Merkblatt zur Benutzung des Programms BEM auf dem neuen UNIX–Rechnerverbund der GWDG*

Dr. Jürgen Prenzel†

Version 1.0
23. November 1992

Notation

In diesem Merkblatt bezeichnet `Schreibmaschinenschrift` Texte, die bei der Bedienung des Rechners genau so einzugeben sind. Dabei ist der Unterschied zwischen Groß- und Kleinschreibung zu beachten. *Kursivschrift* bezeichnet Variable in syntaktischen Ausdrücken: Hier ist etwas einzusetzen. Ein senkrechter Strich | ("oder") verbindet alternative Ausdrücke. Eckige Klammern [ ] umschließen optionale Terme. Das Zeichen ␣ bedeutet ein oder mehrere Leerstellen.

1 Stand der Arbeiten

Das Programm BEM (Batch Equilibrium Model) steht jetzt auf dem neuen Rechnerverbund zur Verfügung. Es fehlen noch die Funktionen, die die Simulation von Batch–Kaskaden ermöglichen. Die Benutzung erfolgt, wie gewohnt, über Programme (Modelle), die mit einem Editor erzeugt werden. Die Gleichgewichtsberechnung wird durch `bem run` gestartet. Das Kommando `bem runvar` entfällt, es ist in `bem run` integriert.

Bei der tabellarischen Ausgabe fehlt noch das Kommando `bem list`, das auch in Zukunft nicht mehr empfohlen werden wird. Statt dessen soll das Kommando `bem tab` ausgebaut werden. Ich bitte um Vorschläge!

Die grafische Ausgabe wurde auf neue Grafikprogramme gestützt, die eine größere Verbreitung haben als UNIPLOT. Es gibt eine schnelle und einfache Grafik über das Kommando `bem plot`. Es wird das Programm GNUPLOT benutzt. Möglich ist die Darstellung von Simulationsergebnissen in einem Koordinatensystem. Mehrere Ausgabevariable können dargestellt werden, aber die Ordinatenskala ist dann gemeinsam. Die Darstellung von Meßwerten ist nicht vorgesehen.

Kompliziertere Grafik wird durch das Programm SAS erstellt. Es gibt ein Kommando `bem sas`, welches spezifizierte Ausgabevariable für SAS aufbereitet. Die Grafik ist dann durch Programmieren in der SAS–Sprache zu realisieren. Es

*Ausgabe lokal z.B. durch `texouthp3d1 /usr/users/jprenze/public/doc/bem_usg_01`

†Institut für Bodenkunde und Waldernährung der Universität Göttingen

wird ein Prototyp einer solchen Grafik zur Verfügung gestellt unter dem Namen `bspv1`, der in etwa die bisherigen Programme `bempv`*i* ersetzt. `bspv1` ist auf die COBAT-Datenstrukturen zugeschnitten und wird nicht als Teil des Programms BEM angesehen.

BEM ist im Kern ein FORTRAN Programm, das bis jetzt nur auf den IBM/AIX Maschinen des Rechnerverbundes läuft. Das betrifft alle `bem` Kommandos mit Ausnahme von `bem doplot`. Man muß sich deshalb von einer DEC/-ULTRIX Maschine aus z.B. mit `rlogin gwdu08` oder, falls man SAS für die Grafik benutzen möchte mit `rlogin gwdu14` weiterverbinden.

2 Initialisierung des Programms

Der Benutzer von BEM sollte die folgenden Zeilen in sein `.profile` aufnehmen:

```
.␣/usr/users/mlindhe/bin/ubwdef.scr
tempo
.␣/usr/users/jprenze/public/setup␣bem␣bemsas␣cobat␣wako
```

Dabei ist die Zeichenfolge `.␣` am Zeilenbeginn einzuhalten!

Der Befehl `tempo` richtet ein Dateiverzeichnis ein, das als temporär gedacht ist. Es wird wieder gelöscht, wenn man die Sitzung mit `log` statt mit `exit` beendet. Der Name dieses Verzeichnisses steht in der Shellvariablen `Tempo` zur Verfügung. Der Befehl `ubwdef.scr` ermöglicht `tempo` und wird benötigt, wenn mit Institutsdaten (COBAT–Daten) gearbeitet werden soll.

Der Befehl `setup` mit seinen Argumenten richtet neben einer Reihe von Definitionen auch ein Dateiverzeichnis `~/bemout/` ein, wenn es noch nicht existiert. Der gesamte Inhalt dieses Verzeichnisses sollte als semipermanent angesehen werden. Es handelt sich um die Ergebnisse des `bem run` – Schrittes, um eine mit Zeit und Datum markierte Dokumentation aller in diesen Schritten verwendeten Modell–Files und um Plots. Dieses Material kann viel Speicherplatz einnehmen. Es sollte von Zeit zu Zeit komplett gelöscht werden (`rm -r bemout`) . Ausgewählte Teile davon könnten in anderen Verzeichnissen gespeichert werden.

3 Die Arbeit mit BEM

3.1 Das Kommando `bem run`

Zunächst muß ein Filename vergeben werden, der im folgenden mit *name* bezeichnet wird. Das BEM–Programm (Modell) wird dann in einem File *name*`.m` abgelegt und BEM wird aufgerufen mit

`bem run` *name*

BEM erzeugt dann ein Ergebnisfile als *name*`.r` in `bemout/results/`.

Falls das Modell Ausdrücke der Form

$$\{\ x_1 \ ␣\ x_2 \ ␣\ \cdots\ ␣\ x_n\ \}$$

enthält, werden diese als Parametervarianten aufgefaßt. Das Modell wird n mal gerechnet, wobei die x_i nacheinander an Stelle des { } – Ausdrucks eingesetzt werden. Es ist auch möglich, mehrere solche Ausdrücke in einem Modell anzugeben. Dann wird beim i–ten Durchlauf der i–te Teilausdruck aus jedem Ausdruck eingesetzt. Die Ergebnisse werden in Files *name*.`v`*i*.`r` in `bemout/results/` abgelegt.

Jeder Aufruf von `bem run` führt dazu, daß das Modell als File *name.datum.uhrzeit*.`m` im Verzeichnis `bemout/models/` abgelegt wird. Die Plots und Tabellen erhalten später den gleichen Zeitstempel, so daß immer festgestellt werden kann, auf welche Modellversion eine Ausgabe zurückgeht.

3.2 Das Kommando `bem show`

Die Ausgabe der BEM – Ergebnisse erfolgt am direktesten mit dem Kommando

`bem show` *name [optionen]*

Die tabellarische Ausgabe wird dann normalerweise am Bildschirm mit Hilfe des Editors EMACS dargestellt. Sie enthält für jedes berechnete Gleichgewicht die Konzentrationen der Einzelionen, Komplexe, Salze und die Belegung des Austauschers.

Falls Ergebnisse einer Parameter–Variation betrachtet werden, muß statt *name* angegeben werden *name*.`v`*i*, für die i–te Parameter–Variante.

Als Optionen sind möglich:

- `-b`
  erzeugt die Ausgabe als Standardausgabe, ohne Aufruf des EMACS. Für Batch – Anwendungen.

- `-j` *zahl*
  gibt nur jedes *zahl*–te Gleichgewicht aus.

3.3 Ausgabe–Variable

Die folgenden Ausgabe–Kommandos werden alle über die Definition von Ausgabe–Variablen gesteuert. Diese Definitionen sind noch die gleichen wie an der IBM 3090. Es gibt lediglich eine Änderung im Aufruf: Wenn die Definition Zwischenräume enthielt, z.B. “`sng␣Al␣Al+++`”, dann sind diese Zwischenräume durch “_” zu ersetzen, falls die Definition direkt im Kommandoaufruf angegeben wird. Die eben angeführte Definition lautet dann “`sng_Al_Al+++`”. In einem Kommandoaufruf dienen dann Zwischenräume dazu, die einzelnen Definitionen voneinander zu trennen.

Es gibt auch die Möglichkeit, die Definitionen in einem File abzulegen. In diesem Fall wird anstelle der Definitionen im Kommando die `-d` *file* – Option benutzt. In dem File steht dann eine Definition pro Zeile, Zwischenräume als Trennung der Teile einer Definition sind wieder erlaubt.

3.4 Das Kommando `bem tab`

Dieses Kommando lautet

`bem tab` *name [optionen] liste-von-ausgabe-variablen*

Es erzeugt eine Tabelle mit einer Zeile pro berechnetem Gleichgewicht und einer Spalte für jede Ausgabe–Variable. Die Tabelle wird normalerweise am Bildschirm mit Hilfe des Editors EMACS dargestellt.

Falls Ergebnisse einer Parameter–Variation betrachtet werden, muß statt *name* angegeben werden *name*`.v`*i*, für die *i*–te Parameter–Variante.

Als Optionen sind möglich:

- `-d` *file*
  erlaubt die Spezifikation der Ausgabe–Vaiablen über den File *file*.

- `-u`
  erzeugt zwei Files, `$Tempo/tab.data` mit Daten und `$Tempo/tab.text` mit Überschrifts–Information. Diese Option dient zum Anschluß von Programmen. Der Editor EMACS wird nicht aufgerufen.

3.5 Das Kommando `bem plot`

Durch

`bem plot` *name* `-d` *file*| *liste-von-ausgabe-variablen*

wird eine Grafik für das Programm GNUPLOT vorbereitet. Die Herstellung der Grafik auf dem Bildschirm oder auf Papier erfolgt dann durch `bem doplot`. Die erste Ausgabe–Variable dient als x–Variable, alle weiteren als y–Variablen. Alle y–Variablen werden automatisch gemeinsam skaliert.

Das Programm GNUPLOT kann noch beeinflußt werden durch Zeilen, die mit `!` beginnen in einem *file*, der als Argument der `-d` – Option auftritt. Diese Zeilen werden als Befehle an GNUPLOT weitergegeben. Die Grafiken enthalten normalerweise keine Beschriftung der y–Achse. Sinnvoll kann deshalb eine Angabe

`! set ylabel "`*label*`"`

sein.

Die Ergebnisse von Parametervariationen werden automatisch einbezogen. Die entsprechenden Kurven sind mit `#`*i* für die *i*–te Parametervariante gekennzeichnet.

3.6 Das Kommando `bem doplot`

Dieses Kommando hat keine weiteren Argumente. Es erzeugt auf dem Bildschirm eine Menu–Liste der vorhandenen mit `bem plot` erstellten Grafiken. Diese Liste wird vom Editor EMACS in einem speziellen Mode produziert. Normales Editieren ist abgeschaltet, es stehen nur einige Sonderbefehle zur Verfügung, die auch mit `CTRL-h m` erfragt werden können. Neben den Pfeiltasten (Cursor– und Fenster–Bewegung) sind dies:

- `a` merkt eine Grafik zur Ausgabe auf dem AGFA–Drucker vor.

- `d` merkt eine Grafik zum Löschen vor, kann mit `a` oder `h` kombiniert werden.

- `g` erneuert die Menu–Liste, wird benötigt, falls inzwischen neue Grafiken erzeugt worden sind.

- `h` merkt eine Grafik zur Ausgabe auf dem HPIII–Drucker vor.

- `u` löscht vorgemerkte Befehle.
- `v` erzeugt eine Grafik auf dem Bildschirm.
- `x` führt die vorgemerkten Befehle aus.

Der Preview–Befehl `v` funktioniert nur, wenn GNUPLOT ein Ausgabefenster öffnen kann. Das ist nur auf XWindow–fähigen Geräten möglich. Vielfach funktioniert die XWindow–Ausgabe auf das Terminal nur, wenn die Grafik von einer DEC/ULTRIX–Maschine kommt. Deshalb ist es empfehlenswert, für das Kommando `bem doplot` eine eigene Sitzung in einem Fenster zu eröffnen, z.B. auf der Maschine `gwdu03`. Die Menu–Liste kann dann stehen bleiben, jeweils durch den `g` Befehl aufgefrischt, und die Erzeugung von Plots auf dem Bildschirm und auf Papier steuern, während in einer parallen Sitzung auf einer IBM/AIX–Maschine diese Grafiken erzeugt werden.

Die einzelnen Bildschirmgeräte müssen zum Teil erst für die Ausgabe durch XWindow konfiguriert werden (security/host und DISPLAY). Automatisch richtig ist dies gesetzt wenn man an einem der PC–Terminals sitzt und `bem doplot` auf der `gwdu03` läuft oder wenn man an an der Konsole der `gwdu12` sitzt und `bem doplot` genau dort läuft.

4 Das Programm `bspv1`

Dieses Programm erzeugt Grafiken mit Hilfe von SAS. Es funktioniert deshalb gegenwärtig nur auf der IBM/AIX–Maschine `gwdu14`. Es ist auf die Bedürfnisse der Projekte zugeschnitten, die Batchversuche zum Parameterfitting benutzen und die Meßdaten über das Programm COBAT eingeben.

Die Bedienung von SAS kann hier nur angedeutet werden. Es wird auf die umfangreiche Literatur verwiesen.

4.1 Das Kommando `bspv1 plot`

Der Aufruf lautet

`bspv1 plot` *cname bname vliste*

Dabei ist

cname = `-nc` | *cobatname*,

wobei *cobatname* der Name des Versuchs im COBAT–Verzeichnis ist, z.B. `macv6`. Wenn keine Meßdaten eingezeichnet werden sollen, wird `-nc` angegeben.

bname steht für den Namen des bei `bem run` benutzten Modells.

Es ist

vliste = *liste-von-ausgabe-variablen* | `-d` *dfile*

wie oben bei `bem plot`.

Die "Kopf"–Bestandteile der Ausgabe–Variablen müssen so beschaffen sein, daß über sie die Verbindung zu den COBAT–Daten hergestellt wird. Möglich sind die folgenden drei Definitionen:

- `pH`

- `ctl` ␣ *bemel* ␣ *cobel*
- `dcs` ␣ *bemel* ␣ `d`*cobel*

Dabei steht *bemel* für ein Element im BEM–Modell und *cobel* für die Schreibweise eines analysierten Elementes, wie sie im COBAT–File vorgegeben ist.

Die erzeugten Grafiken werden in einen SAS–Katalog eingetragen, der sich hinter dem File `~/bemout/bem.sct01`, verbirgt. Bei bis zu 4 Grafiken wird eine Blatteinteilung für 4 Grafiken gewählt, bei 5 bis 9 Grafiken eine für 9.

4.2 Das Kommando `bspv1 doplot`

Es handelt sich um einen Aufruf der SAS–Prozedur `greplay`, wahlweise im XWindow oder im vt330 –Modus:

`bspv1 doplot x` | `vt`

Es öffnet sich ein Menu, das der Verwaltung der mit `bspv1 plot` erzeugten Grafiken dient. Es stehen zwei Befehle in der Prefix–Kommando–Zone zur Verfügung:

- `del` löscht eine Grafik.
- `s` gibt eine Grafik aus.

Es können mehrere Befehle eingetragen (vorgemerkt) werden, die erst wirksam werden, wenn man RETURN eingibt. Normalerweise erzeugt `s` eine Preview–Grafik auf dem Bildschirm. Wenn man aber vorher im Kopf des Menus den Eintrag `Device` auf einen Plottertreiber, z.B. auf `pshp3` setzt und, bei schwarzweißer Ausgabe den Eintrag `Cmap` auf `allbl`, dann wird Ausgabe auf Papier erzeugt. Diese Ausgabe wird aber erst wirklich erzeugt, wenn man `bspv1 doplot` verläßt (Kommando `===> bye`).