forschungsstätten, die den Berliner Vektorrechner im Rahmen des NVV benutzen, wären damit außer UNIX folgende Betriebssysteme auf den Vorrechnern des Vektorrechners wünschenswert: NOS/VE (FUB, RRZN), NOS/BE (FUB, TUB), VMS (Uni Kiel, BAM, HMI) und VM (Uni BS, GWDG, Uni OS, TH CLZ). Der Wunsch des ZIB, möglichst wenige Betriebssysteme unterhalten zu müssen, ist wirtschaftlich begründet. Insofern bedarf es keiner besonderen Erläuterung, daß das ZIB beabsichtigt, die MVS-Anlage Ende 1989 stillzulegen.

Somit war am Ende des Berichtszeitraums eine Konfiguration (Abb. Seite 21) erreicht, durch die das ursprüngliche, einfache Konzept schon wesentlich deutlicher durchschimmert: Der Einführung von UNIX auf dem Supercomputer (UNICOS auf der CRAY X-MP/24) steht nichts mehr im Wege, sie ist für das Ende des ersten Quartals 1989 vorgesehen. Das ZIB ist jetzt mit UNIX-Workstations ausgestattet, weitere Geräte lassen sich nach Bedarf leicht in das Netz integrieren. Bei den Netzen werden zwei Ebenen sichtbar, die ETHERNET-Ebene mit den Protokollen TCP/IP und CDCNET sowie die X.25-Ebene mit den DFN-Diensten. Das kommende Jahr 1989 wird der Konsolidierung dieser Struktur dienen und somit die Basis für die Beschaffung des Superrechners der frühen neunziger Jahre schaffen.

## **4.2 Norddeutscher Vektorrechnerverbund**

Das Land Berlin hat im Jahre 1984 mit den Ländern Schleswig-Holstein und Niedersachsen ein Verwaltungsabkommen abgeschlossen, in dem auf dem Gebiet der Supercomputernutzung ein gemeinsames Vorgehen vereinbart ist. Nur so erschien es möglich, mit der raschen Entwicklung Schritt zu halten und wenigstens in jeweils einem der drei Länder einen Supercomputer nach dem neuesten Stand der Technik zur Verfügung zu haben. Angemessen erschien ein zweijähriger Zyklus, in dem jeweils ein neuer Supercomputer beschafft wird, so daß jedes Bundesland alle 6 Jahre von einer derartigen Investition betroffen wird. Damit erreicht man auch den vom Wissenschaftsrat für angemessen gehaltenen 6jährigen Erneuerungszyklus für die einzelnen Geräte.

### **Nutzung der Kieler Anlage**

Ende 1987 hat Schleswig-Holstein einen Vektorrechner CRAY X-MP/18 in der Universität Kiel installiert, der im letzten Quartal 1988 zu einer CRAY X-MP/216 erweitert wurde. Dieser Rechner wurde von Anfang an unter dem Betriebssystem UNICOS betrieben. Zwar ist die Prozessorleistung des Kieler Vektorrechners nur geringfügig höher als die des Berliner Rechners, aber der vierfach größere Speicher der Kieler Maschine erlaubt die Bearbeitung entsprechend größerer Programme. Als wichtigsten Vorzug der Kieler Maschine sah das ZIB das

Betriebssystem UNICOS an, wodurch die Kieler Maschine eine ideale Umstellungshilfe für die Berliner Benutzer beim geplanten Umstieg von COS zu UNICOS zu sein schien. Für den Zugang von Berlin nach Kiel stehen die DFN-Dienste zur Verfügung. Den Datentransport über das X.25-Netz der Deutschen Bundespost ermöglichte das ZIB von Anfang an zentral über seinen DATUS X.25 Vermittlungsrechner.

Trotz aller Bemühungen des ZIB, den Kieler Vektorrechner möglichst vielen Benutzern nahe zu bringen, wurde diese Maschine nur von wenigen Berliner Benutzern angenommen. In zahlreichen Gesprächen mit an einer UNICOS-Nutzung interessierten Benutzern ergab sich, daß zwar die Umstellung der Programme von COS auf UNICOS meistens problemlos war, daß aber die Nutzung der Datenorganisation eines dem Benutzer fremden Vorrechners (hier einer VAX unter VMS) nach einigen Versuchen als zu großes Hindernis empfunden wurde. Der Fachbereich Physik der Freien Universität Berlin, der intern mit DEC-Maschinen unter VMS ausgestattet ist, nutzte bei weitem den größten Teil des Berliner Anteils am Kieler Vektorrechner. Die Schwierigkeiten im Umgang mit einem dem Benutzer fremden Vorrechnersystem, die viele Berliner Benutzer davon abgehalten haben, den Kieler Vektorrechner zu nutzen, wurden vom ZIB als Hinweis aufgenommen, Vorrechner, deren Betriebssystem bei einem größeren Kreis von Benutzern eingesetzt wird, nicht ohne weiteres abzubauen, auch wenn sie "technisch" nicht unbedingt erforderlich sein sollten.

Insgesamt hat Berlin in Kiel 1988 1.269 Stunden CPU-Zeit erhalten und damit im Jahresmittel ca. 18 % der an Benutzer abgegebenen Rechenleistung.

### Nutzung der Berliner Anlage

	CPU-Zeit (Stunden)	System-Zeit (Stunden)	Prozent
1988			
Abgegebene Gesamtleistung:	14.967	7.490	
- Zentrale Leistungen:	173	90	
- Eigenverbrauch des ZIB:	205	122	
-----			
<b>An Benutzer verteilte Zeit:</b>	<b>14.589</b>	<b>7.278</b>	<b>100</b>
=====			

### Verteilung auf die Partner des ZIB

Freie Universität Berlin:	5.853	3.000	41,2
Technische Universität Berlin	5.538	2.818	38,7
Niedersachsen:	2.465	1.077	14,8
Schleswig-Holstein	559	260	3,6
Hahn-Meitner-Institut Berlin	174	123	1,7

## **Fachbereiche mit großem Rechenzeitverbrauch**

Im folgenden sind die Fachbereiche der Berliner Universitäten mit einem Rechenzeitverbrauch von mehr als 50 Stunden Systemzeit 1988 aufgeführt. 50 Stunden Systemzeit der CRAY X-MP/24 entsprechen mehr als der Jahresleistung eines üblichen Fachbereichsrechners. Einige Stichworte zu den größeren Projekten sind als Erläuterung genannt.

	System-Zeit (Stunden)
<i><b>Freie Universität Berlin</b></i>	
<b>Fachbereich 20, Physik</b>	1.761
- Untersuchungen zur Hochenergiephysik	
- Phasenübergang in Flüssigkristallen	
- Photosynthese	
- Statistische Physik (Monte Carlo Simulation)	
<b>Fachbereich 21, Chemie</b>	865
- Energieminimierung und molekulare Dynamik unterschiedlicher Proteine	
- Quantenchemische Berechnungen:	
- elektronische Molekulareigenschaften	
- Clustereigenschaften	
- große organische Moleküle	
- photophysikalische Prozesse	
- Kohlehydrate	
- Röntgenstrukturanalyse organischer Verbindungen	
<b>Fachbereich 24, Geowissenschaften</b>	313
- Simulation großräumiger Transporte von Schadstoffen	
- Numerische Simulation zur Klimaforschung	

**Technische Universität Berlin**

**Fachbereich 4, Physik** 781

- Bandstruktur von Halbleitern
- Fließverhalten von Flüssigkristallen unter stationärer Scherströmung
- SCF-Berechnung von tiefen Störstellen
- Lokale Schwingungsmodi in Gas-Kristallen
- Gravitative Wechselwirkungen zwischen Molekülwolken, -komplexen und Sternen

**Fachbereich 5, Synthetische und Analytische Chemie** 599

- Quantenmechanische Berechnung organischer Moleküle
- Quantenmechanische Berechnung unkonventioneller Gasphasenspezies
- Quantenchemische Berechnungen unimolekularer Prozesse
- Röntgenstrukturuntersuchungen an Einkristallen
- Bestimmung der Struktur metallorganischer Verbindungen

**Fachbereich 9, Physikalische Ingenieurwissenschaft** 527

- Instationäre Profilmströmung
- Mehrkomponenten Filmverdunstung im Rohr
- Untersuchung einer ebenen Scherschicht zwischen zwei Gasen mit unterschiedlicher Dichte im Rohr
- Berechnung der Verteilung von Geschwindigkeit, Temperatur und Dichte bei Flammen

**Fachbereich 6, Physikalische und Angewandte Chemie** 157

- Moleküldynamische Berechnungen an Makromolekülen
- Nahordnung in Flüssigkeiten

**Fachbereich 12, Verkehrswesen** 111

- Modelle zur taktischen und strategischen Verkehrsflußplanung
- Minderung des Fluglärms durch Optimierung der Start- und Landeverfahren und Streckenführung
- Wärmeübertragung in Flügelstrukturen
- Digitalisierung und graphische Darstellung flugsicherungsbezogener Daten

	System-Zeit (Stunden)
<b>Fachbereich 19, Elektrotechnik</b>	105
- Simulation von Leistungshalbleiterbauelementen	
- Optimierung der Sperrspannung planarer PN-Übergänge	
<b>Fachbereich 3, Mathematik</b>	97
- Behandlung von Navier-Stokes-Gleichungen	
- Intervallarithmetische Behandlung partieller Differentialgleichungen (insbesondere große Gls)	
- Simulation elastischer und unelastischer Streuphänomene	
<b>Fachbereich 10, Verfahrenstechnik</b>	89
- Schraubenrührer mit Wärmeübergang	
- Freie Konvektion an Zylindern	
- Kernverfahrenstechnik	
<b>Fachbereich 7, Bauingenieur- und Vermessungswesen</b>	51
- Bearbeitung von Lastabtragungsproblemen mit Hilfe von Finite-Elemente-Verfahren	

### 4.3 Aufbau der Rechnernetze und Dienste

Der Supercomputer des ZIB ist mit Hilfe der Vorrechner CDC CYBER 930 und CYBER 825 in das Deutsche Forschungsnetz **DFN** integriert. Für den Datentransport verwendet das DFN die standardisierten, von den internationalen Postverwaltungen angebotenen X.25-Dienste. Unsichtbar für den Benutzer werden diese Dienste zu den Partnern des ZIB auf festgeschalteten Postleitungen oder durch den DATEX-P-Dienst der Deutschen Bundespost zur Verfügung gestellt.

Folgende Benutzerdienste des DFN stehen im ZIB zur Verfügung:

**Remote Job Entry RJE.** Mit diesem Dienst werden Aufträge von einem beliebigen am DFN angeschlossenen Rechner zu einem anderen Rechner übertragen und die erzeugten Ausgaben wieder zum absendenden Rechner zurückgesandt. Der **File Transfer FT** dient dem Übertragen von Dateien zwischen Rechnern im Netz (sowohl Versenden als auch Abholen). Beim **Dialog** wird zwischen aktivem Dialog ( der eigene Rechner ist Terminal für einen anderen Rechner) und passivem Dialog (ein Terminal am Netz kann mit dem Rechner Dialog führen) unterschieden.

Zu Beginn des Berichtszeitraums standen diese Dienste sämtlich nur auf der CDC CYBER 825 zur Verfügung (die Dialogdienste auch auf der MVS-Anlage). Nach Installation der CDC CYBER 930 standen ebenfalls RJE, FT und Dialog (passiv) zur Verfügung, zusätzlich wurde der RJE-Dienst auch **direkt** für den Vektorrechner angeboten, so daß für einfache Aufträge der Vorrechner des Vektorrechners für den Benutzer nicht mehr sichtbar ist.

Als Werkzeug für elektronischen Postverkehr (e-mail) und in geringem Umfang auch zur Übertragung von Aufträgen und Dateien zum Vektorrechner wurde auch 1988 das European Academic and Research Network (EARN) eingesetzt. Das ZIB bildet mit dem Berliner Zentralknoten die technische Basis für die Beteiligung an EARN für mehr als 10 Rechenzentren in Berlin. Durch sehr aktive Mitarbeit bei der Gestaltung des Rechnernetzes des Arbeitskreises der Großforschungseinrichtungen (sog. AGF-Netz) und mit der Einführung von X.25 als zusätzlichem Protokoll für EARN auf der festgeschalteten Leitung zum nächsten EARN-Knoten an der Universität Braunschweig leistete das ZIB u. a. seinen Beitrag zur Überführung des EARN in das DFN. Im Laufe des Jahres 1989 wird das ZIB die Unterstützung von EARN zugunsten der standardisierten, vom DFN geförderten X.400-Dienste einstellen.

Lokal im ZIB wurden sowohl die auf den ARPANET-Protokollen TCP/IP aufbauenden Dialog- und File-Transfer-Dienste **TELNET** und **FTP** eingeführt als auch das herstellergebundene (offene) Netz **CDCNET**. TELNET und FTP sind auf Rechnern fast aller Hersteller verfügbar. Sie sind in praktischer Konkurrenz zum normkonformen DFN zu sehen und werden im ZIB in erster Linie wegen der bedienbaren höheren Leitungsgeschwindigkeiten eingesetzt. CDCNET bietet - entsprechend der engeren Bindung an den Hersteller - für Benutzer von CDC-Rechnern ein größeres funktionales Leistungsangebot, auf das das ZIB - wegen der Ausstattung wichtiger Partner mit CDC-Rechnern - nicht verzichten wollte. Beide Gruppen von Diensten können gleichzeitig das ETHERNET benutzen.

Gegen Jahresende waren die Vorbereitungen zur Kopplung des lokalen Netzes im ZIB mit den lokalen Netzen in den Berliner Universitäten und des Regionalen Rechenzentrums für Niedersachsen (RRZN) soweit abgeschlossen, daß nur noch die Lieferung der Remote-Bridges und die Schaltung der beantragten Postleitungen ausstanden.

Die inflationäre Zunahme der unterschiedlichen Netzprotokolle und Netzdienste weist auf den großen Kommunikationsbedarf im Umfeld eines Vektorrechners hin, der zur Zeit noch nicht ausschließlich mit ISO-genormten Diensten befriedigt werden kann. Die hierdurch in den Rechenzentren und bei den Benutzern hervorgerufene Mehrarbeit ist ein starkes Argument für die Entwicklung und Einführung international genormter Dienste. Unter der Federführung des Regionalen Rechenzentrums für Niedersachsen (RRZN) bemühen sich die Betreiber von Vektorrechnern im Norddeutschen Vektorrechnerverband gemeinsam um schnelle DFN-Datenverbindungen. Wenn auch im Berichtszeitraum auf diesem Gebiet noch kein Erfolg sichtbar wurde, so ist doch 1988 die Grundlage geschaffen worden, auf der ein künftiges Hochgeschwindigkeitsnetz errichtet werden kann.

## 4.4 Vorbereitung der Migration zu UNICOS

Die Betriebssysteme aller großen EDV-Hersteller bieten in der Regel ausreichende Möglichkeiten, EDV-Anwendungen so zu gestalten, daß z. B. rechenintensive Programmteile auf einem Zentralrechner, Bildaufbereitungen auf einer Graphik-Workstation und Texterfassung auf entsprechenden Spezialgeräten koordiniert und wirtschaftlich sinnvoll verteilt werden. Die Hersteller von Superrechnern, unter denen an erster Stelle CRAY genannt werden muß, verfügen in der Regel über hinreichend flexible Software, um gleichzeitig derartige Netze verschiedener Hersteller zu bedienen. Insofern war die Konfiguration im ZIB Ende 1988 den Bedürfnissen der Benutzer gut angepaßt.

Es ist hier nicht der Platz, Gründe für die rasche Ausbreitung von UNIX darzustellen. Für das ZIB hingegen ist die zunehmende Verbreitung von UNIX als Betriebssystem der lokalen Rechner seiner Benutzer ein Grund, zunächst einen Zugang für UNIX-Benutzer zu schaffen, der an Komfort den Zugängen für NOS/VE- und NOS/BE-Benutzern nicht nachsteht.

Für den baldigen Einsatz von UNIX (UNICOS) als Betriebssystem des Superrechners sprachen vor allem folgende Argumente:

- Seit der Hersteller CRAY UNIX zum wichtigsten Betriebssystem für alle CRAY-Rechner-Entwicklungslinien erklärt hat, ist UNIX geradezu zum Standardbetriebssystem für Supercomputer avanciert.
- Es werden für Workstations kaum noch andere Systeme als UNIX in Betracht gezogen. Der Benutzer einer Workstation findet also auf dem UNIX-Superrechner praktisch seine vertraute Arbeitsumgebung vor.
- UNIX bietet ein reiches Arsenal von Werkzeugen für die Programmentwicklung und eignet sich daher besonders gut für die wissenschaftliche Datenverarbeitung.
- UNIX unterstützt den Anschluß an Rechnernetze wirkungsvoll und flexibel.
- UNIX erlaubt die Programmierung verteilter Anwendungen in besonders einfacher Weise.
- Ein Superrechner unter UNICOS paßt in idealer Weise zu den Datenverarbeitungskonzepten der Partner des ZIB. Kiel betreibt seinen Superrechner unter UNICOS; das RRZN Hannover plant einen Superrechner unter UNIX. Das WOTAN-Konzept der TUB setzt UNIX voraus.

Als das ZIB im September 1988 offiziell in mehreren Veranstaltungen bekannt gab, daß ab 28. 3. 1989 nur noch UNICOS als Betriebssystem der CRAY X-MP/24 eingesetzt werden solle, war die Reaktion der Benutzer fast einhellig positiv, obwohl die Umstellung der laufenden Projekte auch von den Benutzern nicht unerhebliche - noch dazu fachfremde - Arbeit verlangen wird. Zugleich mit der Ankündigung der Betriebssystemumstellung wurde den Benutzern ein detaillierter Zeit- und Aktionsplan vorgelegt. Folgende Hilfsmittel wurden 1988 vom ZIB für die eigentliche Umstellphase im ersten Quartal 1989 vorbereitet:

-



- Einführungskurse 1989
- Ein neues Benutzerhandbuch (1. Vorabdruck Januar 1989)
- Eine Testumgebung auf von der Firma CRAY zur Verfügung gestellten zusätzlichen Speicherplatten, um für die festgelegten UNICOS-Testzeiten keine zusätzlichen Rüstzeiten zu benötigen.
- Die Nutzungsmöglichkeit des Kieler Supercomputers
- Neue Rechnernetzkomponenten
- Die Umstellung der vom ZIB bereitgestellten Software

Bei der Planung der Betriebssystemumstellung konnte sowohl auf Erfahrungen zurückgegriffen werden, die innerhalb der Benutzerorganisation CUG (CRAY USER GROUP) ausgetauscht werden, als auch auf ältere eigene Erfahrungen mit der Migration von Betriebssystemen und Anwendungen. Nach Abschluß der Umstellung wird über technische und organisatorische Erfahrungen berichtet werden.

## **5. Bereich Wissenschaftlich-Technische Dienste**

### **5.1 Bibliothek**

Das auf SAS basierende Bibliotheksverwaltungssystem wurde weiterentwickelt, insbesondere unter dem Gesichtspunkt, die Formalerschließung nach bibliothekarischen Regeln in Anlehnung an RAK-WB zu erweitern und zu erleichtern. Das Ziel hierbei ist u. a., die Datenbestände so aufzubereiten, daß bei einem späteren Übergang auf ein für kleinere Bibliotheken geeignetes standardisiertes System eine Überleitung problemlos möglich ist.

Zur Verbesserung der Informationsbeschaffung wurden die technischen und personellen Voraussetzungen für online-Recherchen in internationalen Datenbanken (bibliographische und Faktendatenbanken) geschaffen. Erste Recherchen in von STN (Karlsruhe) angebotenen Datenbanken wurden durchgeführt. Um der zunehmenden Bedeutung von online-Bestellungen von Originalliteratur (vor allem FIZ4 und TIB Hannover) gerecht zu werden, wurden entsprechende organisatorische Maßnahmen getroffen.

### **5.2 Reportwesen**

Im Berichtszeitraum wurden zehn Preprints und fünf Technical Reports herausgegeben (s. Liste der Veröffentlichungen am Ende des Berichtes). Mit über zwanzig wissenschaftlichen Einrichtungen ist ein gegenseitiger Austausch von Reports vereinbart, an weitere ca. siebzig Interessenten werden die Veröffentlichungen des ZIB regelmäßig versandt.

### **5.3 Labor**

In diesem Jahr wurden drei Entwicklungsarbeiten durchgeführt:

1.) Zwischen der DATUS-Untervermittlung DPV 5810 und dem Netzeingangsrechner Classic waren schnelle Datenverbindungen zu schalten. Da die vorhandenen V.24-Schnittstellen die nötigen Leitungslängen nicht treiben können, wurde hierfür eine 8-Kanal-Datenübertragungseinrichtung entwickelt. Diese wandelt die V.24/V.28-Schnittstellen der Endgeräte in symmetrische X.27 (V.11)-Signale um und wieder zurück. Mit X.27-Signalen lassen sich Leitungslängen von einigen 100 Metern überbrücken.

Die zugehörige Taktbaugruppe ermöglicht Übertragungsraten bis 19.2 kbit/s

2.) Um die in der Abteilung Graphik vorhandene Gerätevielfalt besser nutzen zu können, wurde die Datenvermittlung DAVID auf der Grundlage eines M6809-Steuerwerks entwickelt. DAVID verfügt über fünf serielle und zwei parallele Ports. Es ermöglicht die Herstellung von Datenverbindungen zwischen jeweils zwei beliebigen Ports. Dadurch kann auch Serien-Parallel-Umsetzung und Parallel-Serien-Umsetzung der Daten vorgenommen werden. Über einfache Kommandos können Verbindungen hergestellt und aufgelöst werden. Flußkontrolle, Timerüberwachung und Transparenzmodus sind weitere Eigenschaften des DAVID.

Zur Zeit sind im ZIB drei DAVID-Steuerwerke im Einsatz.

3.) Für den Benson-Thermo-Transfer-Plotter der Abteilung Graphik wurde ein VME-Bus-Steuerwerk mit M68000-Prozessor entwickelt. Um ungewollte Farbschattierungen zu verhindern, verlangt der Plotter eine kontinuierliche ununterbrochene Datenausgabe für jeweils eine Farbe.

Das Steuerwerk empfängt die Daten vom Rechner, kodiert sie in Binärdaten um und sammelt sie für eine Farbe in einem 1 Mbyte großen Speicher. Sobald das Farbumschaltungssignal empfangen wird, beginnt die Ausgabe über die Parallelschnittstelle. Gleichzeitig geht der Empfang für die nächste Farbe im Hintergrund weiter. Nach drei Farbausgaben ist das Bild fertig.

## 6. Ausstattung

Einnahmen und Ausgaben des Konrad-Zuse-Zentrums werden in einem besonderen Wirtschaftsplan nachgewiesen. Das ZIB führt eine kaufmännische Buchhaltung. Dienstherr und Arbeitgeber für die Beschäftigten des ZIB ist das Land Berlin. Die Personalausgaben für die planmäßigen Dienstkräfte werden nicht im Wirtschaftsplan, sondern im Landeshaushalt - Kapitel 0800 / Titel 42201 und 42501 - nachgewiesen. Im Haushaltsplan des Landes Berlin waren für 7 Beamten- und 89 Angestelltenstellen nach Durchschnittssätzen insgesamt 6.446 TDM Personalmittel ausgewiesen.

### 6.1 Personal

Der Personalstand entwickelte sich wie folgt:

	1.1.88	31.12.88
Leitung	4	4
Wiss. Personal	30	31
Drittmittelpersonal	1	3
Programmierer und DV-Personal	33	30
Technisches Personal / Bibliothek	3	6
Verwaltungspersonal	10,5	10,5
Studentische Hilfskräfte	4	7
Insgesamt	85,5	91,5

### 6.2 Jahresabschluß 1988

Ohne die Gehälter und Dienstbezüge der planmäßigen Mitarbeiter beliefen sich die Aufwendungen im Berichtsjahr auf 12.251 TDM. Davon entfielen auf Investitionen 5.821 TDM. Wesentliche Investitionsausgaben sind für die Speichererweiterung zur CRAY-Anlage, einen neuen CD-Vorrechner und ein Netz von Workstations angefallen.

Das Land Berlin leistete einen Zuschuß von 11.490 TDM. Die eigenen Erträge (767 TDM) zeigen eine steigende Tendenz, was vor allem auf den Abschluß weiterer Kooperationen zurückzuführen ist.

## 7. Veröffentlichungen, Vorträge, Produkte

### 7.1. Preprints

SC 88-1. Winfried Neun; Herbert Melenk. *Implementation of the LISP-Arbitrary Precision Arithmetic for a Vector Processor.*

**Abstract:** Portable Standard LISP (PSL, Version 3.4) and REDUCE 3 were implemented for CRAY1 and Cray X-MP computers at the Konrad-Zuse-Zentrum Berlin in 1986. As a special aspect of the implementation of PSL, an interface to the vector hardware of CRAY processors was defined. With that interface and mostly driven by the needs of REDUCE applications (e.g. extensive calculations of Gröbner bases), the arbitrary precision integer arithmetic of PSL was rebuilt using full power of the vector hardware. A modular arithmetic using vector hardware was also constructed.

SC 88-2. H. Melenk; H.M. Möller; W. Neun. *On Gröbner Bases Computation on a Supercomputer Using REDUCE.*

**Abstract:** Gröbner bases are the main tool for solving systems of algebraic equations and some other problems in connection with polynomial ideals using Computer Algebra Systems. The procedure for the computation of Gröbner bases in REDUCE 3.3 has been modified in order to solve more complicated algebraic systems of equations by some general improvements and by some tools based on the specific resources of the CRAY X-MP. We present this modification and illustrate it by examples.

SC 88-3. J. C. Alexander; B. Fiedler. *Global Decoupling of Coupled Symmetric Oscillators.*

**Abstract:** We model a symmetric system of coupled oscillators as a graph with symmetry group  $G$ . Each vertex of the graph represents an "oscillator" or a "cell" of reactants. The magnitude (concentration) of the reactants in the  $i$ th cell is represented by a vector  $x_i$ . The edges represent the coupling of the cells. The cells are assumed to evolve by identical reaction-diffusion equation which depends on the sum of the reactants in the nearest neighbors. Thus the dynamics of the system is described by a nonlinear differential system  $\dot{x}_i = f(x_i, \sum_{j \in N_i} x_j)$  where the sum ranges over the set  $N_i$  of neighbors of cell  $i$ . If  $f$  also has a symmetry (e.g., oddness), there are geometric conditions on the graph such that the nonlinear system decouples globally into a product flow on certain sums of isotropy subspaces. Thus we may detect higher-dimensional tori of solutions of which are not amenable to other types of analysis. We present a number of examples, such as bipartite graphs, complete graphs, the square, the octahedron, and a 6-dimensional cube.

SC 88-4. Herbert Melenk; Winfried Neun. *Parallel Polynomial Operations in the Buchberger Algorithm.*

**Abstract:** The Buchberger algorithm is a basic tool for the solution of systems of polynomial equations in an environment of computer algebra applications. A model for overlapped processing of different steps of the algorithm is presented, which uses the data structure of the polynomials (distributive representation) for synchronization. The model can be applied for multi processors with fast access to shared data. It is tested with Cray X-MP multi processors based on a parallel version of Portable Standard Lisp (PSL 3.4).

SC 88-5. P. Deuflhard; P. Leinen; H. Yserentant. *Concepts of an Adaptive Hierarchical Finite Element Code.*

**Abstract:** The paper presents the mathematical concepts underlying the new adaptive finite element code KASKADE, which, in its present form, applies to linear scalar second-order 2-D elliptic problems on general domains. Starting point for the new development is the recent work on hierarchical finite element bases due to Yserentant (1986). It is shown that this approach permits a flexible balance between iterative solver, local error estimator, and local mesh refinement device - which are the main components of an adaptive PDE code. Without use of standard multigrid techniques, the same kind of computational complexity is achieved - independent of any uniformity restrictions on the applied meshes. In addition, the method is extremely simple and all computations are purely local - making the method particularly attractive in view of parallel computing. The algorithmic approach is illustrated by a well-known critical test problem.

SC 88-6. P. Deuflhard; M. Wulkow. *Computational Treatment of Polyreaction Kinetics by Orthogonal Polynomials of a Discrete Variable.*

**Abstract:** The paper presents a new approach to the computational treatment of polyreaction kinetics. This approach is characterized by a Galerkin method based on orthogonal polynomials of a discrete variable, the polymer degree (or chain length). In comparison with the known competing approaches (statistical moment treatment, Galerkin methods for continuous polymer models), the suggested method is shown to avoid the disadvantages and preserve the advantages of either of them. The basic idea of the method is the construction of a discrete inner product associated with a reasonably chosen probability density function. For the so-called Schulz-Flory distribution one thus obtains the discrete Laguerre polynomials, whereas the Poisson distribution leads to the Charliés polynomials. Numerical experiments for selected polyreaction mechanisms illustrate the efficiency of the proposed method.

SC 88-7. H. Melenk; H. M. Möller; W. Neun. *Symbolic Solution of Large Stationary Chemical Kinetics Problems.*

**Abstract:** The paper presents a new application of computer algebra to the treatment of steady states of reaction systems. The method is based on the Buchberger algorithm. This algorithm was modified such that it can exploit the special structure of the equations derived from reaction systems, so even large systems can be handled. In contrast to numerical approximation techniques, the algebraic solution gives a complete and definitive overview of the solution space and it is even applicable when parameter values are unknown or undetermined. The algorithm its adaption to the problem class and its application to selected examples are presented.

SC 88-8. Ronald H. W. Hoppe; Ralf Kornhuber. *Multi-Grid Solution of Two Coupled Stefan Equations Arising in Induction Heating of Large Steel Slabs.*

**Abstract:** Induction Heating of large steel slabs can be described by a coupled system of nonlinear evolution equations of Stefan type representing the temporal and spatial distribution of the induced magnetic field and the generated temperature within the slab. Discretizing these equations implicitly in time and by finite differences in space, at each time step the solution of a system of difference inclusions is required. For the solution of that system two multi-grid algorithms are given which combined with a nested iteration type continuation strategy to proceed in time result in computationally highly efficient schemes for the numerical simulation of the induction heating process.

SC 88-9. Ralf Kornhuber; Rainer Roitzsch. *Adaptive Finite-Element-Methoden für konvektionsdominierte Randwertprobleme bei partiellen Differentialgleichungen.*

**Zusammenfassung:** Ausgangspunkt bei der Behandlung konvektiv dominierter, elliptischer Probleme sind die bekannten hierarchischen Finite-Element-Methoden für den rein elliptischen Fall. Als stabile Erweiterung des Standard-Galerkin-Verfahrens wird das Stromlinien-Diffusions-Verfahren durch physikalische Überlegungen motiviert und kurz diskutiert. Anschließend zeigen wir, daß diese Methode erst in Verbindung mit einer hier erstmals vorgestellten lokalen Ausrichtung der Kanten wirksam eingesetzt werden kann. Zusammen mit einer ebenfalls neu entwickelten richtungsorientierten Verfeinerungsstrategie erhält man eine erheblich stabilere, genauere und schnellere Auflösung von Grenzschichten als mit herkömmlichen Methoden.

SC 88-10. Shue-Nee Chow; Bo Deng; Bernold Fiedler. *Homoclinic Bifurcation at Resonant Eigenvalues.*

## 7.2 Technical Reports

**TR 88-1** Rainer Buhtz; Danuta Anna Buhtz. TDLG 3.1 Ein interaktives Programm zur Darstellung dreidimensionaler Modelle auf Rastergraphikgeräten.

**Abstract:** TDLG 3.1 dient zur Darstellung von dreidimensionalen Objekten, die sich aus offenen Linienzügen, Dreieck- und Viereckelementen zusammensetzen. Dabei können verschiedene Visualisierungstechniken benutzt werden: Drahtmodell, Schattierung mit und ohne Lichtquelle, Hidden Surface Removal. Durch Verwendung von Konvertierungsprogrammen können auch IGES- und VDAFS- Dateien dargestellt werden.

**TR 88-2** Herbert Melenk; Winfried Neun. REDUCE User's Guide for the CRAY 1 / CRAY X-MP Series Running UNICOS. Version 3.3.

**Abstract:** This document describes operating procedures for running REDUCE specific to the CRAY 1 and CRAY X-MP computers running the Operating System UNICOS. The document was derived from the corresponding document for Vax/UNIX prepared by A. C. Hearn and L. R. Seward, The Rand Corporation, Santa Monica, (CP85).

**TR 88-3** Herbert Melenk; Winfried Neun. REDUCE Installation Guide for CRAY 1 / X-MP Systems Running UNICOS. Version 3.3.

**Abstract:** This guide describes the CRAY/UNICOS REDUCE distribution tape and the procedures for installing, testing and maintaining REDUCE on a CRAY 1 or CRAY X-MP running UNICOS. This document was derived from the corresponding document for Vax/UNIX prepared by A. C. Hearn and L.R. Seward, The Rand Corporation, Santa Monica, publication CP84.

**TR 88-4** Danuta Anna Buhtz; Jens Langendorf; Olaf Paetsch. GRAZIL - 3D. Ein graphisches Anwendungsprogramm zur Darstellung von Kurven- und Funktionsverläufen im räumlichen Koordinatensystem.

**Abstract:** GRAZIL - 3D ist ein interaktives Programmpaket zur graphischen Darstellung von dreidimensionalen Kurvenverläufen. Das Aussehen der räumlichen Ausgabe des Bildes wird durch Angabe des Blickwinkels und der Perspektive festgelegt.

**TR 88-5** Gerhard Maierhöfer; Georg Skorobohatyj. Parallel-TRAPEX (Ein paralleler adaptiver Algorithmus zur numerische Integration; seine Implementierung für SUPRENUM-artige Architekturen mit SUSI).



**Abstract:** This paper describes some ways of transforming a sequential adaptive algorithm for numerical evaluation of an integral (Romberg-Quadrature with polynomial Extrapolation method) to a parallel one, such as have been implemented by the authors. We developed an algorithm which preserves then sequential adaptivity and is capable of running on various architectures, dynamically controlling the number of active processors depending on the problem. To study the time behaviour, we used the simulator SUSI(SUPrenum SIMulator) which is able to simulate SUPRENUM-like architectures. Results are given in part 3.

### 7.3 Sonstige Reports

1. GMD-FOKUS/ZIB:

*"Multimedia-Dokumente im ISDN-B", Anforderungsanalyse, Version 2.0*  
Projektbericht, September 1988

2. GMD-FOKUS/ZIB:

*"Multimedia-Dokumente im ISDN-B", Analyse relevanter  
Standardisierungsbestrebungen, Version 1.0"*  
Projektbericht, Dezember 1988

3. A. Walter:

*Implementierung eines Finite-Elemente-Verfahrens für die Euler-Gleichungen der  
Gasdynamik.*  
Universität Heidelberg, SFB 123, Preprint Nr. 500, (1988)

### 7.4 Veröffentlichungen

1. J. Böck, P. Deuflhard, A. Hoefl, H. Korb, H.-G. Wolpers, J. Steinmann,  
G. Hellige:

*Thermal recovery after passage of the pulmonary circulation assessed by Deconvolution.*  
J. Appl. Physiol. 64(3): p 1210-1216, (1988)

2. J. C. Böck, P. Deuflhard, A. Hoeft, H. Korb, J. Steinmann, H.-G. Wolpers,  
G. Hellige:  
*Evaluation of Monoexponential Extrapolation of Transpulmonary Thermal-Dye Kinetics by Use of a New Model-free Deconvolution Algorithm.*  
In: Medical Instrumentation, 22, p 20-28, (1988)
  
5. R. Kornhuber, R.H.W. Hoppe:  
*Multi-Grid Solution of the Two-Phase Stefan-Problem.*  
In: Multigrid Methods: Theory, Applications and Supercomputing.  
(Ed. S. McCormick), p. 267-297, Marcel Dekker, New York (1988)
  
6. R. Kornhuber;  
*Local Change of Coordinates for Grid-Functions on Regions with Curved Boundary.*  
Math. Nachr. 139, p. 45-61, (1988)
  
7. R. Kornhuber, R.H.W. Hoppe:  
*Convergent Extensions of Grid-Functions.*  
Math. Nachr. 139, p. 63-75, (1988)
  
8. U. Nowak, J. Warnatz:  
*Sensitivity Analysis in Aliphatic Hydrocarbon Combustion.*  
In: A.L. Kuhl, J.R. Bowen, J.-C. Leyer, A. Borisov (eds.): Dynamics of Reactive Systems, Part I: Flames.  
Progress in Astronautics and Aeronautics, Vol. 113, (1988)

## 7.5 Vorträge

H. BUSCH

27.4.1988

*Nutzung der CRAY X-MP in Kiel*

Kolloquium der Zentraleinrichtung Rechenzentrum der TU Berlin

H. BUSCH, H. CORNELIUS (CRAY Research GmbH)

19.10.1988

*Einsatz des Betriebssystems UNICOS auf der CRAY X-MP des ZIB*

Zentraleinrichtung für Datenvereinbarung der FU Berlin

Zentraleinrichtung Rechenzentrum der TU Berlin

H. BUSCH, W. VORTISCH

16.2.1988

*Einführung in die Nutzung der CRAY X-MP*

Universität Kiel

13.6.1988

*Einführung in die Nutzung des Vektorrechners CRAY X-MP mit dem Betriebssystem UNIX*

Kolloquium der Zentraleinrichtung für Datenverarbeitung der FU Berlin

P. DEUFLHARD

15.1.1988

*Schnelle Löser für große steife Differentialgleichungssysteme - Numerische Simulation und Identifikation großer chemischer Reaktionssysteme,*

Robert Bosch GmbH, Technisches Zentrum Forschung, Stuttgart

22.1.1988

*Eindeutigkeitssätze für Anfangswertprobleme bei steifen Differentialgleichungen,*

Universität Hamburg, Institut für Angewandte Mathematik

23.1.1988

*Concepts of the Adaptive Hierarchical Finite Element Code KASKADE,*

4. GAMM-Seminar "Efficient numerical methods for PDE's", Universität Kiel

27.1.1988

*Numerische Methoden für Probleme der Device Simulation*

Workshop Halbleiter Device Simulation GMD, Birlinghoven

17.2.1988

*Eindeutigkeitssätze für steife Differentialgleichungen und ihre Anwendungen auf chemische Verbrennungsprobleme*

ETH Zürich, Mathematikdepartement

7.4.1988

*Numerische Behandlung von impliziten Differentialgleichungen und differentiell-algebraischen Systemen*

GAMM-Tagung Wien, Minisymposium 2

23.6.1988

*Recent ODE Activities at the Konrad Zuse Center Berlin*

Conference on the Numerical Solution of Initial Value Problems for Ordinary Differential Equations, Toronto,

Invited Talk

7.7.1988

*Effiziente Berechnung von Verzweigungsdiagramme*

Universität Trier, FB Mathematik

15.9.1988

*Concepts of an Adaptive Hierarchical Finite Element Code*

Argonne National Laboratory, Chicago

16.9.1988

*Numerical Simulation and Identification of Large Reaction Systems*

CRAY Symposium "Computational Chemistry on CRAY Supercomputers"

Invited Talk,

3./4.10.1988

I. *Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen I: Nichtsteife Probleme*

II. *Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen II: Steife und differentiell-algebraische Probleme*

III. *Adaptive Methoden für parabolische Differentialgleichungen*

IV. *Adaptive hierarchische Finite-Element-Methoden für elliptische Differentialgleichungen*

Physik-Zentrum Bad Honnef, DPG-Schule "Neue numerische Methoden für die Physik"

12.10.1988

*Erfahrungen und Überraschungen auf dem Taschenrechner*

Schülerseminar, FB Mathematik der FU Berlin

30.11.1988

*Numerisches Rechnen in Naturwissenschaft und Technik*

Ringvorlesung "Anwendungsbereiche der Informationstechnik", Institut für Informatik, FB Mathematik, FU Berlin

16.11.1988

*Numerische Simulation von komplexen Reaktionssystemen*

3. CIC-Workshop Universität Tübingen

30.11.1988

*Numerische Behandlung von Differentialgleichungen aus der Polymer-Chemie*

RWTH Aachen, Institut für Geometrie und Praktische Mathematik

6.12.1988

*I. Das wissenschaftliche Konzept des Konrad-Zuse-Zentrums Berlin*

*II. Konzepte eines adaptiven hierarchischen Finite-Element-Programms*

ETH Zürich, Interdisziplinäres Projektzentrum für Supercomputing

J. GOTTSCHIEWSKI

28.4.1988

*Preliminary evaluation of the CUG survey*

CRAY USER GROUP, Spring 1988 conference, Minneapolis

R. KORNHUBER

3.11.1988

*Hierarchische Finite-Element-Methoden für konvektionsdominierte Probleme bei partiellen Differentialgleichungen*

*4. TECFLAM-Seminar Stuttgart*

J. LÜGGER, L. WEIMANN

13.6.1988

*Entwicklung numerischer Software durch schrittweise Abstraktion und Softwaretransformation*

SUPRENUM GmbH, Bonn

H. MELENK

29.6.1988

*Parallel Polynomial Operations in the Buchberger Algorithm.*

First International Workshop on Computer Algebra and Parallelism, Grenoble

16. 9.1988

*Symbolic Computation and Steady State Analysis for Chemical Reaction Systems*

Computational Chemistry on Cray Supercomputers; Second International Symposium, Chicago

W. NEUN

29.6.1988

*Implementation of the LISP Arbitrary Precision Arithmetic for Vector Processors.*

First International Workshop on Computer Algebra and Parallelism, Grenoble

20.9.1988

*Computer Algebra auf Vektorrechnern - Arithmetik für beliebig genaue Zahlen*

4. Treffen des Arbeitskreises Parallel-Software, ZIB

U. NOWAK

14.9.1988

*Reaktions-Simulation*

IBM-Hochschulseminar "Computereinsatz in der Chemie", Sindelfingen

A. WALTER

21.11.-25.11.1988

*Finite-Elemente-Verfahren für hyperbolische Erhaltungsgleichungen*

Seminarvorträge im Rahmen eines Forschungsaufenthaltes an der Universität Heidelberg

M. WULKOW

15.12.1988

*Numerische Behandlung von Polyreaktionen*

Tagung "Computer Modellierung in der Chemie", Stranski-Institut der TU Berlin

H. ZHA

31.11.1988-3.12.1988

*Structured Singular Value Decomposition of Matrix Triplets - Theory and Algorithms*

Esat Lab., Dept. of Electrical Engineering, K. U. Leuven, Belgium

12.-16.12.1988

*Structured Singular Value Decomposition and its application in solving total least squares problems*

Institute of Numerical Analysis, Technical University of Denmark, Copenhagen

## 7.6 Produkte

### CODELIB

Das ZIB entwickelt und unterhält eine Sammlung von Algorithmen, genannt CODELIB, für Anwendungen auf dem Gebiet Scientific Computing. Diese Aufstellung umfaßt die Namen der bisher vom ZIB bearbeiteten Produkte und eine kurze Charakterisierung. Ein ausführliches Verzeichnis der CODELIB sowie Produktinformationen, Weitergabebedingungen und Preisliste können vom ZIB angefordert werden.

#### 1. Nichtlineare Gleichungssysteme und Ausgleichsrechnung

NLEQ1 Newton-Verfahren, Vollbesetzte Matrix, ohne Rangentscheidung

NLEQ1S Newton-Verfahren, Dünnbesetzte Matrix, ohne Rangentscheidung

NLEQ2 Newton-Verfahren, Analytische Jacobi-Matrix gegeben, mit Rangentscheidung

NLEQ3 Newton-Verfahren, Jacobi-Matrix optional durch Rang-1-Korrektur, mit Rangentscheidung

NLEQN Newton-Verfahren, Jacobi-Matrix durch Differenzenapproximation, mit Rangentscheidung

NLSQ Gauß-Newton-Verfahren für nichtlineare Least-Squares-Probleme

#### 2. Lösung von Anfangswertaufgaben gewöhnlicher Differentialgleichungen

EULEX Nichtsteife Systeme erster Ordnung, Explizite Euler-Diskretisierung



- DIFEX1 Nichtsteife Systeme erster Ordnung, Explizite Mittelpunktsregel
  - DIFEXM Nichtsteife Systeme zweiter Ordnung, Stoermer-Diskretisierung
  - EULSIM Steife Systeme erster Ordnung, Semi-implizite Euler-Methode
  - METAN1 Steife Systeme erster Ordnung, Semi-implizite Mittelpunktsregel
  - LIMEX Linear-implizite und differentiell-algebraische Systeme
  - LARKIN Anwendungen der chemischen Kinetik
3. Lösung von Randwertaufgaben gewöhnlicher Differentialgleichungen
- BVPSOL Mehrzielmethode (Condensing Algorithmus)
  - BVPSOG Mehrzielmethode (Sparse Solver)

## PSL

Portable Standard LISP wurde vom ZIB für Rechner der Typen CRAY 1, CRAY X-MP, CRAY Y-MP und CRAY 2 angepaßt. Der Vertrieb wird von CRAY Research Inc. durchgeführt.

## REDUCE

REDUCE ist ein Programmsystem für allgemeine algebraische Rechnungen für Physiker, Mathematiker und Ingenieure. Es wurde im Konrad-Zuse-Zentrum in der aktuellen Version 3.3 für die Rechner der Serien CRAY 1, CRAY X-MP, CRAY Y-MP und CRAY 2 unter COS und UNICOS angepaßt und wird seit Mitte 1987 vom ZIB weltweit für diese Rechner vertrieben.

## GOS

GOS ist ein Programmpaket der British Museum Documentation Association für die Speicherung komplexer Informationen über Museumsprojekte. GOS wurde vom ZIB gemeinsam mit dem Institut für Museumskunde (SMPK) weiterentwickelt und wird für Rechner der Typen Siemens BS2000 und IBM MVS angeboten. Eine Version für IBM PC AT wird vorbereitet.

## 7.7 Gastvorträge im ZIB

3.2.1988

Dipl.-Ing. A. Vornberger, RWTH Aachen

*Integration der Euler und Navier-Stokes Gleichungen auf unstrukturierten Netzen mit adaptiver Netzverfeinerung*

22.3.1988

Prof. Dr. J. Weyer, Universität Köln

*Ein Prognosemodell zur epidemischen Dynamik von AIDS*

18.4.1988

Prof. Dr. H. Zima, Universität Bonn

*Transformations-Software im SUPRENUM Projekt*

3.5.-11.5.1988

Prof. Feng Kang, Academia Sinica, Beijing / China

Vorlesungszyklus: "*Symplectic Geometry and Scientific Computing*"

- I. *A Survey of Symplectic Geometry and Hamiltonian Dynamics and their Relevance for Scientific and Engineering Computing*
- II. *Symplectic Difference Schemes for Linear Hamiltonian Systems and Conservation Laws*
- III. *A Construction Theory of Generating Functions and its Applications to the Construction and Analysis of Symplectic Difference Schemes*
- IV. *Symplectic 3-level Schemes and Symplectic Schemes in Infinite Dimensions*

9.5.1988

Dr. W. Oed, CRAY Research GmbH

*Hilfsmittel zur Performance Analyse auf CRAY X-MP-Systemen*

17.5.1988

Prof. Dr. M. Dobrowolski

*Diskret-divergenzfreie Verfahren zur Approximation der Navier-Stokes-Gleichung*

25.5.1988

Dr. G. Wittum, Universität Heidelberg

*Mehrgitter-Methoden für Stokes- und Navier-Stokes-Gleichungen*

7.6.1988

Prof. Dr. E. Hairer, Universität Genf

*Implizite Runge-Kutta-Verfahren für steife und differentiell-algebraische Systeme*

14.6.1988

Prof. Dr. Ch. Lubich, Universität Innsbruck

*Über Extrapolationsverfahren für differentiell-algebraische Gleichungen*

28.6.1988

Prof. F. A. Potra, University of Iowa

*Numerical Methods for Solving Nonlinear Integral Equations*

30.6.1988

Prof. R. Roemer, University of Arizona, Tucson

Simulation Programs and the Inverse Problem in Hyperthermia

4.7.1988

Prof. Dr. R. Rannacher, Universität des Saarlandes, Saarbrücken

Extrapolationstechniken bei Finite-Element-Methoden

13.12.1988

Dr. H. Richter, MPI für Plasmaphysik, Garching

*Transputer-Multiprozessor mit variabler Topologie*

14.12.1988

Dr. P. Kaufmann, Zentrale Projektleitung des Deutschen Forschungsnetzes

*X.400 Mail-Dienste*

15.12.1988

M. Pankert, Technische Hochschule Aachen

*Neuere Entwicklungen auf dem Gebiet der Massenspeichersysteme*

## **7.8 Arbeitskreise, Tagungen im ZIB**

7.6.1988

Workshop:

CYBER 930 mit NOS/VE 1.3.1 als Gateway-Computer zwischen CRAY und DFN

8./9.6.1988

Konferenz der Interessengemeinschaft der Betreiber von CRAY-Rechnern im deutschsprachigen Raum (IGC)

19./20.9.1988

4. Treffen des Arbeitskreises Software für Benutzer von Parallel- und Vektorrechnern an wissenschaftlichen Rechenzentren

## **7.9 Informationsbesuche / Präsentationen im ZIB**

12. 1. 1988

Informatikkursus der Friedrich-Engels-Oberschule, Berlin

24.2.1988

Apollo Domain Computer GmbH

Präsentation des Produktspektrums

14.3.1988

CRAY Research GmbH

Die CRAY Y-MP, neues Spitzenmodell der CRAY X-MP-Serie

22.4.1988

SUN Microsystems GmbH

Präsentation des Produktspektrums

3. 5. 1988

Besuch einer Delegation des Chongging Branch des Institute of Scientific and Technical Information of China

5.5.1988

IBM Deutschland

Präsentation von UNIX-Workstations

14.6.1988

Control Data GmbH zusammen mit Silicon Graphics GmbH

Präsentation von Graphik-Workstations

11. 11. 1988

Institut für Angewandte Mathematik der Universität Hamburg

8.12.1988

SUN Microsystems GmbH

Informationsveranstaltung über Netzwerkprodukte und Bedienoberflächen.

## **7.10 Gäste**

13.7.-16.7.1988

Dr. W. Mackens, Universität Hamburg

Zusammenarbeit mit P. Deuflhard

1.8.-22.8.1988

Dr. W. Zulehner, Johann-Kepler-Universität , Linz

Forschungsaufenthalt

29.8.-3.9.1988

Dipl.-Math. P. Leinen, Universität Dortmund

Zusammenarbeit mit P. Deuflhard und R. Roitzsch

29.8.-21.9.1988

B. Schmidt, Universität Köln

Zusammenarbeit mit P. Deuflhard und U. Pöhle

10.10.-21.10.1988

Dr. E. Schrüfer, GMD, Bonn

Zusammenarbeit mit P. Deuflhard, H. Melenk und W. Neun

21.11.-25.11.1988

Prof. Dr. M. Möller, Fernuniversität Hagen

Forschungsaufenthalt, Zusammenarbeit mit H. Melenk und W. Neun

29.2. - 4.3.1988

Prof. Dr. H. Yserentant, Universität Dortmund

Forschungsaufenthalt, Zusammenarbeit mit P. Deuflhard

1.7. - 16.7.1988

Dr. B. Fiedler, Universität Heidelberg

Forschungsaufenthalt, Zusammenarbeit mit P. Deuflhard

3.7.-23.7.1988

Prof. Dr. H. Yserentant, Universität Dortmund

Forschungsaufenthalt, Zusammenarbeit mit P. Deuflhard

## **7.11 Zeitschrift IMPACT**

Im Berichtszeitraum wurde die neue Zeitschrift

IMPACT of Computing in Science and Engineering

oder kurz IMPACT, gegründet. 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, Argonne National Lab., Illinois, USA
- I. Duff, Harwell Lab., Oxfordshire, Großbritannien
- A. M. Erisman, Boeing, Seattle, USA
- K. Feng, Academia Sinica, Beijing, VR China
- J. Glimm, New York University, 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. Rheinboldt, University of Pittsburgh, USA
- U. Trottenberg, SUPRENUM GmbH, Bonn, Bundesrepublik Deutschland
- J. Warnatz, Universität Stuttgart, Bundesrepublik Deutschland

Die neue Zeitschrift soll als Plattform für einen Dialog zwischen Mathematik und Informatik auf der einen Seite sowie Natur- und Ingenieurwissenschaften auf der anderen Seite dienen. Das erste Heft erscheint im April 1989.

Zur näheren Charakterisierung hier ein Auszug aus einer Werbebroschüre der Zeitschrift:

**"IMPACT" will include articles from four main areas:**

- Mathematical and scientific modeling
- Scientific computing
- Computer science
- Scientific and engineering applications

## **IMPACT Contributions**

Articles typically will describe real-life problems attacked by a new or specifically adapted algorithm or by any other new computing technique. The journal will publish papers offering new techniques that stimulate an impact in a particular field of scientific or engineering applications. In each paper, such an impact will be made clear, either by documentation of actual computations or by exemplification of model problems that reflect special features of real-life applications.

## **Interdisciplinary Articles Featured**

IMPACT will be interdisciplinary; its papers will touch upon a combination of at least two of the four main areas - with the exception of the combination of modeling and applications, for which other journals may be more appropriate.

## **Interdisciplinary Audience**

The audience of IMPACT will also be interdisciplinary. It will include mathematicians interested in seeing mathematics applied to the sciences and scientists and engineers with an interest in recent developments in mathematics and computer science.

## **International Editorial Board**

The prestigious, international editorial board is committed to prompt, effective reviewing of submitted papers.

The editors are aware that such interdisciplinary papers may be somewhat longer than those concentrated on one field. Consequently, the journal does not impose a formal restriction on the length of papers."