

Inhaltsverzeichnis

Teil I Grid Computing und Computational Science

1	Grid Computing für Computational Science	3
	Dietmar Fey	
1.1	Was ist Computational Science?	3
1.2	Was ist Grid Computing?	5
1.3	Grid Computing und Computational Science	9
	Literaturverzeichnis	13

Teil II Grundlagen der Informatik für Computational Science

2	Parallele Rechnerarchitekturen	17
	Bernd Klauer	
2.1	Parallele Rechnerarchitekturen	17
2.1.1	Der sequenzielle Rechner	18
2.1.2	Parallelrechner	18
2.2	Organisation paralleler Abläufe	29
2.2.1	Kontrollfluss und Datenfluss	29
2.2.2	Kommunikation	32
2.2.3	Ablaufplanung	32
	Literaturverzeichnis	37
3	Leistungsmaße für das parallele Rechnen	39
	Dietmar Fey	
3.1	Speed-Up und Effizienz	39
3.2	Das Amdahlsche Gesetz	40
3.3	Der Amdahl-Effekt	43
3.4	Das Gesetz von Gustafson-Barsis	44
3.5	Die Karp-Flatt-Metrik	45
3.6	Die Isoeffizienz-Funktion	47

3.7	Weiterführende Literatur	48
	Literaturverzeichnis	49
4	Parallelisierungstechniken	51
	Dietmar Fey	
4.1	Lose und eng gekoppelte Grid-Strukturen	51
4.2	Auffinden von Nebenläufigkeit	52
4.2.1	Beispiel Matrixmultiplikation	53
4.2.2	Beispiel Molekulardynamik	55
4.2.3	Gruppieren und Ordnen von Tasks	57
4.2.4	Datenaufteilung	60
4.2.5	Entwurfsbewertung	61
4.3	Algorithmische Ebene	64
4.3.1	Parallelismus auf Taskebene	66
4.3.2	Teile und Herrsche-Prinzip	66
4.3.3	Prinzip der geometrischen Zerlegung	68
4.3.4	Rekursive Datenaufteilung	71
4.3.5	Pipeline-Verarbeitung	73
4.3.6	Ereignis-gesteuerte Koordinierung	75
4.4	Hilfsstrukturen für den Entwurf paralleler Programme	77
4.4.1	SPMD-Modell	78
4.4.2	Das Master-Worker-Modell	80
4.4.3	Parallelismus in Schleifen	82
4.4.4	Fork-/Join-Mechanismus	86
4.4.5	Gemeinsame Daten	88
4.5	Zusammenfassung	94
	Literaturverzeichnis	97
5	Eine kurze Einführung in MPI	99
	Adrian Knoth	
5.1	Allgemeines	99
5.2	Konzepte	100
5.3	Erste Schritte	101
5.4	Einfache Punkt-zu-Punkt-Kommunikation	102
5.5	Kollektive Operationen	104
5.6	Erweiterte Punkt-zu-Punkt-Kommunikation	106
5.7	MPI und Fortran	113
5.8	Zusammenfassung	114
	Literaturverzeichnis	115
6	Open MPI	117
	Adrian Knoth	
6.1	Der Aufbau von OpenMPI	117
6.1.1	OPAL – Open Portable Access Layer	118
6.1.2	ORTE – Open Runtime Environment	119
6.1.3	OMPI – Open Message Passing Interface	121

6.2	Der Open MPI-Coding-Standard	124
	Literaturverzeichnis	126
7	Eine kurze Einführung in OpenMP	127
	Adrian Knoth	
7.1	Aufbau von OpenMP	127
7.1.1	Grundlegende Konzepte	128
7.1.2	Strukturierte Blöcke und Anweisungsformate	132
7.1.3	Arbeitsteilung	133
7.1.4	Speichernutzung zwischen Threads	136
7.1.5	Die Laufzeitumgebung	139
7.1.6	Synchronisierung	140
7.1.7	Ablaufplanung	144
7.1.8	Weitere Spracheigenschaften	145
	Literaturverzeichnis	146
Teil III Grundlagen der Mathematik und Physik für Computational Science		
8	Numerische Verfahren für gewöhnliche Differentialgleichungen	149
	Martin Hermann	
8.1	Anfangswertprobleme	149
8.1.1	Differentialgleichungen	149
8.1.2	Diskretisierung einer DGL	151
8.1.3	Runge-Kutta-Verfahren	152
8.1.4	Lokaler Diskretisierungsfehler und Konsistenz	158
8.1.5	Entwicklung von Runge-Kutta-Verfahren	164
8.1.6	Kollokation und implizite Runge-Kutta-Verfahren	169
8.1.7	Globaler Fehler und Konvergenz	176
8.1.8	Schätzung des lokalen Diskretisierungsfehlers und Schrittweitensteuerung	178
8.1.9	Absolute Stabilität und Steifheit	181
8.2	Randwertprobleme	189
8.2.1	Einführung	189
8.2.2	Einfach-Schießverfahren	190
8.2.3	Mehrach-Schießverfahren	193
8.2.4	Zur Parallelisierung des Mehrfach-Schießverfahrens	201
	Literaturverzeichnis	203
9	Finite-Differenzen-Methoden	207
	Steffen Limmer	
9.1	Einleitung	207
9.2	Partielle Differentialgleichungen	208
9.2.1	Kategorien von Partiellen Differentialgleichungen	208
9.2.2	Der Differenzenquotient	209
9.3	Schwingende Saite	211
9.3.1	Herleiten von Gleichungen	211

9.3.2	Herleiten des seriellen Programms	212
9.3.3	Design des parallelen Programms	213
9.3.4	Vervielfältigen von Berechnungen	216
9.4	Stationäre Wärmeverteilung	218
9.4.1	Herleiten von Gleichungen	218
9.4.2	Herleiten des seriellen Programms	219
9.4.3	Design des parallelen Programms	221
9.5	Ausführung im Grid	222
9.6	Zusammenfassung	223
9.7	Anmerkung	223
	Literaturverzeichnis	223
10	Physikalische Modelle zur Lichtausbreitung	225
	Matthias Brinkmann, Malte Hagemann, Uwe Langbein und Andreas Hermerschmidt	
10.1	Modelle zur Lichtausbreitung	225
10.1.1	Lichtausbreitung im Strahlenmodell	226
10.1.2	Lichtausbreitung im Wellenmodell	231
	Literaturverzeichnis	252

Teil IV Grid Computing Infrastrukturen

11	Softwaresysteme für den Betrieb von Grids	257
	Steffen Limmer	
11.1	Das Globus Toolkit 4	257
11.1.1	Data Management	258
11.1.2	Execution Management	259
11.1.3	Monitoring & Discovery	260
11.1.4	Security	261
11.2	GridWay	266
11.3	GridSphere und Grid Portlets	267
11.3.1	Implementierung von Portlets	268
11.3.2	Ein Portlet für die Simulation Zellulärer Automaten	271
	Literaturverzeichnis	274
12	Sicherheit im Grid	275
	Dietmar Fey	
12.1	Einführung	275
12.1.1	Grundlagen zur Sicherheit	276
12.1.2	Symmetrische Verschlüsselungstechnik	277
12.1.3	Asymmetrische Verschlüsselungstechnik	277
12.2	Die Zertifizierungsstelle	279
12.3	Digitale Zertifikate	281
12.4	Infrastruktur für Grid-Sicherheit	284
12.4.1	Delegieren von Rechten	285
12.5	Sichere Kommunikation im Grid	287

Literaturverzeichnis	288
13 Globus-Webservices	291
Steffen Limmer	
13.1 Einleitung	291
13.2 Webservices allgemein	292
13.3 Webservices und Globus	297
13.3.1 Implementierung eines WSRF-Webservices	299
Literaturverzeichnis	309
14 Condor	311
Steffen Limmer	
14.1 Einleitung	311
14.2 Das System	312
14.2.1 Der Condor-Pool	312
14.2.2 Universen	315
14.2.3 Die Schlüsselmechanismen	316
14.2.4 Condor und Gridcomputing	319
Literaturverzeichnis	320
Teil V Computational Science Anwendungen in Multi-Clustern und Grids	
15 Computational Statistical Physics – Stochastische Simulation von Diffusionsprozessen	325
Uwe Renner	
15.1 Einleitung	325
15.2 Mathematische Grundbegriffe der Wahrscheinlichkeitsrechnung ..	327
15.3 Zufallszahlen, Pseudozufallszahlen und Zufallsgeneratoren	330
15.4 Stochastische Prozesse	332
15.5 Korrelationsfunktionen	334
15.6 Allgemeines zur Diffusion	335
15.7 Klassische FICKsche Diffusion und Diffusionsgleichungen	337
15.8 Diffusion als stochastischer Prozess	339
15.8.1 Diffusionsgleichung für die BROWNsche Molekularbewegung	340
15.8.2 Die Zufallswanderung der Teilchen – random walk	341
15.8.3 Sprungprozesse in stetiger Zeit (CTRW)	344
15.9 EINSTEIN-Beziehung	348
15.10 Normale und anomale Diffusion	350
15.11 Ein stochastisches Modell für die single-file-Diffusion	351
Literaturverzeichnis	352
16 Die Boltzmann-Gleichung: Grundgleichung der Kinetik	355
Wolfgang Eisenberg	
16.1 Die Anwendungsvielfalt der Boltzmann-Gleichung	355
16.2 Elementare kinetische Theorie	357

16.3	Zu den Grundzügen einer exakten kinetischen Theorie	360
16.4	Zur Boltzmann-Master-Gleichung	361
16.5	Stoßinvarianten und Bilanzgleichungen	362
16.6	Näherungs- und Lösungsmethoden der Boltzmann-Gleichung	363
16.7	Ausblick	365
	Literaturverzeichnis	366
17	Computational Photonics – Grid Computing in der Nanooptik	367
	Carsten Rockstuhl, Thomas Paul, Thomas Pertsch und Falk Lederer	
17.1	Zur Bedeutung der Nanooptik	367
17.2	Warum Grid Computing in der modernen Nanooptik?	368
17.3	Grundlagen der theoretischen und numerischen Beschreibung	370
17.3.1	Grundlagen der Lichtausbreitung – die Maxwellschen Gleichungen	371
17.3.2	Ein kurzer Überblick über numerische Methoden zur Lösung der Maxwellschen Gleichungen	373
17.4	Anwendungsbeispiele	375
17.4.1	Plasmonik	376
17.4.2	Metamaterialien	378
17.4.3	Photonmanagement in Solarzellen	380
17.4.4	Photonische Kristalle und Quasikristalle	382
17.5	Zusammenfassung und Ausblick	383
	Literaturverzeichnis	384
18	Computational Photonics – Das Design von organischen Leuchtdioden	385
	Matthias Brinkmann, Malte Hagemann, Uwe Langbein und Andreas Hermerschmidt	
18.1	Funktionsprinzip organischer Leuchtdioden	385
18.2	Berechnung von organischen Leuchtdioden	388
	Literaturverzeichnis	390
19	Einführung in die computergestützte Quantenchemie	391
	Leticia González und Dirk Bender	
19.1	Einleitung	391
19.2	Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung und die Born-Oppenheimer-Näherung	392
19.3	<i>Ab initio</i> Methoden	395
19.3.1	Die Hartree-Fock-Näherung	396
19.3.2	Korrelationsmethoden	398
19.4	Dichtefunktionaltheorie	403
19.4.1	Motivation	403
19.4.2	Die Hohenberg-Kohn-Theoreme	404
19.4.3	Der Kohn-Sham-Ansatz	406
19.4.4	Austausch-Korrelations-Funktionale	408
19.4.5	Vor- und Nachteile der DFT	410

19.4.6	Zeitabhängige Dichtefunktionaltheorie	410
	Literaturverzeichnis	412
20	Parallele single-file-Diffusion mit Zellulären Automaten	415
	Uwe Renner	
20.1	Einleitung	415
20.2	Modellbeschreibung	416
20.3	Das MPI-Interface	418
20.4	Experimentelle Untersuchungen	419
20.5	Auswertung	421
20.6	Ausblick	421
	Literaturverzeichnis	424
21	Performance-Untersuchungen im Multi-Cluster-Grid	425
	Steffen Limmer	
21.1	Verwendete Rechenlast	425
21.2	Multi-Cluster-Grid Umgebung	426
21.3	Bewertung mit Hilfe der Leistungsmaße für Parallelrechner	426
	Literaturverzeichnis	430
22	Verteilte VHDL-Simulationen – Beispiel einer High-Throughput-Anwendung im Grid	431
	Steffen Limmer	
22.1	Einleitung	431
22.2	Parallelisierung	432
22.3	Performance-Test	433
	Literaturverzeichnis	438
23	Geometrische Zerlegung	439
	Andreas Schäfer	
23.1	Einführung	439
23.2	Beispiel: Conway's Game of Life	440
23.3	Klassifikation von Anwendungen	444
23.4	Geisterzonen	446
23.5	Effiziente Parallelisierung	448
23.6	Gebietszerlegung	449
23.6.1	Ausgabe und Visualisierung	456
23.7	Frameworks	458
23.8	MuCluDent	459
23.9	Loadbalancing	460
	Literaturverzeichnis	463
24	Parallelisierung von Simulationen für magnetische Systeme mittels MPI	467
	Frank Schurz	
24.1	Einleitung	467
24.2	Das 2-dimensionale Ising-Modell	468

24.2.1	Die serielle Implementierung des Ising-Modells	472
24.2.2	Die Parallelisierung mit Hilfe des „Schachbrett“-Verfahrens	475
24.2.3	Nutzen der Parallelisierung	479
24.3	Das Heisenberg-Modell	480
24.3.1	Die serielle Simulation des Heisenberg-Modells	483
24.3.2	Das parallele Programm mit nicht-blockierender Kommunikation	485
24.3.3	Vergleich des seriellen und des parallelen Programms	487
24.4	Das Modell eines magnetodipolaren Glases	488
24.4.1	Die serielle Simulation	491
24.4.2	Die parallele Umsetzung des Modells	494
24.4.3	Reduzierung der Kommunikation	497
24.5	Zusammenfassung	500
	Literaturverzeichnis	500
25	Parallelrechnereinsatz für das Demonstrationsbeispiel	
	Gammastrahlungstransport im homogenen schlanken Stab	503
	Manfred Braune	
25.1	Gammastrahlungstransport im homogenen schlanken Stab	503
25.2	Parallelisierte numerische Behandlung eines hochdimensionalen Anfangswertproblems gewöhnlicher Differentialgleichungen	
	1. Ordnung	506
	Literaturverzeichnis	511
	Glossar	513
	Sachverzeichnis	517