

Optkin - Reengineering

Frank Butzek

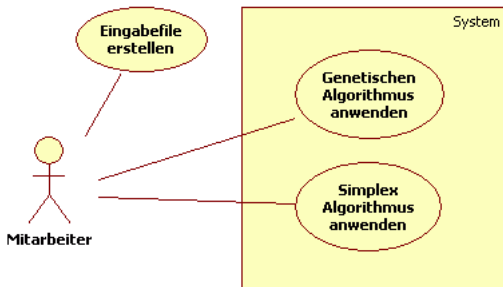
25. Oktober 2007

Themen

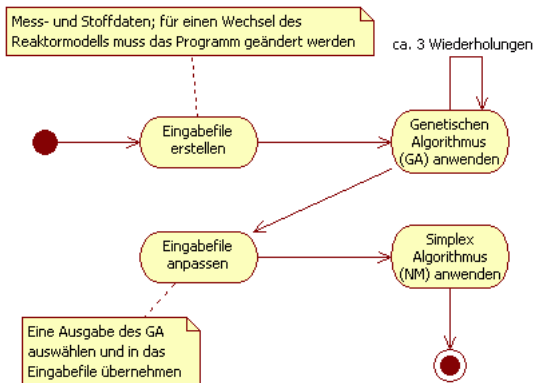
- 1 **Optkin**
 - Programmbeschreibung
 - Altsystem
 - Wunschsystem
 - Programminterna
- 2 **Fortran**
 - Geschichte
 - Aufbau
 - Codebeispiel
 - Strukturierung
- 3 **Leibniz-Institut**
 - Allgemeines
 - Aktuelle Presse

Programmbeschreibung

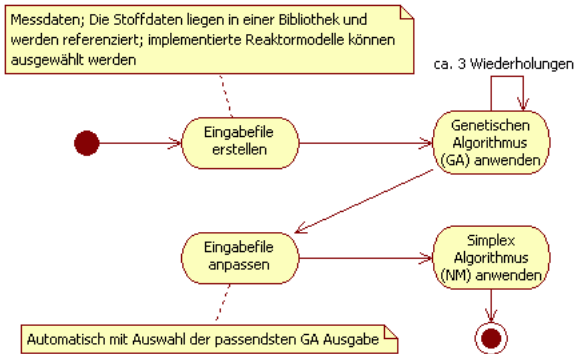
- Bereich Kinetische Reaktionstechnik
- Bestimmung der optimalen Eingabeparameter unter Angabe vom experimentell ermittelten Werten



Altsystem



Wunschsystem



Programminterna

- Fortran Code (überwiegend FORTRAN 77)
- Über die Jahre von vielen verschiedenen Entwicklern verändert
- Unstrukturierter Code mehrerer Sprachstandards
- 3313 LOC
- Verwendung der seit 2004 nicht mehr unterstützten Entwicklungsumgebung Compaq Visual Fortran 6.6

Geschichte

"John W. Backus, 82, Fortran Developer, Dies", NYT 20.3.2007

- Leiter des IBM Teams, das Fortran (The IBM Mathematical Formula Translating System) als erste Programmier-Hochsprache entwickelte.

Historie

- 1954 erste lauffähige Version
- 1957 Veröffentlichung von (704) FORTRAN (imperativ)
- 1962 FORTRAN IV (maschinenunabhängig, prozedural) (1965 als FORTRAN 66 (ANSI))
- 1978 FORTRAN 77
- 1992 Fortran 90 (Free-form source)
- 1996 Fortran 95 (minor update)
- 2004 Fortran 2003 (OOP)

Hello World

```
PROGRAM hello
  PRINT *, "Hello World"
END PROGRAM hello
```

oder ein wenig komplexer...

```
PROGRAM hello
  CALL myprint("Hello World")
END PROGRAM hello

SUBROUTINE myprint(string)
  CHARACTER(LEN=*), INTENT(IN) :: string
  PRINT *, string
END SUBROUTINE myprint
```


Alter Code - FORTRAN 77

```

SUBROUTINE MKFNAM(ISTRNG,IVAL,OSTRNG)
C   ADD IVAL IN STRING FORMAT ".XXX" AS FILE EXTENSION TO ISTRNG
    IMPLICIT NONE
    CHARACTER*(*) ISTRNG,OSTRNG
    INTEGER IVAL
    CHARACTER*3 DS
    CHARACTER ZERO
    PARAMETER (ZERO = '0')
    WRITE(UNIT=DS,FMT=10) IVAL
    IF (IVAL .LT. 10) THEN
        DS(1:2) = ZERO//ZERO
    ELSE IF (IVAL .LT. 100) THEN
        DS(1:1) = ZERO
    END IF
    CALL ADDSTR(ISTRNG,DS,OSTRNG)
    RETURN
10  FORMAT(I3)
    END
```

Neuer Code - Fortran 95

```
SUBROUTINE mkfnam(istrng,ival,ostrng)
! ADD IVAL IN STRING FORMAT ".XXX" AS FILE EXTENSION TO ISTRNG
IMPLICIT NONE
CHARACTER (LEN=*), INTENT(IN)          :: istrng
INTEGER, INTENT(IN)                    :: ival
CHARACTER (LEN=*), INTENT(OUT)         :: ostrng
CHARACTER (LEN=1), PARAMETER :: zero = '0'
CHARACTER (LEN=3)                      :: ds
WRITE(UNIT=ds,FMT=10) ival
IF (ival < 10) THEN
  ds(1:2) = zero//zero
ELSE IF (ival < 100) THEN
  ds(1:1) = zero
END IF
CALL addstr(istrng,ds,ostrng)
RETURN
10  FORMAT(I3)
END SUBROUTINE mkfnam
```

Überarbeiteter Code

- Der bisherige Aufruf lautete:
CALL mkfnam(ferg,izy kz,ferg)
- Jetzt so:
CHARACTER (LEN=3) :: ext
WRITE(UNIT=ext,FMT='(I3.3)') izy kz
CALL addstr(ferg,ext,ferg)

Module - Strukturierung seit Fortran 90

```
MODULE mymod
  IMPLICIT NONE
  SAVE
  INTEGER :: counter = 0
  CONTAINS
    SUBROUTINE myprint(string)
      CHARACTER(LEN=*), INTENT(IN) :: string
      PRINT *, string
      counter = counter + 1
    END SUBROUTINE myprint
END MODULE mymod

PROGRAM hello
  USE mymod
  CALL myprint("Hello World")
  PRINT *, counter
END PROGRAM hello
```

Leibniz-Institut für Katalyse e. V.

- Institut an der Universität Rostock
- Außenstelle Berlin, Richard-Willstätter-Straße 12, 12489 Berlin
- bis 2005 Institut für Angewandte Chemie Berlin-Adlershof e. V.
- wird in 2 Jahren geschlossen und nach Rostock verlegt
- <http://www.catalysis.de/>

- Dr.-Ing. R. Krähnert, Gruppenleiter der Nachwuchsgruppe "Catalytic Coatings"
- Dr. D. Linke, Bereichsleiter "Katalysatorentwicklung und Reaktionstechnik"

Chemie-Nobelpreis 2007



- Prof. Gerhard Ertl vom Berliner Fritz-Haber-Institut
- Das Leibniz-Institut nutzt die Erkenntnisse Ertls bei der Entwicklung industriell anwendbarer Katalysatoren.