

# Inhaltsverzeichnis

## Teil I Grid Computing und Computational Science

<b>1</b>	<b>Grid Computing für Computational Science</b> .....	<b>3</b>
	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

<b>2</b>	<b>Parallele Rechnerarchitekturen</b> .....	<b>17</b>
	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
<b>3</b>	<b>Leistungsmaße für das parallele Rechnen</b> .....	<b>39</b>
	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
<b>4</b>	<b>Parallelisierungstechniken .....</b>	<b>51</b>
	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
<b>5</b>	<b>Eine kurze Einführung in MPI .....</b>	<b>99</b>
	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
<b>6</b>	<b>Open MPI .....</b>	<b>117</b>
	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
<b>7</b>	<b>Eine kurze Einführung in OpenMP .....</b>	<b>127</b>
	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

<b>8</b>	<b>Numerische Verfahren für gewöhnliche Differentialgleichungen ....</b>	<b>149</b>
	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	Mehrfach-Schießverfahren .....	193
8.2.4	Zur Parallelisierung des Mehrfach-Schießverfahrens ....	201
	Literaturverzeichnis .....	203
<b>9</b>	<b>Finite-Differenzen-Methoden .....</b>	<b>207</b>
	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
<b>10</b>	<b>Physikalische Modelle zur Lichtausbreitung .....</b>	<b>225</b>
	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
<b>Teil IV Grid Computing Infrastrukturen</b>		
<b>11</b>	<b>Softwaresysteme für den Betrieb von Grids .....</b>	<b>257</b>
	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
<b>12</b>	<b>Sicherheit im Grid .....</b>	<b>275</b>
	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
<b>13 Globus-Webservices .....</b>	<b>291</b>
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
<b>14 Condor .....</b>	<b>311</b>
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
<b>Teil V Computational Science Anwendungen in Multi-Clustern und Grids</b>	
<b>15 Computational Statistical Physics – Stochastische Simulation von Diffusionsprozessen .....</b>	<b>325</b>
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
<b>16 Die Boltzmann-Gleichung: Grundgleichung der Kinetik .....</b>	<b>355</b>
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
<b>17</b>	<b>Computational Photonics – Grid Computing in der Nanooptik .....</b>	<b>367</b>
	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 Maxwell'schen Gleichungen .....	371
17.3.2	Ein kurzer Überblick über numerische Methoden zur Lösung der Maxwell'schen 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
<b>18</b>	<b>Computational Photonics – Das Design von organischen Leuchtdioden .....</b>	<b>385</b>
	Matthias Brinkmann, Malte Hagemann, Uwe Langbein und Andreas Hermerschmidt	
18.1	Funktionsprinzip organischer Leuchtdioden .....	385
18.2	Berechnung von organischen Leuchtdioden .....	388
	Literaturverzeichnis .....	390
<b>19</b>	<b>Einführung in die computergestützte Quantenchemie .....</b>	<b>391</b>
	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
<b>20</b>	<b>Parallele single-file-Diffusion mit Zellulären Automaten .....</b>	<b>415</b>
	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
<b>21</b>	<b>Performance-Untersuchungen im Multi-Cluster-Grid .....</b>	<b>425</b>
	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
<b>22</b>	<b>Verteilte VHDL-Simulationen – Beispiel einer High-Throughput-Anwendung im Grid .....</b>	<b>431</b>
	Steffen Limmer	
22.1	Einleitung .....	431
22.2	Parallelisierung .....	432
22.3	Performance-Test .....	433
	Literaturverzeichnis .....	438
<b>23</b>	<b>Geometrische Zerlegung .....</b>	<b>439</b>
	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
<b>24</b>	<b>Parallelisierung von Simulationen für magnetische Systeme mittels MPI .....</b>	<b>467</b>
	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
<b>25</b>	<b>Parallelrechnereinsatz für das Demonstrationsbeispiel Gammastrahlungstransport im homogenen schlanken Stab . . . . .</b>	<b>503</b>
	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
	<b>Glossar . . . . .</b>	<b>513</b>
	<b>Sachverzeichnis . . . . .</b>	<b>517</b>