

Konrad-Zuse-Zentrum
für Informationstechnik Berlin



Jahresbericht 1987

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

ISSN 0933-7903

Inhalt

1. Vorbemerkung	1
2. Allgemeines	3
2.1 Rechtliche Grundlage	3
2.2 Linien- und Projektorganisation	3
2.3 ZIB-Fellows	5
2.4 Verwaltungsrat	5
2.5 Wissenschaftlicher Beirat	5
2.6 Personalrat	6
3. Bereich Scientific Computing	7
3.1 Abteilung Numerik	8
3.2 Abteilung Symbolik	10
3.3 Abteilung Graphik	14
3.4 Abteilung Software	16
3.5 Abteilung Systolik	20
4. Bereich Anlagenbetrieb	22
4.1 Nutzung des Supercomputers	22
4.2 Organisation	25
4.3 Arbeiten des Bereichs Anlagenbetrieb	26
5. Bereich Wissenschaftlich-Technische Dienste	29
5.1 Bibliothek, Abteilung Reportwesen	29
5.2 Elektroniklabor	29
6. Ausstattung	31
6.1 Personal	31
6.2 Jahresabschluß 1987	31
7. Veröffentlichungen, Vorträge, Produkte	33
7.1 Preprints	33
7.2 Technical Reports	35
7.3 Veröffentlichungen	37

7.4 Vorträge	38
7.5 Produkte	41
7.6 Gastvorträge	42
8. Anhang	45

1. Vorbemerkung

Mit dem hier vorgelegten Jahresbericht stellt sich das Konrad-Zuse-Zentrum zum ersten Mal mit seiner neuen Struktur vor, die seit Dezember 1986 vom Verwaltungsrat einstimmig unterstützt wird. Grundzüge sind: Der Forschungs- und Entwicklungsbereich Scientific Computing wird neu eingerichtet, gegliedert in die Abteilungen Numerik, Symbolik, Graphik, Software und Systolik. Die Aufgaben, die mit dem Betrieb eines Supercomputers im Norddeutschen Vektorrechnerverbund zusammenhängen, sowie die ZIB-internen Rechenzentrumsdienste werden in dem neu gegründeten Bereich Anlagenbetrieb zusammengefaßt.

In der Abteilung Verteilte Systeme wurde nach dem Abschluß von Projekten, die noch im alten GRZ/WRB-Rahmen initiiert und bearbeitet wurden, die Kooperation im Zusammenhang mit BERKOM-Projekten begonnen. Um die einschlägigen Arbeitsgruppen in Berlin zusammenzuführen, wurden schließlich auch die Mitarbeiter der Abteilung Verteilte Systeme der GMD-FOKUS assoziiert. Aus diesem Grunde wird nicht hier, sondern im Kontext des BERKOM-Forschungsberichtes auf die Arbeit dieser Abteilung eingegangen werden.

Es verdient Erwähnung, daß die neue Struktur auch innerhalb des Hauses breitestmögliche Unterstützung gefunden hat. So haben sich nahezu alle Mitarbeiter ihren jetzigen Platz anhand gewisser Vorgabelinien selbst gewählt. Darüber hinaus hat der Personalrat des Hauses an allen wichtigen Entscheidungen konstruktiv mitgewirkt.

Herausragendes Ereignis des vergangenen Jahres war der *Öffentlichkeitstag* des ZIB, abgehalten in der Kongreßhalle am 22. Juni 1987. Sinn dieser Veranstaltung war, die neue Struktur und das neue Aufgabenprofil des Konrad-Zuse-Zentrums einer interessierten Öffentlichkeit vorzustellen. Über die Vorträge von Mitgliedern des ZIB hinaus gelang es auch, das Aufgabenspektrum des ZIB anhand einer Reihe von Fachvorträgen darzustellen.

Im Rückblick auf den Berichtszeitraum September 1986 bis Dezember 1987 ist festzustellen, daß das ZIB als Ganzes erste erfolgreiche Schritte in die neue Richtung hat tun können. Eine Konsolidierung ist sicherlich erst Aufgabe der nächsten Jahre. Schließlich läßt sich der Aufbau eines Forschungs- und Entwicklungszentrums auf der Basis einer Institution, die bisher ausschließlich auf Dienstleistung für die Universitäten ausgerichtet war, nicht innerhalb eines Jahres bewerkstelligen. Trotzdem glauben wir, daß der vorliegende Tätigkeitsbericht unseren Lesern eine erste Idee geben kann, welche Aufgaben sich das ZIB für die Zukunft vorgenommen hat.

P. Denfhard

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. Am 22. Mai 1987 wurde Prof. Deuffhard zum Präsidenten bestellt. Das Berufungsverfahren für den Vizepräsidenten konnte leider noch nicht abgeschlossen werden.

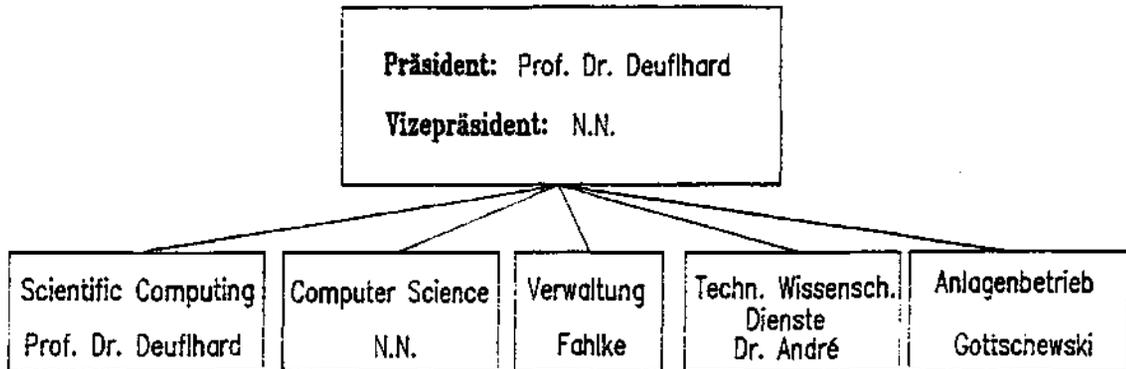
2.2 Linien- und Projektorganisation

Das folgende Schaubild verdeutlicht die Grundorganisation des ZIB. Den Forschungs- und Entwicklungsbereichen Scientific Computing und Computer Science stehen die Dienstleistungsbereiche zur Seite.

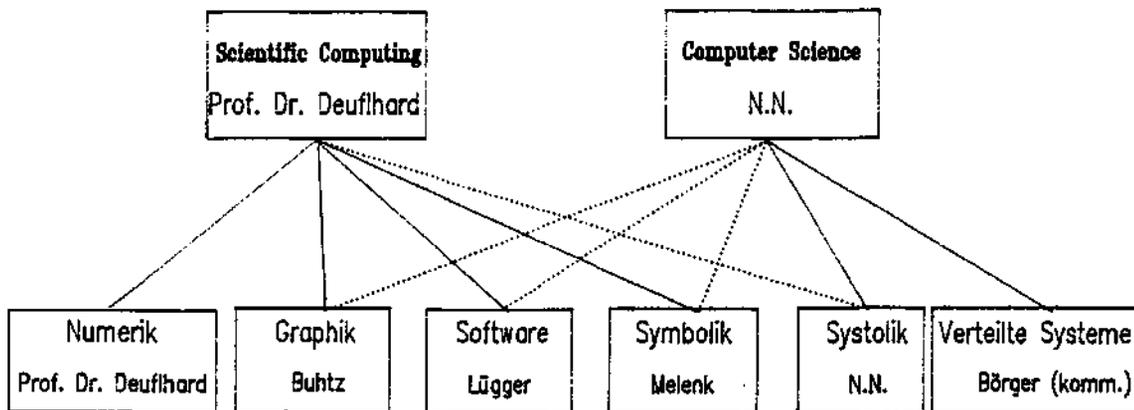
Vorhaben des Forschungs- und Entwicklungsprogramms werden in den Abteilungen durchgeführt. Daneben werden im ZIB Projekte bearbeitet, die abteilungsübergreifend organisiert sind. Insbesondere im Rahmen von Projekten ist die Zusammenarbeit mit Wissenschaftlern aus anderen Einrichtungen üblich und erwünscht.

Konrad-Zuse-Zentrum
für Informationstechnik

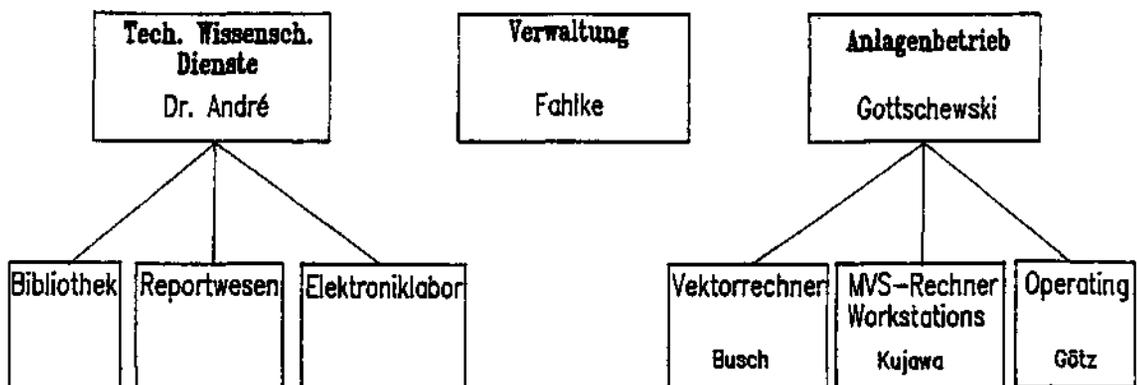
Berlin



ZIB: F&E



ZIB: DIENSTLEISTUNG



2.3 ZIB-Fellows

Um diese Zusammenarbeit zu fördern, ist das Konrad-Zuse-Fellowship ins Leben gerufen worden. Es 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 ihrem jetzigen Arbeitsort nicht zur Verfügung steht.

Das Fellowship wurde im Jahr 1987 an drei Wissenschaftler vergeben. Auf die konkreten Themenstellungen und Ergebnisse der Zusammenarbeit wird in Kapitel 3 näher eingegangen.

2.4 Verwaltungsrat

Das ZInfG sieht vor, daß der Vorsitzende des Verwaltungsrates nicht derselben Universität wie der Präsident des ZIB angehören darf. Da Prof. Deuffhard am 22. Mai 1987 zum Präsidenten berufen wurde, wechselte der Vorsitz im Verwaltungsrat von der Freien zur Technischen Universität. Dem Verwaltungsrat gehörten im Berichtsjahr an:

Prof. Dr. Michael Erbe, FUB, Vorsitzender bis 22.5.1987

Prof. Dr. Dieter Schumann, TUB, Vorsitzender ab 22.5.1987,
ausgeschieden am 30.9.1987

Prof. Dr. Kurt Kutzler, TUB, Vorsitzender seit 1.10.1987

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

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

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

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

Im Jahre 1987 tagte der Verwaltungsrat am 22. Mai und 7. Dezember.

Zur Vorbereitung seiner Sitzungen und zur selbständigen Erledigung übertragener Aufgaben hat der Verwaltungsrat am 22. Mai 1987 eine Ständige Kommission eingesetzt.

2.5 Wissenschaftlicher Beirat

Der wissenschaftliche Beirat setzt sich wie folgt zusammen:

Prof. Dr.-Ing. Konrad Zuse	-	Ehrenvorsitzender
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

Im Verwaltungsrat besteht Einvernehmen darüber, erst nach der Berufung des Vizepräsidenten den wissenschaftlichen Beirat um weitere Fachvertreter zu ergänzen.

2.6 Personalrat

Im Jahre 1987 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

Während der Begriff "Computer Science" inzwischen in den deutschen Sprachgebrauch eingegangen ist, gilt dies nicht (oder noch nicht) für den Begriff "Scientific Computing", der auch im englischen Sprachraum erst in den letzten Jahren in seiner heutigen Bedeutung geprägt worden ist. Während Computer Science sich mit dem Bau und dem Betrieb von Rechnern beschäftigt, hat Scientific Computing eine Doppelbedeutung: einerseits als Computing in Science and Engineering, also als Rechnen von naturwissenschaftlichen und technischen Problemen; andererseits als Science of Computing, also als Wissenschaft des Rechnens. Damit berührt Scientific Computing an einer Seite die sogenannte Mathematische Modellierung (etwa mathematische Analysis, naturwissenschaftliche und ingenieurmäßige Modellbildung) und an der anderen Seite die Informatik. Obwohl es Scientific Computing in diesem Sinn bereits seit etwa Ende des 2. Weltkrieges gibt, rechtfertigt die jüngste Entwicklung einen eigenen Namen. In den letzten Jahren haben sich in zahlreichen Disziplinen der Natur- und Ingenieurwissenschaften die mathematischen Modelle derart verfeinert, daß sie bereits für eine realistische Computersimulation taugen. Zugleich hat die Entwicklung von Supercomputern und die Entwicklung von Algorithmen, also Rechenmethoden, ein Stadium erreicht, in dem auch bisher verschlossene Bereiche der Natur- und Ingenieurwissenschaften einer rechnerischen Beherrschung zugänglich erscheinen. Mit der Realitätsnähe der mathematischen Modelle sowie mit der möglichen rechnerischen Beherrschung dieser Modelle ist damit Scientific Computing für die Wettbewerbssituation in einer Reihe von Industriezweigen mittelfristig von Bedeutung. Mathematisch stellen die Modelle in aller Regel Systeme von gewöhnlichen und partiellen Differentialgleichungen dar, also von Gleichungen, die das zeitliche und räumlich-zeitliche Verhalten von physikalischen, chemischen oder technischen Systemen beschreiben. Die Lösung dieser Systeme mit Mitteln der Numerischen Mathematik, Symbolischen Mathematik (auch: Künstlichen Intelligenz), Computergraphik, Software-Technologie und Parallelisierung ist Aufgabe des Forschungs- und Entwicklungsbereiches Scientific Computing des ZIB.

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. Besonderes Augenmerk wird gerichtet auf große nichtlineare Systeme.

Steife und implizite Differentialgleichungen

Im Berichtszeitraum wurden die Arbeiten über *steife Differentialgleichungen, implizite Differentialgleichungen und differentiell-algebraische Systeme* fortgeführt. Anwendungen im Bereich der chemischen Reaktionskinetik wurden in einem Überblicksartikel zusammengefaßt (Preprint SC-86-1). Eine neu entwickelte Theorie über steife Differentialgleichungen liefert klassifizierende Größen, welche in numerischen Integratoren zumindest vernünftig geschätzt werden können - besonders einfach in Extrapolationsverfahren (Preprint SC-87-3). Auswirkungen der neuen Theorie sind besonders bei Problemen der chemischen Verbrennung zu erwarten, wie sich auch in ersten numerischen Tests bereits gezeigt hat. In den Anwendungsbereichen Mehrkörperdynamik und Robotik liegen häufig Differentialgleichungssysteme 2. Ordnung mit nichtlinearen Dissipationstermen vor. Für diese Anwendungsklasse wurden spezielle Algorithmen entwickelt (Preprint SC-87-5).

Affin-invariante Newton-Methoden

Innerhalb des Projektes "*Hochnichtlineare Systeme*" wurden neue Sätze für die globale Konvergenz von affin-invarianten Newton-Methoden sowie die entsprechenden Erweiterungen für Gauss-Newton-Methoden bewiesen. Diese Sätze liefern das Rüstzeug für die Ausarbeitung des geplanten Buches "Newton Techniques for Highly Nonlinear Systems - Theory, Algorithms, Codes". Erweiterungen dieser Sätze gestatten eine natürliche Kombination des Newton-Verfahrens mit der Methode der *Hierarchischen Finiten Elemente*. Vorarbeiten für den linearen Spezialfall (allgemeine 2-D-Gebiete, wesentlich elliptische Differentialgleichungen) wurden gemeinsam mit dem ZIB-Fellow H. Yserentant sowie seinem Mitarbeiter P. Leinen (Universität Dortmund) vorangetrieben. Veröffentlichungen über diesen Themenkreis sind in Vorbereitung.

Diffusions-Konvektions-Reaktions-Differentialgleichungen

Dieses Projekt wird innerhalb der Arbeitsgemeinschaft TECFLAM in enger Kooperation mit Ingenieuren und Physiko-Chemikern verfolgt. Für

die erfolgreiche Behandlung von chemischen Verbrennungsproblemen (in Motoren oder in Heizkraftwerken) sind *hochnichtlineare parabolische Differentialgleichungen* zu lösen. In den bekannten Linienmethoden werden derzeit international fast ausnahmslos nur die Zeitschrittweite und der Zeitdiskretisierungsfehler auf solider mathematischer Basis kontrolliert. Im Rahmen von Vorarbeiten zu einer Dissertation wird am ZIB ein Verfahren zur simultanen *Kontrolle von Raum- und Zeitdiskretisierungsfehlern* auf Extrapolationsbasis entwickelt. Um wandernde Verbrennungsfronten numerisch effizient simulieren zu können, werden über die häufig verwendeten Gitteranpassungen hinaus (nach einem oder mehreren Zeitschritten) auch sogenannte *mitbewegte Raumgitter* in die Methode einbezogen. Erste numerische Tests sind vielversprechend, sowohl unter dem Gesichtspunkt der Rechenzeiterparnis als auch des benötigten Speicherplatzes. Darüber hinaus sollten sich diese Methoden auch in anderen Anwendungsbereichen (wie etwa *Mikroelektronik*) erfolgreich einsetzen lassen.

3.2 Abteilung Symbolik

Im Berichtszeitraum wurden schwerpunktmäßig die folgenden Themen bearbeitet: Implementierung von LISP und REDUCE für die Rechner der Typen CRAY 1 und CRAY X-MP, die Lösung polynomialer Gleichungssysteme mit Hilfe von Gröbner-Basen, die automatische Erstellung von Jacobi-Matrizen und die Museumsdokumentation.

Mitte 1987 wurde es durch Kooperation mit der Firma Cray Research möglich, in der Abteilung Symbolik zwei Workstations des Typs Sun 3 zu installieren. Damit wurde das Entwicklungspotential der Abteilung erheblich gestärkt. Die hohe Interaktivität der Workstations ist gerade für auch interpretativ arbeitende Systeme wie LISP und REDUCE wichtig: Hier können Softwarearbeiten unmittelbar ohne Zwischenschalten eines Compilers in noch laufenden Anwendungen erprobt werden. Auf LISP- und REDUCE-Niveau sind die Workstations mit der CRAY X-MP voll kompatibel (auch die auf den Workstations eingesetzte Software basiert auf PSL), so daß jetzt typischerweise algorithmische Entwicklungsarbeiten auf den Workstations stattfinden, während der produktionsartige Einsatz dann auf der CRAY X-MP stattfindet.

Implementierung von PSL und REDUCE für CRAY Rechner

Die Implementierung von *Portable Standard LISP* (PSL) für Rechner der Typen CRAY 1 und CRAY X-MP sowie die Implementierung des darauf aufbauenden Algebrasystems REDUCE wurden im Laufe des Jahres 1987 weiter vervollständigt. Im Rahmen eines zweiwöchigen Aufenthalts in den Vereinigten Staaten auf Einladung von Cray wurden beide Pakete auch für das neue Betriebssystem UNICOS aufbereitet. Der Vertrieb ist inzwischen durch Verträge abgesichert: PSL wird von Cray Research weitergegeben, während das ZIB selbst die weltweiten Vertriebsrechte für REDUCE für CRAY-Anlagen von der RAND Corporation erworben hat.

Schon im Vorjahr hatte sich herausgestellt, daß die Implementierung von REDUCE für diese Rechnertypen besonders leistungsfähig ist. Diese Leistungsfähigkeit konnte 1987 noch weiter gesteigert werden: Das ZIB hält derzeit den *Weltrekord* für REDUCE Verarbeitungsleistung. Diese wird anhand der Laufzeit eines standardisierten Programmes ermittelt. Allerdings ist dieses Programm wenig typisch für die spezifischen Leistungen der CRAY-Rechner.

1987 gelang es im ZIB, auch die Vektorbefehle für die *Arithmetik beliebig langer Zahlen* in LISP einzusetzen. Damit wurde für diesen in der Symbolverarbeitung besonders wichtigen Teilbereich eine völlig neue Leistungsklasse eröffnet.

Lösung polynomialer Gleichungssysteme mit Hilfe von Gröbner-Basen

Im Januar 1987 wurde eine intensive Zusammenarbeit der Abteilung Symbolik mit dem ZIB-Fellow H. M. Möller (Fernuniversität Hagen) vereinbart, welche die Weiterentwicklung und den Einsatz des *Buchberger-Algorithmus* zum Gegenstand hat. Dieser Algorithmus formt mit Techniken der Computer-Algebra ein System von Polynomen so um, daß es eine besonders einfache Struktur erhält: Es wird eine Gröbner-Basis. Die Gröbner-Basis gestattet direkte Einsicht in die Struktur des von den Polynomen aufgespannten Ideals. Im günstigsten Falle kann man die Lösungen des nicht-linearen Gleichungssystems, das durch die Polynome beschrieben wird, direkt aus der Gröbner-Basis ablesen bzw. ermitteln. Der Buchberger-Algorithmus ist im Prinzip sehr einfach, jedoch sind seiner Anwendung dadurch Grenzen gesetzt, daß die als Zwischenresultate anfallenden Polynome sehr zahlreich und sehr umfangreich sein können. Die Komplexität einer Berechnung ist von vornherein nicht planbar und auch theoretische obere Schranken für den Rechenumfang sind eher pessimistisch. In jedem Falle erfordert der Algorithmus für nichttriviale Aufgabenstellungen einen hohen Rechenaufwand, so daß sich sein Einsatz auf Hochleistungsrechnern anbietet.

Zu Beginn des Jahres wurden zunächst die technischen Grundlagen erarbeitet: Ausgehend von einer vorliegenden Implementierung des Buchberger-Algorithmus in REDUCE (es handelte sich um eine Vorversion der mit REDUCE 3.3 offiziell verteilten Version) wurde eine eigene Formulierung des Algorithmus erarbeitet. Erste Laufzeitmessungen auf der CRAY X-MP des ZIB ergaben, daß diese Art Rechnung besonders intensiven Gebrauch von der Langzahl-Arithmetik macht: Koeffizienten mit einigen hundert Dezimalstellen sind keine Seltenheit bei den Zwischenresultaten. Diese Einsicht stimulierte wesentlich die Arbeiten an der Langzahl-Arithmetik von PSL (s.o.).

Während zunächst die klassischen aus der Literatur bekannten Beispiele für den Buchberger-Algorithmus nachvollzogen wurden, gingen dann seit Mitte 1987 Anwendungsfälle einer neuen Klasse in die Arbeit ein: Es wurden Polynome betrachtet, die direkt aus Differentialgleichungssystemen für *chemische Reaktionsmodelle* stammen und den stabilen Zustand der Lösungen beschreiben. Diese Gleichungssysteme sind durch folgende Eigenschaften charakterisiert: Die Zahl der Polynome und der Variablen ist, gemessen an bisherigen Einsatzfällen des Buchberger-Algorithmus, recht groß: ca. 50. Die Systemmatrix ist dünn besetzt, und die Grade der Terme sind nicht

sehr hoch (maximal 3); es sind nur Lösungen mit nichtnegativen Komponenten relevant. Mit der klassischen Version des Buchberger-Algorithmus waren diese Probleme wegen ihres Umfangs nicht lösbar. Deshalb wurden der Buchberger-Algorithmus und seine Implementierung konsequent weiterentwickelt. Von dieser Weiterentwicklung seien hier die folgenden Punkte erwähnt:

- der Algorithmus zerlegt das Problem durch Faktorisierung der Polynome in einen Baum von einfacher zu lösenden Teilproblemen,
- es können jetzt Polynome mit Gleitkomma-Koeffizienten bearbeitet werden,
- die von der Aufgabenstellung her definierte Anforderung, daß nur nichtnegative Lösungen relevant sind, wird jetzt direkt im Algorithmus umgesetzt.

Dies hat dazu geführt, daß Probleme der oben beschriebenen Klasse jetzt im ZIB gelöst werden können. Auch einige weitere in der Literatur bisher als nicht lösbar bezeichnete Probleme konnten inzwischen auf der CRAY X-MP erfolgreich bearbeitet werden.

Automatische Berechnung von Jacobi-Matrizen

Im ZIB besteht die Absicht, symbolisches und numerisches Rechnen für die Lösung schwieriger Problemfälle zu koppeln. Ein erster Anwendungsfall hierfür ist die automatische Erstellung von Programmen für Jacobi-Matrizen. Hierbei spielt das symbolische Rechnen die Rolle eines Präprozessors für einen numerischen Algorithmus: Die Formeln für ein Differentialgleichungssystem werden dem symbolischen Prozessor in einer mathematischen Notation übergeben, und dieser ermittelt daraus durch Differentiation die Formeln für die Jacobi-Matrizen, die dann automatisch in ein FORTRAN Quellprogramm gemäß den Anforderungen des numerischen Prozessors umgesetzt werden. Noch unter der Kontrolle des algebraischen Prozessors, der hier die Rolle eines Expertensystems übernimmt, wird dieses erzeugte Programm von dem FORTRAN-Compiler übersetzt, mit dem numerischen Auswertungsteil gebunden und zur Ausführung gebracht. Diese Kopplung wurde exemplarisch für die im ZIB eingesetzten Extrapolationsverfahren durchgeführt.

Projekt Museumsdokumentation

Die Arbeiten im Projekt Museumsdokumentation wurden entsprechend der Projektplanung im Jahr 1987 fortgesetzt. An dieser Stelle erwähnenswert ist besonders ein Aspekt der Projektarbeit: Die Vorarbeiten für die Umsetzung des für das Projekt wichtigen Programmsystems GOS von der Programmiersprache BCPL auf die Sprache C. GOS ist in Großbritannien in der seinerzeit modernen aber inzwischen nicht mehr sehr verbreiteten Sprache BCPL geschrieben worden. Dadurch wird die Einsatzmöglichkeit von GOS auf Systeme eingeschränkt, für die ein entsprechender Compiler vorliegt. Da aber gerade im Dokumentationsbereich der Einsatz kleiner Rechner (Personal Computer, Workstations) sinnvoll ist, wird die Umsetzung von GOS in die inzwischen weit verbreitete Programmiersprache C vorbereitet. Aufbauend auf Werkzeugen, die aus einem früheren Projekt im ZIB bereits verfügbar sind, wurde ein LISP Programm entwickelt, das die Umsetzung weitgehend automatisch vornimmt. Natürlich können nicht alle Aspekte dabei voll erfaßt werden, jedoch wird die Handarbeit auf ein Minimum beschränkt; dies ist für ein so umfangreiches Paket wie GOS besonders wichtig. Die C-Version von GOS wird dann eine zukunftsichere Basis für die weiteren Entwicklungsarbeiten in diesem Projekt darstellen. Es ist geplant, die endgültige Umstellung im Jahr 1988 vorzunehmen.

3.3 Abteilung Graphik

Die Arbeit der Abteilung bestand im Berichtszeitraum in der Bereitstellung geeigneter graphischer Ein-/Ausgabegeräte und der dazugehörigen Software, insbesondere als Dienstleistung innerhalb des ZIB. Es wurden folgende Projekte in Angriff genommen:

Projekt GRAZIL/ZUGRIFF

Zur Darstellung von Kurven und Funktionsverläufen im Koordinatensystem, speziell zur Darstellung von *Lösungen gewöhnlicher Differentialgleichungen*, wurde im Berichtszeitraum das interaktive Programm GRAZIL entwickelt. Es benutzt die weitgehend anwendungsunabhängige Dateischnittstelle ZUGRIFF, die zwischen der Abteilung Graphik und verschiedenen Graphikanwendern des Hauses, z.B. aus der Abteilung Software und der Abteilung Numerik, vereinbart wurde. GRAZIL ermöglicht die komfortable Darstellung von Output numerischer Anwendungsprogramme. Es setzt auf GKS und der im Hause vorhandenen GKS-kompatiblen Darstellungssoftware BIZEPS auf und ist daher auf allen Rechnern prinzipiell bis hin zum PC ohne wesentliche Änderungen einsetzbar.

Projekt 3-D-Graphik

Im Bereich der 3-D-Graphik wurde zunächst gesichtet, ob man auf bestehende Pakete zurückgreifen kann, jedoch erwiesen sich die oberhalb GKS verfügbaren Pakete, wie z.B. das von der Technischen Universität Berlin entwickelte Programmsystem TDLG, als nur für bestimmte Anwendungen geeignet (etwa für das FEM-Programmsystem KASKADE). Es bietet sich langfristig etwa an, das 3-D-GKS einzusetzen und mitzuentwickeln. Da die Normung von 3-D-GKS noch nicht abgeschlossen ist, wird für die Übergangszeit hilfsweise auf eine Darstellungssoftware oberhalb des 2-dimensionalen GKS zurückgegriffen, die in ihrer Begriffswelt dem 3-D-GKS ähnlich ist und die bereits jetzt ermöglicht, 3-D-Daten darzustellen. Mit Hilfe dieser Software wurde das Programm GRAZIL-3-D entwickelt, das es ermöglicht, die *Lösungen partieller Differentialgleichungen an festen Zeitschichten* darzustellen. Auch dieses Programm setzt auf der ZIB-einheitlichen graphischen Dateischnittstelle ZUGRIFF auf.

Projekt PC-Host-Kommunikation

Das Projekt PC-Host-Kommunikation wurde bereits vor Gründung der Abteilung Graphik in Angriff genommen und hat auch zunächst nicht unmittelbar etwas mit Graphik zu tun. Hierbei handelt es sich um die Ent-

wicklung von Terminalemulationen auf PC's und Heimcomputern, die es ermöglichen, über einen PAD-Anschluß der Bundespost mit dem IBM-Host im Fullscreenmodus zu arbeiten. Diese Entwicklung wurde im Berichtszeitraum in Zusammenarbeit mit anderen Mitarbeitern des ZIB fortgeführt. Der Schwerpunkt liegt in der Erweiterung der Terminalmanipulation auf Graphik-Ein-/und Ausgabe und Filetransfer. Geplant ist, langfristig für die graphische Kommunikation die Basissoftware des Deutschen Forschungsnetzes einzusetzen, so daß es möglich sein wird, anstelle der jetzt noch vorliegenden Tektronix-ähnlichen Schnittstelle in Zukunft eine GKS-Schnittstelle zu verwenden.

3.4 Abteilung Software

Die Abteilung Software betreibt Forschung und Entwicklung im Bereich der Software allgemein beziehungsweise der Software-Technik. Sie konstituierte sich im November 1986. Ihre Aufgaben sind:

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

Besonderes Augenmerk soll auf große und nichtlineare Systeme gerichtet werden.

2. **Entwicklung im Bereich der Software-Technologie (Software-Produktionsmethoden, -Prüfungsmethoden).**
3. **Zusammenarbeit mit der Abteilung Numerik bei der Umsetzung von Forschungs-codes in Produktions-codes mit den Schwerpunkten: optimale Steuerung von Prozessen, gewöhnliche Differentialgleichungen und partielle Differentialgleichungen.**
4. **Entwicklung von Expertensystemen im Rahmen von Kooperationen mit Großanwendern.**
5. **Öffentlich zugängliche qualitative und quantitative Software-Tests ("Stiftung Software-Test").**
6. **Weitergabe von ZIB-Entwicklungen und Produktberatung - in der Regel über Netze - an Kunden aus den Natur- und den Ingenieurwissenschaften.**

Diese Aufgaben wurden - in einer Konsolidierungsphase - durch Mitarbeit in den Projekten Hochnichtlineare Methoden, Extrapolationsmethoden, Finite Elemente mit hierarchischen Basen (KASKADE) und durch Aufnahme der Projekte Software-Produktions- und -Transformations-System und Software-Informationssystem in Angriff genommen.

Hochnichtlineare Methoden

Aus der Abteilung Numerik stammt eine Kette von leistungsfähigen Codes zur Lösung von hochnichtlinearen Problemen nach dem Newton- beziehungsweise Gauß-Newton-Verfahren. Im Berichtszeitraum wurden die folgenden Verfahren neu programmiert und dabei softwaretechnisch gründlich revidiert und dokumentiert.

NLEQ1 Nonlinear Equation Solver 1:

Newton-Verfahren mit neuer Dämpfungsstrategie (nach Deuffhard) und Schnittstelle zur Anbindung eines allgemeinen linearen Gleichungslösers (z. B. Gauß-Elimination); Jacobi-Matrix durch eine vom Anwender zu programmierende Unteroutine.

NLEQ2 Nonlinear Equation Solver 2:

Newton-Verfahren mit neuer Dämpfungsstrategie und Rangstrategie; QR-Zerlegung zur linearen Gleichungslösung.

NLEQN Nonlinear Equation Solver with Numerical Differentiation:

Erweiterung von NLEQ2: Jacobi-Matrix wird durch numerische Differenzenapproximation und Rang-1-Approximation nach Broyden berechnet.

NLSQ Nonlinear Least Squares Solver:

Gauß-Newton-Verfahren mit neuer Dämpfungsstrategie zur Lösung von hochnichtlinearen Ausgleichsproblemen.

Die Verfahren wurden in einem sogenannten Abstrakten LOGO-Code programmiert, der gleichzeitig in der Software-Abteilung entwickelt wurde (siehe unten). Durch Software-Transformationen konnten so neben verschiedenen FORTRAN-Versionen der Programme (einfache und mehrfache Genauigkeit, verschiedene Workspace-Versionen, verschiedene Compiler-, Maschinenumgebungen) sowohl *online* als auch lichtsatzfähige Dokumentationen erzeugt werden.

Extrapolationsmethoden

Ein über längere Zeit gewachsener Schwerpunkt des ZIB bei Methoden zur numerischen Lösung von Anfangswert-Aufgaben gewöhnlicher Differentialgleichungen sind Extrapolationsverfahren sowohl für steife als auch für nichtsteife Integration. Die folgenden Forschungscodes wurden in FORTRAN 77 vereinheitlicht und nach Software-Gesichtspunkten aufbereitet.

EULEX	Explizites Euler-Verfahren mit h -Extrapolation.
DIFEX1	Explizite Mittelpunktsregel mit h^2 -Extrapolation.
EULSIM	Semi-implizite Euler-Diskretisierung mit h -Extrapolation.
METAN1	Semi-implizite Mittelpunktsregel mit h^2 -Extrapolation.
DIFEXM	Erweiterte Störmer-Diskretisierung (inklusive Dissipations-term) für Differentialgleichungssysteme zweiter Ordnung mit h^2 -Extrapolation.

In Zusammenarbeit mit der Abteilung Numerik wurden numerische Schätzungen theoretischer Größen (Lipschitzkonstanten) in die steifen Integratoren EULSIM und METAN1, beziehungsweise in die nichtsteifen Integratoren EULEX und DIFEX1 eingebaut und erprobt (Preprint SC 87-3). In diesem Zusammenhang wurden auch die Testrahmen für steife und nichtsteife Integratoren überarbeitet und weiterentwickelt.

Hierarchische Finite Elemente

Mit dem Programmpaket KASKADE startet das ZIB die Entwicklung einer neuen Finite-Element-Methode, aufbauend auf den von uns als zukunfts-trächtig eingeschätzten hierarchischen Basen von H. Yserentant. In Zusammenarbeit mit der Abteilung Numerik sowie dem ZIB-Fellow H. Yserentant wurde in der Abteilung Software mit der Entwicklung einer Produktionsversion in C begonnen. Die Datenstrukturen für die adaptive Triangulierung der Lösungsgebiete wurden in Kooperation mit P. Leinen (Universität Dortmund) erarbeitet.

Software-Informationssystem

Die Weitergabe von ZIB-Entwicklungen soll mittelfristig auch auf dem Wege über Methoden der technischen Kommunikation erfolgen:

Das hier geplante Informationssystem ist zu verstehen als *Elektronische Bibliothek*: Neben einem Katalogsaal (im Dialog) und einem Lesesaal (klassische Algorithmenbank) soll es eine Leih- beziehungsweise Kopier-Stelle (e-Mail, Filetransfer), Arbeitsräume für öffentlichen Erfahrungsaustausch (Conferencing) sowie einen *Rechensaal* (VAX VMS als Referenzsystem im Dialog) geben, in dem die dort "ausliegenden" Algorithmen mit eigenen Daten erprobt werden können. In der Nähe befindet sich das *Prüflabor* mit öffentlich bereitgestellten Test- und Prüfverfahren. Eine Fernleihe erschließt ausgewählte Algorithmen anderer Bibliotheken. Als Vorstufe wurde ein einfaches (klassisches) Informationssystem für Programme und Dokumente entwickelt. Im Berichtszeitraum wurde jedoch die Weitergabe von ZIB-Entwicklungen noch auf herkömmlichem Wege durchgeführt.

Software-Produktions- und -Transformations-System

Die numerischen Basis-Algorithmen des ZIB sollen softwaretechnisch so strukturiert werden, daß sie als elementare Bausteine auf verschiedenen DV-Systemen eingesetzt werden können. Im Vordergrund stehen dabei die folgenden Rechnerklassen:

- Vektor- und Parallelrechner (z.B. CRAY COS).
- Wissenschaftliche Universalrechner (z.B. IBM MVS).
- Wissenschaftliche Arbeitsplatzsysteme (VAX VMS bzw. SUN UNIX).
- Personal Computer (z.B. IBM MS-DOS).

Erfahrungsgemäß führt die Verwendung von FORTRAN zu einer Familie von leicht unterschiedlichen Varianten: Wo z.B. auf einem Universalrechner eine Vektor-Operation mittels einer DO-Schleife realisiert wird, ist auf einer CRAY vielleicht der Aufruf eines parallel arbeitenden Unterprogramms angebracht. Außerdem verwenden numerische Algorithmen oft maschinenabhängige Konstanten, die entsprechend angepaßt werden müssen.

In diesem Projekt wurde im Zusammenhang mit der Implementierung hochnichtlinearer Methoden ein sogenannter Abstrakter LOGO-Code für numerische Anwendungen entwickelt, in dem maschinelle Eigenheiten und Compiler-Spezialitäten eliminiert sind. Ein in diesem abstrakten Code formuliertes Verfahren steht der ursprünglichen mathematischen Formulierung des Verfahrens nahe. Varianten (Programme für unterschiedliche Computer und Computerumgebungen sowie verschiedene Arten von Dokumentationen) eines Algorithmus können - durch Software-Transformationen - automatisch aus einer einzigen Quelle erzeugt werden. Das Verfahren selbst ist in LOGO ablauffähig - damit interaktiv testbar - und funktional ("sauber") strukturiert.

Den Kern des Software-Produktions-Systems bildet ein am ZIB entwickeltes Software-Transformations-System, das interaktiv erweitert werden kann. Als Ziel der Softwaretransformationen sollen neben FORTRAN auch andere Programmiersprachen (z.B. PASCAL) einbezogen werden. Für die Verarbeitung des generierten \TeX -Inputs wurde ein spezieller Satz von \LaTeX -Makros erarbeitet.

3.5 Abteilung Systolik

Im Berichtszeitraum wurde die Abteilung zunächst versuchsweise auf der Basis von nur einem Mitarbeiter etabliert. Folgende Arbeitsgebiete sind zu nennen:

Aufbau einer Literatur-Datenbank zur Systolik

Das Programm verwaltet selbständig einen Ringsicherungsspeicher auf Disketten. Eintragen von Daten, Wartung der Datenbank und das Wiedererlangen von Daten erfolgt über Menüs. Die Suche kann nach Eintragsnummer, Sachgebiet, Autor, Co-Autoren, Titel, Literaturart (z.B. Buch, Kopie etc.), Volume, Erscheinungsjahr sowie über Schlüsselwörter erfolgen. Abstracts können eingetragen und am Bildschirm auch gezeigt werden. Die Datenbank ist auf die Bedürfnisse in der Abteilung Systolik abgestellt, indem bei Bedarf schnell und einfach (keinerlei Datenbank-Sprachen-Kenntnisse) nach Literatur für das Arbeitsgebiet gesucht werden kann. Derzeit sind ca. 780 Datensätze gespeichert. Das System wird weiter entwickelt und gepflegt.

Adaptive Romberg-Quadratur

Ein sequentieller adaptiver Algorithmus zur numerischen Integration (Romberg-Quadratur) wurde auf seine Systolisierungsmöglichkeiten hin untersucht. Es wurde eine Lösung erarbeitet, bei der sowohl statische als auch parametrisierbare Prozessorknoten verwendet werden. Der Kontrollfluß ist datengetrieben. Die einzelnen Knoten haben eine minimale funktionale Redundanz. Bei der gefundenen Lösung kann die Berechnung aller Funktionswerte aller Verfeinerungsstufen gleichzeitig erfolgen. Die Berechnung der Diagonalelemente im Extrapolations-Tableau erfolgt weiterhin sequentiell und adaptiv.

Grundlagenuntersuchungen

Es wurden die beiden prinzipiellen Möglichkeiten Realtime Hardware- und Software-Simulation untersucht: Für die Hardware-Simulation boten sich *Transputer* an, da mit ihnen parametrisierbare Prozessoren zur Verfügung standen, mit denen sich sowohl das Datenfluß-Konzept als auch das *message passing* auf Hardware-Ebene realisieren läßt. Die für den Transputer vorhandene HLL OCCAM enthält MIMD-Konstrukte, mit denen sich das parallele Verhalten des systolischen Integrations-Algorithmus leicht beschreiben läßt. Über sogenannte LINKS ist *synchrones message passing* auf Hardware-Ebene möglich. *Asynchrones message passing* sowie *multicast*

oder *broadcast* sind nicht direkt mit LINKS realisierbar. Mit einer Nur-Transputer-Lösung wären damit ein notwendiges *asynchrones message passing* sowie *1:m-Links* nicht möglich.

Für die Software-Simulation SUPRENUM-artiger Architekturen steht seit Anfang 1988 der SUPrenum SIMulator (SUSI) zur Verfügung. Mit ihm sind gitterartige ringförmige Architekturen und *asynchrones message passing* zu simulieren.

4. Bereich Anlagenbetrieb

Der Bereich Anlagenbetrieb des ZIB ist als Rechenzentrum für die Planung und den Betrieb aller Rechenanlagen des ZIB zuständig (siehe Seite 23). Als überregional genutztes Großgerät wird im ZIB ein Supercomputer CRAY X-MP/24 betrieben. Dieses Gerät steht im Rahmen des Norddeutschen Vektorrechnerverbundes den wissenschaftlichen Einrichtungen in Berlin, Niedersachsen und Schleswig-Holstein zur Verfügung.

Anfang 1987 wurde der damalige Supercomputer CRAY 1-M/1200 der Firma Cray Research Inc. außer Betrieb genommen und durch eine CRAY X-MP/24 (mehr als vierfache Leistung gegenüber der CRAY 1-M/1200) ersetzt. Der Grund für diese Maßnahme war weniger die seit der Inbetriebnahme (April 1984) beobachtete Überlastung des vorhandenen Systems als die Tatsache, daß die CRAY X-MP als Multiprozessorsystem mit größerem Speicher und reicherem Befehlsvorrat bereits in der im ZIB betriebenen Zweiprozessorversion als technische Vorbereitung auf künftige Superrechner mit vielen parallelen Prozessoren dienen kann.

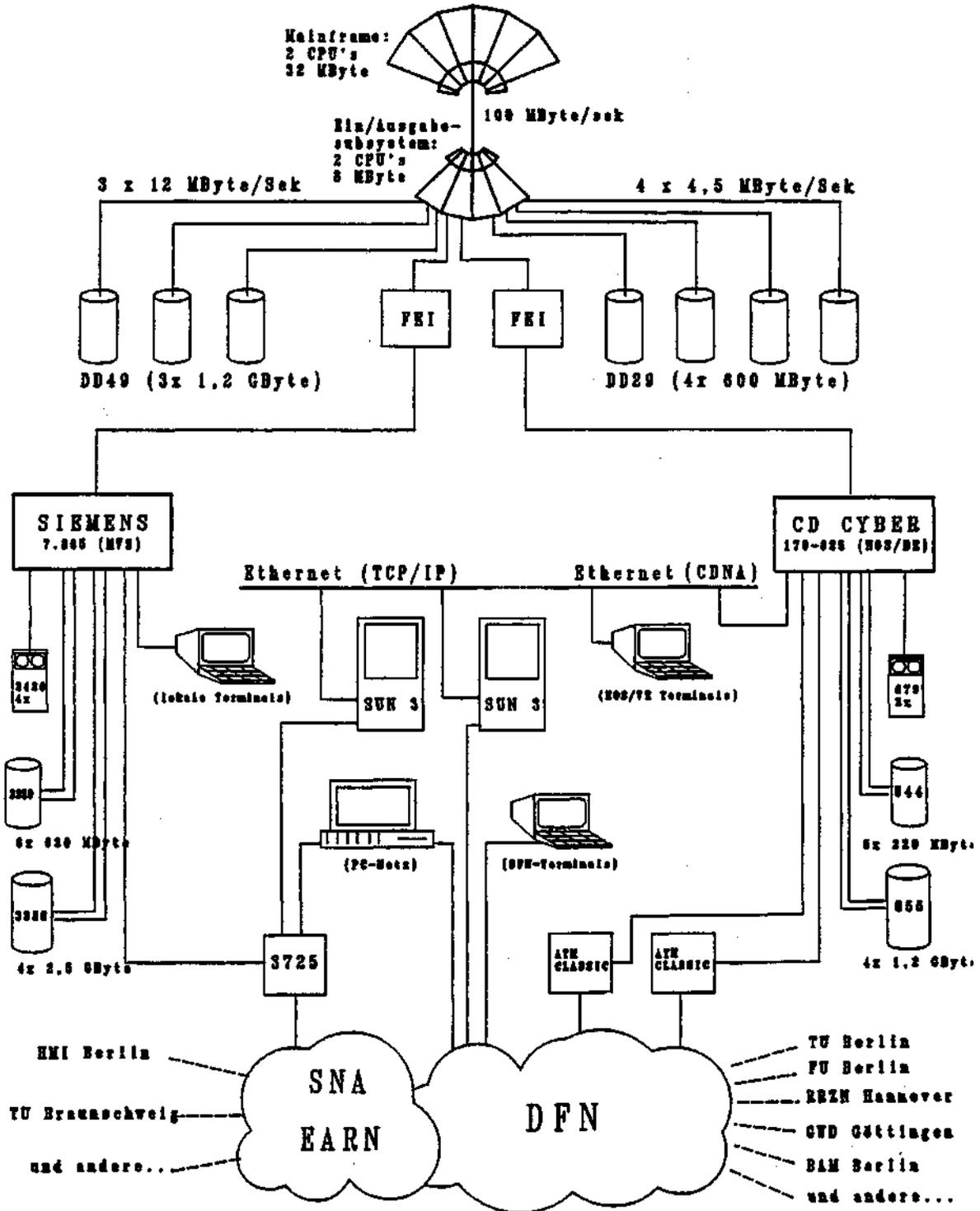
Entsprechend den anzubietenden Diensten lagen die Arbeitsschwerpunkte des Bereichs Anlagenbetrieb bei der Erschließung der neuen Maschine für Benutzer und der Verbesserung der Rechnernetze und Kommunikationsstrukturen. Gegen Jahresende begannen die Vorbereitungsarbeiten für die Nutzung des ab Anfang 1988 erwarteten Vektorrechners in Kiel von Berlin aus. Somit war der Berichtszeitraum das letzte Jahr, in dem das ZIB einziger Leistungsanbieter im Norddeutschen Vektorrechnerverbund war.

4.1 Nutzung des Supercomputers

Der neue Rechner wurde am 20. Januar 1987 für die allgemeine Nutzung freigegeben. Grundsätzlich wurden auf der neuen Anlage die gleichen Anwendungsgebiete bearbeitet wie auf der alten Anlage. Trotzdem ergaben sich erhebliche Verschiebungen zwischen den Fachgebieten als Folge des Zuwachses an CPU-Leistung und der vierfachen Arbeitsspeichergröße. Bei den Ingenieur Anwendungen, die fast durchweg einen besonders großen Arbeitsspeicher erfordern, war eine deutliche Verbesserung des Verhältnisses zwischen CPU-Nutzung und Ein/Ausgabeleistung zu beobachten. Insgesamt wurde – absolut betrachtet – 1987 mehr als doppelt soviel Rechenleistung für Ingenieur Anwendungen erbracht wie 1986. Der Eigenanteil des ZIB wurde 1987 überwiegend von der Abteilung Symbolik für Probleme der Computeralgebra in Anspruch genommen.

Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin
Rechnerkonfiguration

CRAY X-MP/24 (COS)



ZIB/Bereich Anlagenbetrieb/10.10.1987

Stand Oktober 1987

1987 wurden zwischen dem 20. Januar und dem 31. Dezember 13.843 Stunden CPU-Zeit an Benutzer abgegeben. Ein besseres Maß für die Inanspruchnahme der Maschine ist die sogenannte Systemzeit, die so definiert ist, daß bei vollständiger Inanspruchnahme aller Betriebsmittel die Anlage pro Stunde Uhrzeit eine Stunde Systemzeit abgibt. 1987 wurden vom 20. Januar bis zum Jahresende 5.359 Stunden Systemzeit an Benutzer abgegeben.

Während der ersten Betriebsmonate wurde der Betrieb durch einen selten auftretenden und daher schwierig zu diagnostizierenden sporadischen Fehler im Eingabe/Ausgabe-Subsystem insgesamt 41mal unterbrochen. Nach Behebung dieses Fehlers durch die Herstellerfirma arbeitete das Eingabe/Ausgabe-Subsystem ebenso stabil wie alle übrigen Systemkomponenten.

Nach Abzug aller Ausfallzeiten, der Zeit für vorbeugende Wartung und aller anderen Unterbrechungen des Benutzerbetriebes stand der Supercomputer 1987 nach seiner Inbetriebnahme 7.658 Stunden den Benutzern zur Verfügung (sogenannte Programmproduktionszeit). Bezogen auf diese Zeit beträgt die CPU-Auslastung über 90% und dürfte damit wegen der zusätzlich notwendigen Systemleistungen kaum zu steigern sein.

Die Systemzeit betrug hingegen nur 70% der Programmproduktionszeit. Das ist darauf zurückzuführen, daß die Benutzer während einer etwa halbjährigen Übergangszeit den größeren Arbeitsspeicher des Supercomputers nur nach und nach in Anspruch nahmen. Erst gegen Ende des Berichtszeitraums hatte sich das Jobprofil den technischen Möglichkeiten der Anlage weitgehend angepaßt.

Aufgrund des großen Auftragsstaus in Niedersachsen konnten die Benutzer aus dem Bereich dieses Partners von Anfang an alle verfügbare Rechnerleistung für ihre laufenden Projekte verwenden. So war seit Inbetriebnahme die neue Maschine rund um die Uhr gut ausgelastet. Allerdings ergaben sich hierdurch auch stärkere Abweichungen von den vereinbarten Jahreskontingenten als in den Vorjahren:

Partner	Systemzeit (Stunden)	Prozent der Gesamtkapazität tatsächlich	geplant
Freie Universität Berlin	1.722	32	30
Technische Universität Berlin	1.636	30	35
Land Niedersachsen	1.031	19	15
Land Schleswig-Holstein	875	16	15
Sonstige Benutzer inkl. ZIB	95	3	5

Im großen und ganzen wurden die Wartezeiten für größere Benutzerprogramme – mit Ausnahme der aus Niedersachsen kommenden Programm-

läufe – während des Berichtszeitraums von den Benutzern nicht beanstandet, sondern offenbar als sachgerecht empfunden.

Die Anlage wurde für insgesamt 384 wissenschaftliche Projekte in Anspruch genommen. 222 Projekte nahmen jeweils Leistungen von mehr als einer Systemstunde in Anspruch. Trotz der erheblich leistungsfähigeren Maschine war die Zahl der bearbeiteten Projekte 1987 etwas kleiner als 1986 (411). Dies beruht auf den Bemühungen des ZIB und seiner Partner, den Supercomputer möglichst nur dann einzusetzen, wenn die zu bearbeitenden Probleme das wirklich erfordern.

4.2 Organisation

Entsprechend der überregionalen Nutzung des Supercomputers wurde auch für den Betrieb eine überregionale Organisation gewählt: Für jeden der vier Partner ist durch Beschluß des Verwaltungsrates ein Anteil an dem Supercomputer festgelegt. Jeder Partner hat für seinen Bereich ein koordinierendes Rechenzentrum benannt, das den Anteil des Partners so verwaltet, als wäre dieser Anteil ein vollständiges eigenes DV-System des Partners. Die vier Partnerrechenzentren des ZIB sind:

für Niedersachsen:	Regionales Rechenzentrum für Niedersachsen (RRZN)
für Schleswig-Holstein:	Rechenzentrum der Christian-Albrechts-Universität Kiel
für die TU Berlin:	Zentraleinrichtung Rechenzentrum (ZRZ)
für die FU Berlin:	Zentraleinrichtung für Datenverarbeitung (ZEDAT)

Diese Partnerrechenzentren sind für alle Benutzerangelegenheiten, unter anderem Zulassung, Programmierberatung, technische Betreuung und auch Abrechnung, selbst verantwortlich. Das ZIB stellt eine technische Struktur zur Verfügung, die es ermöglicht, daß jeder Partner für seinen Rechneranteil die Benutzung weitgehend nach seinen eigenen Konventionen organisieren kann. Das ZIB unterstützt die Partner durch Bereitstellung der erforderlichen technischen Einrichtungen, durch Schaffung geeigneter technischer Unterlagen sowie durch Beratung und Weiterbildung des Personals in den Partnerrechenzentren. Darüber hinaus hat das ZIB jeweils vier Mitarbeiter für die Benutzerberatung vor Ort in die beiden Berliner Universitäten abgeordnet, um den sachgerechten Einsatz des Supercomputers zu fördern.

Diese Organisation hat sich weitgehend bewährt; sie ist darauf ausgelegt, daß künftig auch im Bereich der Partner Niedersachsen und Schleswig-Holstein Superrechner installiert werden, deren Leistung im Rahmen des Norddeutschen Vektorrechnerverbundes auch den Berliner wissenschaftlichen Einrichtungen zugänglich gemacht werden.

4.3 Arbeiten des Bereichs Anlagenbetrieb

Wenn auch ein Rechenzentrum in erster Linie Produktionsbetrieb ist und seine Arbeit sich hauptsächlich in der Produktionsstatistik niederschlägt, sollen doch die wichtigsten Arbeiten im folgenden zusammengefaßt werden:

- Für die Benutzer der neuen Maschine wurde ein Handbuch verfaßt (Technical Report TR 87-1), das alle technischen und organisatorischen Aspekte der Nutzung des Supercomputers, seiner Vorrechner und der angeschlossenen Rechnernetze zusammenfaßt. Zugleich wurde die On-Line Dokumentation, die jedem Benutzer an seinem Terminal (oder Arbeitsplatzrechner) zur Verfügung steht, weiter ergänzt und vereinheitlicht.
- Am 22. Juni 1987 wurde auf dem Öffentlichkeitstag des ZIB das Gerätekonzept des ZIB ausführlich dargestellt. Dieses Konzept wurde der Kommission für Rechenanlagen der Deutschen Forschungsgemeinschaft übermittelt und am 23. Oktober 1987 durch einen konkreten Beschaffungsantrag weiter spezifiziert. Die im folgenden geschilderten Arbeiten entsprechen den für 1987 im Gesamtkonzept für das Berichtsjahr vorgesehenen Ausbaustufen.
- In Zusammenarbeit mit der Zentraleinrichtung Datenverarbeitung der Freien Universität Berlin wurde für die auf dem Protokoll X.25 basierenden Rechnerverbindungen (darunter alle Verbindungen des ZIB im Rahmen des Deutschen Forschungsnetzes DFN) ein leistungsfähiger Datenpaketvermittlungsrechner der Firma DATUS ausgewählt, der gegen Ende des Berichtszeitraums beschafft werden konnte und die bis dahin benutzten verschiedenen kleineren und großenteils technisch veralteten Geräte ablöste. Hauptgründe für diese mit viel technischer Detailarbeit verbundene Maßnahme waren die unzureichende Leistung der vorhandenen Geräte und die Komplexität der Netzkonfiguration, die die Zuverlässigkeit gefährdete und die Bedienung des Gesamtsystems erschwerte. Mit dem neuen Gerät ist es möglich, überall dort, wo es erforderlich ist, Leitungen mit einer Übertragungsleistung von 64 Kilobit/Sekunde einzusetzen. Außerdem verfügt das

neue System über Netzüberwachungseinrichtungen, die dem Bedarf des ZIB entsprechen.

- Für den Vorrechner CDC CYBER 825 wurde das Betriebssystem NOS/VE den Gegebenheiten des ZIB angepaßt und im sogenannten DUAL-State-Betrieb zusätzlich zu dem bisher eingesetzten Betriebssystem NOS/BE zunächst nur für innerbetriebliche Zwecke freigegeben. Damit war zugleich die technische Basis für ein lokales Rechnernetz auf der Basis ETHERNET für diesen Bereich geschaffen. Die Betriebserfahrungen, ergänzt durch eingehende Diskussionen mit dem Hersteller, ergaben, daß die Leistung der CYBER 825 nicht ausreicht, um beide Betriebssysteme auf derselben Maschine den Benutzern anzubieten. Da die Maschine hierfür auch nicht hinreichend erweitert werden kann und zur Zeit das ZIB wegen der Anlagenausstattungen der Partner auch nicht auf eines der Betriebssysteme verzichten kann, wurde die Beschaffung einer gesonderten Maschine CYBER 930 unter NOS/VE, insbesondere zum Betrieb schneller Netzverbindungen zu den Partnern, bei der DFG beantragt.
- Für den MVS-Vorrechner SIEMENS 7.865 wurde das Betriebssystem von Grund auf neu eingerichtet und auf den neuesten Stand gebracht. Diese Maßnahme dient vor allem der Vorbereitung größerer Änderungen, die 1988 durch den geplanten Anschluß auch der MVS-Anlage an schnelle lokale Netze (und ihre überregionalen Erweiterungen) erforderlich werden. Ein weiterer Arbeitsschwerpunkt im Bereich der MVS-Anlage war die anlaufende Überführung des Europäischen Rechnernetzes EARN aus der Regie der Firma IBM in die des Deutschen Forschungsnetzes DFN. Das ZIB als bisheriger Betreiber des Berliner EARN-Knotens hat dabei die Koordinierung im Raum Berlin übernommen.
- 1987 wurden die ersten UNIX-Arbeitsplatzrechner (*Workstations*) beschafft und für die Abteilung Symbolik in Betrieb genommen. Es handelt sich um Rechner der Firma SUN, die sich als Arbeitsplatzrechner im direkten Zusammenspiel mit CRAY-Supercomputern weltweit bewährt haben. Untereinander sind diese Rechner mit ETHERNET verbunden. Für alle an ETHERNET angeschlossenen Rechner sind diverse höhere Kommunikationsprotokolle zugelassen. 1988 sollen auf dieser technischen Basis schnellere Datenübertragungsmöglichkeiten zu den Partnern entwickelt werden.
- Gegen Ende des Berichtszeitraums konnte aufgrund der gewonnenen Betriebserfahrungen die Geräteplanung hinsichtlich einiger wichtiger Details modifiziert werden. So wurde klar, daß große Sorgfalt (und

mehr finanzieller Aufwand als bisher geplant) in die Bildung von Teilnetzen des lokalen ZIB-Netzes investiert werden muß. Durch die Bildung von Teilnetzen kann die Gesamtleistung eines Netzes erheblich gesteigert werden. Insbesondere kann bei der Übertragung großer Datenmengen mit hohen Übertragungsraten innerhalb eines Teilnetzes die Beeinträchtigung anderer Netzteilnehmer verhindert werden.

5. Bereich Wissenschaftlich-Technische Dienste

Mit der neuen Organisationsstruktur wurden die Bibliothek und das Elektroniklabor zu einem Bereich zusammengefaßt.

5.1 Bibliothek, Abteilung Reportwesen

Die aus den Vorgängereinrichtungen vorhandenen Buch- und Zeitschriftenbestände wurden so aufbereitet, daß sie als Grundstock einer den gesteigerten wissenschaftlichen Ansprüchen genügenden Bibliothek dienen können. Beschaffung, Katalogisierung und Aufstellung wurden, soweit erforderlich, entsprechend neu organisiert. Mit besonderem Nachdruck wurde darauf hingearbeitet, weitere Arbeitsvorgänge in das vom GRZ übernommene rechnergestützte Bibliotheksverwaltungssystem zu integrieren. Neu eingerichtet wurde die Abteilung Reportwesen, von der die Herausgabe der ZIB-eigenen Preprints und Technical Reports betreut wird. Die im Austausch erhaltenen Veröffentlichungen anderer werden systematisch aufbereitet.

5.2 Elektroniklabor

Die Dienstleistungen des Elektroniklabors umfassen die technische Unterstützung aller Bereiche des ZIB. Nach der Umstrukturierung waren eine Fülle neuer Anschlüsse und Datenverbindungen herzustellen. Neben diesen Infrastrukturaufgaben lag das Schwergewicht der Laboraufgaben in der Unterstützung bei der Erprobung und Installation einer DATUS-Datenvermittlungsanlage. Dem Anlagenbetrieb steht das Labor mit Beratung und Reparaturleistungen zur Verfügung. Im Berichtsjahr wurde eine Klimaüberwachungseinrichtung (KUE) entwickelt: Diese Anlage fasst die Melde-, Überwachungs- und Meßeinrichtungen zusammen und stellt deren Daten auf einem Sichtgerätebildschirm übersichtlich dar. Da die Klimadaten in der KUE gespeichert werden, kann der Klimatechniker deren Verlauf durch Speicherabfrage über einen längeren Zeitraum zurückverfolgen. Durch diese Speicherung erhält er auch erstmals die Möglichkeit, Fehlalarme zu identifizieren. Überdies kann über einen Akustikkoppler die Ursache des Alarms durch Fernabfrage festgestellt werden. Für den Aufbau der Einrichtung wurde das im Labor entwickelte Motorola M6809-Mikroprozessorsystem verwendet.

Für den Fall, daß der von der Technischen Universität Berlin zu berufene Vizepräsident des ZIB auf dem Gebiet Computer Science tätig wird, besteht die Chance, das Elektroniklabor in das dann aufzubauende Forschungs- und Entwicklungsprogramm einzubeziehen.

6. Ausstattung

Einnahmen und Ausgaben des Konrad-Zuse-Zentrums werden in einem besonderen Wirtschaftsplan nachgewiesen. Das ZIB führt eine kaufmännische Buchhaltung. Dienstherr und Arbeitsgeber 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 87 Angestelltenstellen nach Durchschnittssätzen insgesamt 5.955 TDM Personalmittel ausgewiesen.

6.1 Personal

Insgesamt entwickelte sich der Personalstand wie folgt:

	1.1.87	31.12.87
Leitung	4	4
planm. wiss. Personal	30	30
Drittmittelpersonal	-	1
Programmierer und DV-Personal	33	33
Technisches Personal	3	3
Verwaltungspersonal	9,5	10,5
Studentische Hilfskräfte	4	4
Insgesamt	83,5	85,5

Auch im Berichtsjahr bestand das Problem, daß insbesondere für die Mitarbeit im Bereich Scientific Computing nicht ausreichend qualifizierte und spezialisierte Bewerber vorhanden sind. Die Konkurrenz mit Arbeitgebern außerhalb des öffentlichen Dienstes wird zusätzlich durch die Grundabsenkung der Eingangsvergütung verschärft.

6.2 Jahresabschluß 1987

Ohne die Gehälter und Dienstbezüge der planmäßigen Mitarbeiter beliefen sich die Aufwendungen im Berichtsjahr auf 12.525 TDM. Davon entfielen auf Investitionen 6.455 TDM, was in erster Linie auf die Inbetriebnahme des Supercomputers CRAY X-MP im Januar zurückzuführen ist. Im übrigen unterliegen die Investitionen mit Gesamtkosten über 150.000 DM der Begutachtung durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft und

den Wissenschaftsrat, was dazu geführt hat, daß die dringend erforderliche Ausstattung – insbesondere mit *workstations* – auf 1988 verschoben werden mußte. Allerdings konnte hier aus Drittmitteln ein erster Schritt getan werden. Der Zuschuß des Landes Berlin belief sich insgesamt auf 11.958 TDM. Die eigenen Erträge in Höhe von 567 TDM sind im wesentlichen auf drei Drittmittelprojekte (484 TDM) zurückzuführen:

- Kooperation mit Cray Research GmbH auf dem Gebiet des Parallelrechnens und damit verbundener Anwendungen.
Drittmittel insgesamt: 200.000 DM
- Entwicklung informationstechnischer Werkzeuge für die Museumsdokumentation.
Laufzeit: 1.1.1987 bis 31.12.1992
Drittmittel insgesamt: ca. 600.000 DM
1987: 85.000 DM
- TECFLAM-Lösungsmethoden für große Gleichungssysteme zur Simulation von Verbrennungsprozessen.
Laufzeit: 1.10.1987 bis 31.3.1990
Drittmittel insgesamt: 538.500 DM
davon: 312.000 DM 2 Stellen Vgr. Ib BAT
46.500 DM Sachmittel
180.000 DM Investitionsmittel
1987: 201.500 DM

Die Bilanzsumme des Jahres 1987 beläuft sich auf 10.437 TDM. Der Jahresabschluß mit Bilanz sowie Gewinn- und Verlustrechnung (siehe Anhang) wird im Auftrag des Rechnungshofes von Berlin von der Treuarbeit AG geprüft.

7. Veröffentlichungen, Vorträge, Produkte

7.1 Preprints

SC 86-1 P. Deuffhard; U. Nowak.

Efficient Numerical Simulation and Identification of Large Chemical Reaction Systems.

Abstract: New, highly efficient techniques for the numerical simulation and parameter identification of large chemical reaction systems are surveyed. The survey particularly addresses to chemists, which are understood to be potential users of the distributed software packages. These packages are written in the form of interactive dialogue systems - thus enabling chemists to concentrate on the chemistry of their problem. Large scale examples from chemical research environments are included.

SC 86-2 H. Melenk; W. Neun.

Portable Standard LISP for CRAY X-MP Computers.

Abstract: Portable Standard LISP (PSL) is a portable implementation of the programming language LISP constructed at the University of Utah. The version 3.4 of PSL was implemented for CRAY X-MP computers by Konrad-Zuse-Zentrum Berlin; this implementation is based to an important part on the earlier implementation of PSL 3.2 at the University of Utah, Los Alamos National Laboratories and Cray Research Inc. at Mendota Heights. During the work on implementing PSL the language LISP was investigated for areas which can be supported by vector hardware. One area was found in the COMMON LISP sequence functions and some typical application areas of LISP programming can be improved by vector processing too. A model for the implementation of vector instructions in LISP was developed. For arithmetic an experimental vectorizing extent of the PSL compiler was constructed. With this means full vector hardware capacity can become available for LISP applications.

SC 87-1 J. Anderson; W. Galway; R. Kessler; H. Melenk; W. Neun.

The Implementation and Optimization of Portable Standard LISP for the CRAY.

Abstract: Portable Standard LISP (PSL), a dialect of LISP developed at the University of Utah, has been implemented and optimized for the CRAY 1 and CRAY X-MP supercomputers. This version uses

a new implementation technique that permits a step-by-step development of the PSL kernel. The initial CRAY version was acceptable, although the execution speed of the PSL was not as fast as had been anticipated. CRAY-specific optimizations were undertaken that in some cases provided a ten-fold speed improvement, resulting in a fast LISP implementation.

SC 87-2 Randolph E. Bank; Todd F. Dupont; Harry Yserentant.
The Hierarchical Basis Multigrid Method.

Abstract: We derive and analyse the hierarchical basis-multigrid method for solving discretizations of self-adjoint, elliptic boundary value problems using piecewise linear triangular finite elements. The method is analyzed as a block symmetric Gauß-Seidel iteration with inner iterations, but it is strongly related to 2-level methods, to the standard multigrid V-cycle, and to earlier Jacobi-like hierarchical basis methods. The method is very robust, and has a nearly optimal convergence rate and work estimate. It is especially well suited to difficult problems with rough solutions, discretized using highly nonuniform, adaptively refined meshes.

SC 87-3 Peter Deuffhard.
Uniqueness Theorems for Stiff ODE Initial Value Problems.

Abstract: The paper presents a new uniqueness theory for ODE initial value problems, derived in view of numerical stiff integration. The theory supplies stepsize bounds for stiff integrators that can easily be estimated in extrapolation methods. The additional devices lead to a significant speed-up of computations - in particular in combustion PDE problems.

SC 87-4 Rainer Buhtz.
CGM-Concepts and their Realization.

Abstract: Requirements and Design Concepts. Common Graphics Manager (CGM) is the name given to the implementation of GKS, Level 2b, developed at the Free University of Berlin (1,6). This paper is a survey over the *early GKS implementation phase* 1980-1982. Work commenced in February 1980. At the outset some basic design decisions were necessary on account of the special scientific computer environment in Berlin, because the *Berlin GKS* was intended to be a common graphical software package for all the machines (4).

SC 87-5 Peter Deuffhard.
A Note on Extrapolation Methods for Second Order ODE Systems.

Abstract: A slight modification of the extended Stoermer discretization for non-self-adjoint second order ODE systems is derived on the basis of a simple stability analysis. This discretization easily extends to implicit ODE systems, which are known to arise e.g. in mechanical engineering. In addition, a special variant of the semi-implicit Euler discretization is proposed, which essentially treats the state variables explicitly, but their derivatives implicitly. Numerical tests over critical parameter values of the van der Pol oscillator illustrate the domain of efficiency of the suggested discretization.

SC 87-6 Harry Yserentant.

Preconditioning Indefinite Discretization Matrices.

Abstract: The finite element discretization of many elliptic boundary value problems leads to linear systems with positive definite and symmetric coefficient matrices. Many efficient preconditioners are known for these systems. We show that these preconditioning matrices can be used also for the linear systems arising from boundary value problems which are potentially indefinite due to lower order terms in the partial differential equation. Our main tool is a careful algebraic analysis of the condition numbers and the spectra of perturbed matrices which are preconditioned by the same matrices as in the unperturbed case.

7.2 Technical Reports

TR 86-1 H.J. Schuster.

Tätigkeitsbericht 1985

TR 87-1 Hubert Busch; Uwe Pöhle; Wolfgang Stech.

CRAY-Handbuch. Einführung in die Benutzung der CRAY.

Abstract: Das vorliegende Handbuch wendet sich an alle Benutzer des für den Norddeutschen Vektorrechnerverbund im ZIB installierten Rechners CRAY X-MP/24. Ein großer Teil der Darstellung ist der Optimierung von Programmen gewidmet, die in FORTRAN geschrieben sind. Gerade weil die CRAY einer der schnellsten Rechner der Welt ist, wird jeder Benutzer früher oder später selbst auf dieses Thema stoßen, denn die Maschine ist vornehmlich für Probleme bestimmt, die für die meisten anderen Rechner zu komplex sind. Maschinen der CRAY-Leistungsklasse beziehen einen erheblichen Teil ihrer Geschwindigkeit aus der parallelen Arbeit vieler Komponenten. Programme, die die jeweilige Architektur der Maschine berücksichtigen, können um Größenordnungen schneller (also wirtschaftlicher) sein als

Programme, deren Autor beim Schreiben einen sogenannten "klassischen" Rechner vor seinem geistigen Auge hatte. Daher wird auch der technische Aufbau der CRAY X-MP im Handbuch erläutert. Weitere Teile des Handbuches beschäftigen sich mit den Vorrechnern und dem Rechnernetz.

TR 87-2 Herbert Melenk; Winfried Neun.

Portable Standard LISP Implementation for CRAY X-MP Computers. Release of PSL 3.4 for COS.

Abstract: Portable Standard LISP (PSL) is a portable implementation of the programming language LISP constructed at the University of Utah. The version 3.4 of PSL was implemented for CRAY X-MP computers by Konrad Zuse-Zentrum Berlin; this implementation is based to an important part on the earlier implementation of PSL 3.2 at Salt Lake City, Los Alamos and Mendota Heights.

TR 87-3 Herbert Melenk; Winfried Neun.

Portable Common LISP Subset Implementation for CRAY X-MP Computers.

Abstract: This document describes the installation procedure and maintenance for the Portable Common LISP Subset (PCLS) developed at the University of Utah.

TR 87-4 Herbert Melenk; Winfried Neun.

REDUCE Installation Guide for CRAY 1 / X-MP Systems Running COS Version 3.2.

Abstract: This guide describes the CRAY/COS REDUCE distribution tape and the procedures for installing, testing and maintaining REDUCE on a CRAY 1 or CRAY X-MP running COS. 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 87-5 Herbert Melenk; Winfried Neun.

REDUCE Users Guide for the CRAY 1 / X-MP Series Running COS. Version 3.2.

Abstract: This document describes operating procedures for running REDUCE specific to the CRAY 1 and CRAY X-MP computers running the CRAY Operating System (COS). 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 87-6 Rainer Buhtz; Jens Langendorf; Olaf Paetsch; Danuta Anna Buhtz.

ZUGRIFF - Eine vereinheitlichte Datenspezifikation für graphische Darstellungen und ihre graphische Aufbereitung.

Abstract: ZUGRIFF ist eine Dateischnittstelle für Graphikausgabe speziell numerischer Anwenderprogramme. Dieser Report beschreibt den Leistungsumfang der Spezifikation sowie die interaktive graphische Verarbeitung von ZUGRIFF-Dateien.

TR 87-7 J. Langendorf, O. Paetsch.

GRAZIL (Graphical ZIB Language).

Abstract: GRAZIL ist ein interaktives Programmpaket zur graphischen Darstellung von zwei-dimensionalen Kurvenverläufen. Dem Benutzer stehen zahlreiche Kommandos zum Gestalten des Layouts der Zeichnung zur Verfügung. Die Eingabedaten müssen dem ZUGRIFF-Konzept genügen, wodurch die genaue Struktur der Daten erst zur Laufzeit bekannt sein muß und somit eine hohe Flexibilität und eine große Bandbreite der Einsatzmöglichkeiten erreicht wird. GRAZIL wurde mit der graphischen Grundsoftware BIZEPS2 und GKS entwickelt. Dadurch kann ein breites Rechner- und Ausgabegerätespektrum genutzt werden.

7.3 Veröffentlichungen

1. J.W. Anderson, W.F. Galway, R.R. Kessler, H. Melenk, W. Neun:
Implementing and Optimizing LISP for the CRAY.
IEEE Software, Vol. 4 (4), July 1987
2. R. Buhtz:
CGM - Concepts and their Realization.
In: P.R. Bono, I. Herman (Eds.), GKS Theory and Practice,
Eurographics Seminars, Springer 1987
3. P. Deuffhard, U. Nowak:
Efficient Numerical Simulation and Identification of Large Chemical Reaction Systems.
Berichte Deutsche Bunsen-Gesellschaft 90 (1986), 940-946
4. P. Deuffhard, B. Fiedler, P. Kunkel:
Efficient Numerical Pathfollowing Beyond Critical Points.
SIAM J. Numer. Anal. 24 (1987), 912-927

5. P. Deuffhard, B. Fiedler, P. Kunkel:
Numerical Pathfollowing Beyond Critical Points in ODE Models.
In: Deuffhard/Engquist (eds.): Large Scale Scientific Computing. Series "Progress in Scientific Computing", Birkhaeuser/Boston (1987), 97-113
6. P. Deuffhard, U. Nowak:
Extrapolation Integrators for Quasilinear Implicit ODEs.
In: Deuffhard/Engquist (eds.): Large Scale Scientific Computing. Series "Progress in Scientific Computing", Birkhaeuser/Boston (1987), 37-50
7. P. Deuffhard, E. Hairer, J. Zugck:
One-Step and Extrapolation Methods for Differential-Algebraic Systems.
Numer. Math. 51, 501-516 (1987)
8. P. Deuffhard, B. Engquist (ed.):
Large Scale Scientific Computing.
Proc. Oberwolfach meeting, July 14-20 (1985).
Birkhaeuser/Boston, Series "Progress in Scientific Computing", Vol. 7 (1987)
9. I. Duff, U. Nowak:
On Sparse Solvers in a Stiff Integrator of Extrapolation Type.
IMA J. Numer. Anal. 7 (1987), 391-405

7.4 Vorträge

H. BUSCH

2.10.1986

Why and How to Schedule the CRAY Input Queue from a Front End Computer.

Herbst-Tagung der CRAY USER GROUP, Garmisch-Partenkirchen

22.9.1987

Kurzer Überblick über das Rechnerkonzept sowie über die Rechnerausstattung des ZIB.

DMV-Tagung, Berlin

P. DEUFLHARD

5.-11.10.1986

DMV-Seminar *Numerische Behandlung steifer Differentialgleichungen*,
gemeinsam mit E. Hairer und G. Wanner
Schloß Mickeln, Düsseldorf

4.11.1986

Effiziente numerische Simulation und Identifikation großer chemischer Reaktionsysteme.

Bayer AG, Leverkusen

19.12.1986

Effiziente Berechnung von Verzweigungsdiagrammen.

Kolloquium, Universität Innsbruck

22.6.1987

Das Wissenschaftliche Konzept des Konrad-Zuse-Zentrums.

Öffentlichkeitstag des ZIB, Kongreßhalle Berlin

29.6.-3.7.1987

Minisymposium *Numerical Solution of Differential-Algebraic Equations* und
Vortrag *Extrapolation methods for Differential-Algebraic Equations.*

ICIAM 1987, First International Conference on Industrial and Applied
Mathematics, Paris

14.7.1987

*Neuere Ergebnisse bei Extrapolationsverfahren mit Blick auf Ingenieur-
wendungen.*

Kolloquium, Institut für Mechanik, Universität Stuttgart

16.-22.8.1987

Uniqueness Theorems for Stiff ODE Initial Value Problems.

Tagung *Numerische Probleme für Anfangs- und Anfangsrandwertprobleme.*
Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach

5.11.1987

Entwicklung mathematischer Software für Verbrennungsprozesse.

TECFLAM-Seminar, Technische Universität Karlsruhe

27.11.1987

Numerical Modelling of Polymer Reaction Systems.

IUPAC Working Party "Modelling of free radical polymerization kinetics
and processing" DECHEMA, Frankfurt

2.12.1987

Extrapolationsmethoden für instationäre Flammen.

Kolloquium, Max-Planck-Institut für Strömungsforschung, Göttingen

J. GOTTSCHESKI

6.11.1986

Erfahrungen im Umgang mit Vektorrechnern.

Universität Kaiserslautern

22.6.1987

Das Rechnerkonzept des Konrad-Zuse-Zentrums.

Öffentlichkeitstag des ZIB, Kongreßhalle Berlin

H. MELENK

1.10.86

Usage of Vector Processors for LISP Processing.

Herbst-Tagung der CRAY USER GROUP, Garmisch-Partenkirchen

W. NEUN

1.10.1986

*Implementation of Portable Standard LISP for CRAY X-MP-Computers
Running UNICOS.*

Herbst-Tagung der CRAY USER GROUP, Garmisch-Partenkirchen

U. NOWAK

9.-11.3.1987

*Static and Dynamic Regridding in Extrapolation Integrators for Reaction-
Diffusion Systems.*

SIAM Conference on Numerical Combustion, San Francisco

9.-11.3.1987

Large Scale Simulation and Parameter Identification in Chemical Kinetics.

SIAM Conference on Numerical Combustion, San Francisco

H. BUSCH, U. PÖHLE

7.1.1987

Besonderheiten der CRAY X-MP.

Technische Universität Berlin, ZRZ Colloquium

H. BUSCH, W. VORTISCH

27.1.1987

Besonderheiten der CRAY X-MP.

Freie Universität Berlin, ZEDAT Colloquium

19.2.1987

Nutzung der CRAY X-MP des ZIB mit Besonderheiten für Benutzer aus Schleswig-Holstein.

Universität Kiel

11.3.1987

Nutzung der CRAY X-MP des ZIB mit Besonderheiten für Benutzer aus der TU Braunschweig.

Technische Universität Braunschweig

7.5 Produkte

PSL

Portable Standard LISP wurde vom ZIB für Rechner der Typen CRAY 1 und CRAY X-MP 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 und CRAY X-MP unter COS und UNICOS angepasst und wird seit Mitte 1987 vom ZIB weltweit für diese Rechner vertrieben. Ankündigung in: SIGSAM Bulletin, Vol. 21, No 2, May 1987.

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.

7.6 Gastvorträge

12.1.1987

Dr. Christoph Börgers, University of California at Berkeley
Numerische Lösung elliptischer Randwertprobleme auf unregelmäßigen Gebieten in der Ebene durch Einbettung in ein Rechteck.

20.1.1987

Prof. Dr. Ekkehard Sachs, Universität Trier
Konvergenzsätze für quasi-Newton-Methoden im Funktionenraum.

29.1.1987

Prof. Michael Möller, Fernuniversität Hagen
Über die Konstruktion von Gröbner-Basen.

10.3.1987

Multitasking - insbesondere auf CRAY X-MP-Systemen

Dr. Wilfried Oed, Cray Research GmbH
Konzepte des Multitasking auf CRAY X-MP-Systemen.

Wolfgang Nagel, KFA Jülich

Multitasking bei Programmsystemen aus der linearen Algebra.

Bernd Goretzki, FUB, Institut für Meteorologie

Multitasking mit einem großen Anwendungssystem.

Dr. Hartmut Schwandt, TUB, Fachbereich Mathematik

Multitasking in der numerischen Mathematik.

26.3.1987

Prof. Randolph Bank, University of California at San Diego
Parameter Dependent Elliptic Boundary Value Problems.

23.4.1987

Prof. Dr. Jürgen Warnatz, Universität Heidelberg

Numerische Berechnung von reaktiven Strömungen und Anwendungen.

29.4.1987

Prof. Olof Widlund, New York University

Iterative Substructuring for Elliptic Problems on Regions Partitioned into Many Substructures.

12.5.1987

Dr. Hermann Luttermann

Workshop über FORTRAN 8X.

21.5.1987

FORTRAN 8X und CFT77.

Karen Spackman, Cray Research, Inc.

CFT77 - Release 1.3 and Plans for Release 2.0.

Richard Hendrickson, Cray Research, Inc.

FORTRAN 8X - Present Status, Major Features and Plans at CRAY.

9.6.1987

Dr. Richard Jenks, IBM T.J. Watson Research Center, Yorktown Heights
*SCRATCHPAD II: A Computer Algebra Language and System Based on
Abstract Datatypes.*

22.6.1987 - Öffentlichkeitstag des ZIB

Dr. Hans-Georg Bock, Bonn

Computer-Optimierung in Robotik und Fahrzeugtechnik.

Dr. Anthony C. Hearn, The Rand Corporation, Santa Monica

Future Trends in Computer Algebra.

Dr. Ilse Ipsen, Yale

Neuere Entwicklungen bei systolischen Algorithmen.

Prof. Dr. Michael Möller, Hagen

Gröbner-Basen in der Computeralgebra.

Prof. Dr. Werner C. Rheinboldt, Pittsburgh

Entwicklungen und Probleme im Scientific Computing.

Prof. Dr. Harry Yserentant, Dortmund

Hierarchische Finite Elemente.

6.7.1987

Prof. Tom Manteuffel, University of Colorado at Denver

On the Equivalence of Uniformly Elliptic Operators.

8.7.1987

Prof. William C. Gear, University of Illinois at Urbana-Champaign

Index Reduction for Differential Algebraic Equations.

16.7.1987

Prof. Uri Ascher, University of British Columbia, Vancouver

Conditioning of the Semiconductor Device Equations.

22.10.1987

Dr. Walter Zulehner, Universität Linz

*Homotopiemethoden zur Bestimmung aller isolierten Lösungen polynomi-
aler Gleichungssysteme.*

27.10.1987

Dr.-Ing. Thomas Scharnhorst, Volkswagen AG Wolfsburg
Supercomputer-Simulation in der Kfz-Industrie. Beispiel: Fahrzeugcrash.

24.11.1987

Prof. Dr. Wolfgang Hackbusch, Universität Kiel
Robuste Mehrgittermethoden.

8.12.1987

Dr. Bernold Fiedler, Universität Heidelberg
Homokline Verzweigungen.

8. Anhang

Jahresabschluß 1987

Gesetz über das Zentrum für Informationstechnik

Konrad-Zuse-Zentrum für
Informationstechnik Berlin

Bilanz zum 31. Dezember 1987

Vergleichszahlen des Vorjahres in ()

Aktiva	DM	DM	DM	TDM		DM	DM	DM	TDM	Passiva
ANLAGEVERMÖGEN										
<u>Sachanlagen</u>										
EDV-Anlagen			9.458.171,98	(1.399,1)				9.848.953,46	(5.784,9)	
Betriebs- und Geschäftsausstattung			390.781,48	(382,3)						
Anlagen im Bau und Anzahlungen auf Anlagen			---	(4.003,4)				65.000,00	(251,0)	
			9.848.953,46							
UNLAUFVERMÖGEN										
<u>Forderungen und sonstige Vermögensgegenstände</u>										
Forderungen aus L/L		2.731,30		(51,0)						(35,1)
davon mit einer Restlaufzeit von mehr als einem Jahr	---			(---)		522.084,76				
Sonstige Vermögensgegenstände										
Ausgleichsansprüche an die öffentliche Hand aus laufenden Geschäften		47.738,72		(---)			190,77			(484,8)
Andere sonstige Vermögensgegenstände		7.753,48		(2,1)			942,20			(151,3)
<u>Guthaben bei Banken/Kassenbestände</u>		529.994,23		(869,2)						
			588.217,73							
			10.437.171,19	(6.707,2)						
								523.217,73		
								10.437.171,19	(6.707,2)	

Konrad-Zuse-Zentrum für
Informationstechnik Berlin (ZIB)

Gewinn- und Verlustrechnung
für die Zeit vom 1. Januar bis 31. Dezember 1987

Vergleichszahlen des Vorjahres in ()

	DM	DM	TDM
Erträge aus Zuschüssen			
- Land Berlin	11.957.572,61		(10.464,0)
- andere Zuschußgeber	<u>409.309,23</u>	12.366.881,84	(—)
Erlöse aus Forschung und Entwicklung	74.561,40		(230,9)
Erlöse aus Dienstleistungen des Rechenzentrums	25.079,94		(81,4)
Sonstige betriebliche Erträge	<u>58.203,32</u>	<u>157.844,66</u>	<u>(103,6)</u>
		12.524.726,50	(10.879,9)
Zuweisungen zu den Sonderposten zum Anlagevermögen		<u>6.455.296,74</u>	<u>(5.226,6)</u>
		6.069.429,76	(5.653,3)
Aufwendungen für Energiebezug		579.050,82	(515,0)
Personalaufwand - Löhne und Gehälter		43.562,60	(45,9)
Abschreibungen auf Sachanlagen	2.390.809,55		(181,0)
Erträge aus der Auflösung von Sonderposten	2.390.809,55	<u>—</u>	<u>(181,0)</u>
		5.446.816,34	(5.092,4)
Sonstige betriebliche Aufwendungen			
Sachkosten der Forschung und des Rechenzentrums			
Verbrauchsmaterial	83.972,74		(63,7)
Literatur	73.427,96		(26,9)
Post- und Fernmeldegebühren	97.664,15		(130,9)
Mieten	723.708,98		(694,3)
Gebühren für Software	676.029,51		(528,6)
Instandhaltungen	2.683.634,96		(2.384,1)
Reisekosten	52.682,89		(48,7)
Repräsentationen	13.530,48		(—)
Vergütung an Betriebsfremde und angelernte Personalkosten	54.896,49		(222,6)
Übrige sonstige Aufwendungen	<u>42.780,09</u>	<u>4.502.328,25</u>	<u>(29,5)</u>
		944.488,09	(962,9)
Sachkosten der allgemeinen Verwaltung			
Geschäftsbedarf	18.280,53		(16,2)
Literatur	2.055,11		(1,9)
Post- und Fernmeldegebühren	25.285,17		(57,4)
Mieten	678.718,05		(607,0)
Instandhaltungen	182.749,32		(221,0)
Reisekosten	1.947,78		(1,4)
Repräsentationen	604,17		(0,8)
übrige sonstige Aufwendungen	<u>34.847,96</u>	<u>944.488,09</u>	<u>(57,2)</u>
Ergebnis der ordentlichen Geschäftstätigkeit/Jahresergebnis:		<u>0,00</u>	<u>(0,00)</u>

Anhang zum Jahresabschluß 1987

Der vorliegende Jahresabschluß 1987 wurde auf der Grundlage des Bilanzrichtliniengesetzes aufgestellt. Der Aufbau der Bilanz sowie der Gewinn- und Verlustrechnung ist an eine Gliederung für Großforschungseinrichtungen angelehnt. Die Bewertung des Anlagevermögens erfolgt auf der Basis der Anschaffungskosten. Die Abschreibungen für Abnutzung werden linear, in der Regel unter Zugrundelegung einer Nutzungsdauer von 5 Jahren, vorgenommen. Das GWG-Anlagevermögen wird im Jahr der Anschaffung vollständig abgeschrieben. Der auf der folgenden Seite dargestellte Anlagevermögenspiegel gibt Auskunft über die Entwicklung der Sachanlagen im Berichtsjahr.

Mit Ausnahme der studentischen Hilfskräfte beschäftigt das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin keine Mitarbeiter. Dienstherr und Arbeitgeber für die beim Zentrum tätigen Mitarbeiter ist das Land Berlin. Personalkosten werden dem Zentrum nur für außerplanmäßige Mitarbeiter, die für Entwicklungsaufträge Dritter tätig sind, angelastet. Insgesamt sind für das Zentrum im Stellenplan des Senators für Wissenschaft und Forschung 87 Stellen für Angestellte und 7 Stellen für Beamte ausgewiesen, von denen zum Jahresende 74,5 Stellen für Angestellte und 6 Stellen für Beamte besetzt waren. Die vorhandenen Stellen gliederten sich wie folgt:

	<u>1987</u>	<u>1986</u>
wissenschaftliches Personal	40	40
Angestellte in der DV und Sonstige	42	47
Verwaltungspersonal	12	10

Organe des Konrad-Zuse-Zentrums für Informationstechnik Berlin sind der Verwaltungsrat und der Präsident.

Mitglieder des Verwaltungsrates: s. Seite 5

Präsident: Prof. Dr. Peter Deuflhard

Das Amt des Vizepräsidenten ist noch nicht besetzt.

Entwicklung des Anlagevermögens - Sachanlagen

49

Posten des Anlagevermögens	Anschaffungs- und Herstellungskosten					Abreibungen					Restbuchwerte am Ende des Jahres
	Anfangsbestand	Zugänge	Abgänge	Umbuchungen	Endstand	Anfangsbestand	Abreibungen im Geschäftsjahr	angesamelte Abreibungen auf die Zugänge	Umbuchungen	Endstand	
	DM	DM	DM	DM	DM	DM	DM	DM	DM	DM	
EDV-Anlagen	1.553.569,34	6.364.872,69	425,70	+ 4.003.420,00	11.921.436,33	354.438,40	2.308.825,95	---	---	2.463.264,35	9.458.171,98
EDV-Anlagen (GWG)	---	4.884,60	4.884,60	---	0,00	---	4.884,60	4.884,60	---	0,00	0,00
Betriebs- u. Geschäftsausstattung	395.592,81	67.628,89	---	---	463.221,70	13.251,78	59.188,44	---	---	72.440,22	390.781,48
Betriebs- u. Geschäftsausstattung (GWG)	---	17.910,56	17.910,56	---	0,00	---	17.910,56	17.910,56	---	0,00	0,00
Anzahlungen auf Anlagen	4.003.420,00	---	---	- 4.003.420,00	0,00	---	---	---	---	---	0,00
Summe	5.952.582,15	6.455.296,74	23.220,86	---	12.384.658,03	167.690,18	2.390.809,55	22.795,16	---	2.535.704,57	9.848.953,46

Gesetz
über das Zentrum für Informationstechnik
(ZifaG)

Vom 17. Juli 1984

Das Abgeordnetenhaus hat das folgende Gesetz beschlossen:

§ 1
Rechtsform

(1) Das „Konrad Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin“ im folgenden „Zentrum“ genannt, wird als rechtsfähige Anstalt des öffentlichen Rechts mit Sitz in Berlin errichtet.

(2) Dienstherr und Arbeitgeber für die Beschäftigten des Zentrums ist das Land Berlin.

(3) Das Zentrum hat das Recht der Selbstverwaltung im Rahmen der nachfolgenden Bestimmungen.

§ 2
Aufgaben

Das Zentrum hat nach näherer Umschreibung durch die Satzung die Aufgabe, 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.

§ 3
Finanzen

(1) Einnahmen und Ausgaben des Zentrums werden in einem besonderen Wirtschaftsjahr nachgewiesen und nach den Grundsätzen der kaufmännischen Buchführung gebucht. Hiervon sind die Personalausgaben für die planmäßigen Dienstkräfte ausgenommen.

(2) Das Zentrum kann Entgelte für die Benutzung seiner Einrichtungen und für die Durchführung von Aufträgen Dritter verlangen.

(3) Das Land Berlin gewährt dem Zentrum zur Erfüllung seiner Aufgaben einen Zuschuß, dessen Höhe im Haushaltsplan des Landes Berlin festgesetzt wird.

§ 4
Dienstverhältnisse

Oberste Dienstbehörde und Dienstbehörde für die Beamten und Personalstelle für die Angestellten und Lohnempfänger ist das für Wissenschaft zuständige Mitglied des Senats von Berlin. Personalwirtschaftsstelle ist der Präsident. Die Personalwirtschaft des Zentrums unterliegt der Fachaufsicht durch das für Wissenschaft zuständige Mitglied des Senats.

§ 5

Organe des Zentrums sind der Verwaltungsrat und der Präsident.

§ 6

Verwaltungsrat

(1) Dem Verwaltungsrat gehören an

1. die Präsidenten der Freien Universität Berlin und der Technischen Universität Berlin mit je zwei Stimmen.
2. die für Wissenschaft und für Wirtschaft zuständigen Mitglieder des Senats von Berlin mit je einer Stimme.
3. ein Leiter einer außeruniversitären Einrichtung, der überwiegend von der Bundesanstalt für Materialprüfung und der Hahn-Meitner-Institut für Kernforschung Berlin GmbH benannt wird.

Die Mitglieder können sich jeweils durch ihren Vertreter im Amt oder durch eine von ihnen benannte Person vertreten lassen.

(2) Der Verwaltungsrat entscheidet über grundsätzliche und besonders bedeutsame Angelegenheiten sowie über die Planung und Organisation des Zentrums. Er ist insbesondere zuständig für

1. den Beschluß über die Satzung.
2. den Beschluß über die Bestellung des Präsidenten und des Vizepräsidenten.
3. den Vorschlag eines Entwurfs des Haushaltsplans.
4. den Beschluß über den Wirtschaftsplan.
5. die Festsetzung der Entgelte.
6. die Entwicklungsplanung und die Arbeitsprogramme.
7. die Geschäftsordnung für den Verwaltungsrat.
8. die Gliederung des Zentrums.
9. die Einsetzung von Gremien zur Unterstützung der Arbeit des Zentrums, insbesondere eines wissenschaftlichen Beirats.

(3) Die Entscheidungen des Verwaltungsrats über die Bestellung des Präsidenten und des Vizepräsidenten, über die Satzung sowie über den Vorschlag eines Entwurfs des Haushaltsplans bedürfen der Genehmigung durch das für Wissenschaft zuständige Mitglied des Senats von Berlin.

§ 7

Präsident

(1) Der Präsident und der Vizepräsident werden als Beamte auf Zeit für die Dauer von acht Jahren ernannt; ein Eintritt in den Ruhestand mit Ablauf der Amtszeit ist ausgeschlossen. Sie sind zugleich Professoren an der Freien Universität Berlin oder an der Technischen Universität Berlin. Sie sollen verschiedenen Universitäten angehören.

(2) Der Präsident vertritt das Zentrum nach innen und außen, soweit dieses Gesetz nichts anderes bestimmt. Er führt die Beschlüsse des Verwaltungsrats aus und erledigt die Geschäfte der laufenden Verwaltung. Er ist Beauftragter für den Haushalt. Er wird vom Vizepräsidenten vertreten.

§ 8

Präsidentenschaft und Vorsitz im Verwaltungsrat

(1) Vorsitzender des Verwaltungsrates ist eines der Mitglieder gemäß § 6 Abs. 1 Nr. 1.

(2) Der Präsident des Zentrums und der Vorsitzende des Verwaltungsrates müssen verschiedenen Universitäten angehören.

§ 9

Satzung

Die Satzung soll mindestens Regelungen über folgende Gegenstände enthalten:

1. Aufgaben gemäß § 2.
2. Vorrang von wissenschaftlicher vor kommerzieller Nutzung.
3. Zusammenarbeit mit Hochschulen, außeruniversitären wissenschaftlichen Einrichtungen und sonstigen Dritten.
4. Aufgaben des wissenschaftlichen Beirats.
5. Möglichkeit des Beitritts der Hochschulrechenzentren.

§ 10

Staatsaufsicht

Die Staatsaufsicht gemäß § 28 des Allgemeinen Zuständigkeitsgesetzes wird von dem für Wissenschaft zuständige Mitglied des Senats von Berlin ausgeübt.

§ 11

Übergangsregelung

(1) Bis zur Ernennung des Präsidenten gemäß § 7 Abs. 2 wird das Zentrum für Informationstechnik von dem für Wissenschaft zuständigen Mitglied des Senats von Berlin vertreten.

(2) Das Zentrum für Informationstechnik tritt in die bestehenden Verträge und Verpflichtungen des Großrechenzentrums Berlin ein. Geräte und Einrichtungsgegenstände des Großrechenzentrums Berlin werden von dem Zentrum für Informationstechnik übernommen.

§ 12

Änderung des Berliner Hochschulgesetzes

Das Gesetz über die Hochschulen im Lande Berlin (Berliner Hochschulgesetz - BerlHG) in der Fassung vom 30. Juli 1982 (GVBl. S. 1549), geändert durch Gesetz vom 10. November 1983 (GVBl. S. 1419), wird wie folgt geändert:

1. Die Überschrift zum 10. Abschnitt erhält folgende Fassung:

„Einrichtungen für Informationstechnik“;

2. § 110 Abs. 3 und 4 erhält folgende Fassung:

„(3) Darüberhinaus arbeiten die Hochschulen mit dem Zentrum für Informationstechnik zusammen.“

(4) Das für Hochschulen zuständige Mitglied des Senats von Berlin koordiniert die Planung der Hochschulen auf dem Gebiet der Informationstechnik, erstellt die diesbezügliche Gesamtplanung und erläßt die dazu erforderlichen Richtlinien.“

§ 13

Inkrafttreten

Dieses Gesetz tritt am Tage nach der Verkündung im Gesetz- und Verordnungsblatt für Berlin in Kraft.

Das vorstehende Gesetz wird hiermit verkündet.

Der Regierende Bürgermeister
Diepgen