

Schlussbericht

des BMBF-Verbundprojekts

PT-Grid – Plasma-Technologie-Grid

Förderkennzeichen: 01IG09001
Berichtszeitraum: 01.05.2009 - 30.04.2012
Herausgeber: Detlef Loffhagen
Datum: 26. November 2012
Ansprechpartner: Leibniz-Institut für Plasmaforschung und Technologie e. V.
Prof. Dr. Klaus-Dieter Weltmann
Felix-Hausdorff-Straße 2
17489 Greifswald
Tel.: +49 (0) 3834 554 300
Fax: +49 (0) 3834 554 301
E-Mail: weltmann@inp-greifswald.de

GEFÖRDERT VOM



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

Das diesem Bericht zugrunde liegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung und Forschung unter den Förderkennzeichen 01IG09001 A-I gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autoren.

Vorwort

Dieses Dokument ist der Schlussbericht für das vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) geförderte Vorhaben „Verbundprojekt: PT-Grid - Plasma-Technologie-Grid“ mit den Förderkennzeichen 01IG09001 A-I. Das Verbundvorhaben bestand aus den nachfolgend aufgeführten neun geförderten Projektpartnern (mit Angabe des Förderkennzeichens (FKZ)), zehn assoziierten Projektpartnern und drei Unterauftragnehmern. Die Koordination des Verbundvorhabens lag bei Priv.-Doz. Dr. Detlef Loffhagen vom Leibniz-Institut für Plasmaforschung und Technologie e. V. Der Schlussbericht stellt unter anderem die Ziele, den Ablauf, die Ergebnisse und die zukünftige Verwertung der Resultate des Vorhabens vor. Die Abfassung des Schlussberichts erfolgte durch den Koordinator des Verbundvorhabens in Abstimmung mit den Projektpartnern und unter Verwendung der von ihnen zur Verfügung gestellten Unterlagen und Informationen. Für den Inhalt der eingehenden Ergebnisdarstellung im Abschnitt 6 sind die dort genannten Autoren aus den am Vorhaben beteiligten Forschungsstellen verantwortlich. Als Autoren haben bei der Abfassung der eingehenden Ergebnisdarstellung mitgewirkt: M. M. Becker, B. Bosc-Bierne, R. P. Brinkmann, L. Eichhorn, C. Grimme, T. Hemke, M. Kemmerling, M. Klotz, J. Leping, D. Loffhagen, H.-W. Mindt, J. Niemann, W. Ottow, A. Papaspyrou, A. Pflug, F. Schintke, F. Sigeneger und A. Spille-Kohoff. Die Ergebniskontrollberichte der geförderten Projektpartner sind nicht Teil des Schlussberichts.

Wir danken unseren Projektpartner und Unterauftragnehmern für ihre Unterstützung.

Projektpartner

Geförderte Partner

Leibniz-Institut für Plasmaforschung und Technologie e.V.
(INP), Greifswald; FKZ 01IG09001A



Technische Universität Dortmund, Institut für Roboterfor-
schung; FKZ 01IG09001B



Fachhochschule Stralsund, Fachbereich Wirtschaft; FKZ
01IG09001C



Ruhr-Universität Bochum, Lehrstuhl für Theoretische Elektro-
technik; FKZ 01IG09001D



Fraunhofer-Institut für Schicht- und Oberflächentechnik (IST),
Braunschweig; FKZ 01IG09001E



CFX Berlin Software GmbH, Berlin; FKZ 01IG09001F



Engineering System International GmbH (ESI), Essen; FKZ
01IG09001G



GNS Systems GmbH, Braunschweig; FKZ 01IG09001H



Plasmetrex GmbH, Berlin; FKZ 01IG09001I



Assoziierte Partner

Ernst-Moritz-Arndt-Universität Greifswald, Rechenzentrum



Euroglas GmbH, Haldensleben



EWM Hightec Welding GmbH, Mündersbach



Kjellberg Finsterwalde Plasma und Maschinen GmbH



Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB)



Leybold Optics GmbH, Alzenau



Linde AG, Unterschleißheim



Max-Planck-Institut für Plasmaphysik, Teilinstitut Greifswald



Technische Universität Dresden



VON ARDENNE Anlagentechnik GmbH, Dresden



Unterauftragnehmer

neoplas GmbH, Greifswald



onScale solutions GmbH, Berlin



Philipps-Universität Marburg, Fachbereich Mathematik und Informatik



Inhaltsverzeichnis

Vorwort	2
Projektpartner	3
Abbildungsverzeichnis	8
Tabellenverzeichnis	12
Verzeichnis der Programmausdrucke	13
1 Aufgabenstellung	14
2 Voraussetzungen	15
2.1 Leibniz-Institut für Plasmaforschung und Technologie e.V.	16
2.2 Technische Universität Dortmund, Institut für Roboterforschung	16
2.3 Fachhochschule Stralsund, Fachbereich Wirtschaft	17
2.4 Ruhr-Universität Bochum, Lehrstuhl für Theoretische Elektrotechnik	17
2.5 Fraunhofer-Institut für Schicht- und Oberflächentechnik	17
2.6 CFX Berlin Software GmbH	18
2.7 Engineering System International GmbH	18
2.8 GNS Systems GmbH	18
2.9 Plasmetrex GmbH	18
3 Wissenschaftlicher und technischer Stand	19
4 Planung und Ablauf des Vorhabens	21
5 Zusammenarbeit mit anderen Stellen	27
6 Ergebnisse	29
6.1 Projektleitung	29
6.1.1 Informationstechnische Infrastruktur	33
6.1.2 Konkretisierung des Geschäftsmodells	51
6.2 Teilprojekt 1: Simulation von Schweiß- und Schneidprozessen mit ANSYS CFX im D-Grid	66
6.3 Teilprojekt 2: Magnetohydrodynamische 3d Simulation	99
6.4 Teilprojekt 3: PIC-MC-Simulation von Niederdruck-Plasmaentladungen	127
6.5 Teilprojekt 4: Selbstkonsistente kinetische Berechnung von Ionen- und Neu- tralteilchenverteilungsfunktionen hinter einer Plasmarandschicht	165

6.6	Literatur	191
7	Wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises	193
8	Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Arbeit	194
9	Voraussichtlicher Nutzen und Verwertbarkeit der Ergebnisse im Sinne des fortgeschriebenen Verwertungsplanes	195
9.1	Erfindungen, Schutzrechte, Lizenzen	196
9.2	Wirtschaftliche Erfolgsaussichten nach Projektende	196
9.3	Wissenschaftliche und/oder technische Erfolgsaussichten nach Projektende	198
9.4	Wissenschaftliche und wirtschaftliche Anschlussfähigkeit	199
10	Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen	203
11	Erfolgte und geplante Veröffentlichungen	205
11.1	PT-Grid-interne Berichte	205
11.2	Publikationen in Journalen	208
11.3	Konferenzbeiträge	209
11.4	Arbeiten der wissenschaftlichen Weiterbildung	213
A	Arbeitsplanung und Meilensteine	214
A.1	Projektleitung	214
A.1.1	Informationstechnische Infrastruktur	215
A.1.2	Konkretisierung des Geschäftsmodells	216
A.2	Teilprojekt 1: Simulation von Schweiß- und Schneidprozessen mit ANSYS CFX im D-Grid	217
A.3	Teilprojekt 2: Magnetohydrodynamische 3d Simulation	218
A.4	Teilprojekt 3: PIC-MC-Simulation von Niederdruck-Plasmaentladungen . .	219
A.5	Teilprojekt 4: Selbstkonsistente kinetische Berechnung von Ionen- und Neutralteilchenverteilungsfunktionen hinter einer Plasmarandschicht	220
B	Inhaltsverzeichnis des PT-Grid-Wikis	221
C	Inhaltsverzeichnis des PT-Grid-Portal-Wikis	227

Abbildungsverzeichnis

1	Projektstruktur des Plasma-Technologie-Grids	21
2	Allgemeiner Arbeitsablauf im Plasma-Technologie-Grid bestehend aus Pre-processing (links), Solver (mittig) und Postprocessing (rechts)	34
3	Allgemeiner Arbeitsablauf im PT-Grid unter Berücksichtigung der beteiligten Grid-Dienste und der ablaufbedingten Wechselwirkungen	35
4	PT-Grid-Referenzsystem	37
5	Infrastruktur des PT-Grids 2012	41
6	Bildschirmaufnahme der Startseite des PT-Grid-Portals	48
7	Titelseite des Hilfe-Wikis des PT-Grid-Portals mit Zugang zu den Demonstratoren der Teilprojekte	49
8	Zweistufige Geschäftsorganisation zur nachhaltigen Grid-Bewirtschaftung .	51
9	Aktivitäten der Phase 1: Istaufnahme und -analyse	52
10	Aktivitäten der Phase 2: Gründungsplanung	57
11	Modell einer Wertkette nach Porter [2]	58
12	Aktivitäten der Phase 3: Abschließende Soll-Ist-Analyse	64
13	Workflow für ANSYS CFX	69
14	Architektur der Image Creation Station	73
15	Übersicht der Virtualisierungslösung	74
16	Anforderung des öffentlichen Teils eines SSH-Schlüssels	76
17	Erzeugung (a) und Verwaltung (b) von virtuellen Maschinen über die Webservice-Schnittstelle der Image Creation Station	77
18	Import von virtuellen Maschinen (links) und Statusnachrichten zur ICS (rechts) über die Webservice-Schnittstelle der ICS	78
19	Einbindung der ICS-Weboberfläche als Inlineframe in das PT-Grid-Portal des INP Greifswald	78
20	Netzwerkstruktur der CFX Berlin Software GmbH mit internem Netz und demilitarisierter Zone für die PT-Grid-Infrastruktur	80
21	Referenzinstallation bei der CFX Berlin Software GmbH ohne Virtualisierungslösung	81
22	Installation der ICS auf Rapidus02 der CFX Berlin Software GmbH	82
23	Referenzinstallation bei der CFX Berlin Software GmbH mit Virtualisierungslösung	82
24	Starten des Testfalls für eine serielle (a) und parallele (b) Berechnung . . .	84
25	Log-Datei der Xen Grid Engine für einen seriellen Job	84
26	PT-Grid-Rechencluster der Philipps-Universität Marburg	85

27	Integration der Virtualisierung in die PT-Grid-Architektur	86
28	Geometrie des Plasmabrenners in Teilprojekt 1	87
29	Randbedingungen und Materialien für den Plasmabrenner in Teilprojekt 1	88
30	Variierbare Parameter des Plasmabrenners in Teilprojekt 1	89
31	Geschwindigkeit (links) und Temperatur (rechts) für den Demonstrationsfall in Teilprojekt 1	89
32	Beschreibungsseite zum Teilprojekt 1 auf Wiki-Basis (a) und Überblicksseite zu den Simulationen (b)	90
33	Parameterfestlegung (a) und Auswertung (b) für den Demonstrationsfall des Teilprojektes 1 im Portal	91
34	Konfiguration des Plasmabrenners	100
35	Axiale Geschwindigkeit	100
36	Temperatur	100
37	Programmablauf für CFD-ACE+ mit entsprechender Erweiterung im Pre-processing im Teilprojekt 2	101
38	Beratungsmodell für wissenschaftlich-technische Modellrechnungen	103
39	Online-Beratungswerkzeug für Grid-basierte Entwicklungsunterstützung	103
40	Realisierung des PT-Grid-Servers und -Clusters am INP Greifswald	106
41	Referenzinstallation bei der ESI GmbH [P26]	107
42	PT-Grid-Lizenzserver	109
43	Workflow des ESI-Control-Lizenzsystems	111
44	Flowchart des ESI-Control-Lizenzsystems	112
45	Preis je Stunde als Funktion der CPU-Zeit verschiedener Module	114
46	Beispiel eines Abrechnungsblatts	115
47	Infrastruktur des PT-Grid-Portals (a) und PT-Grid-Portlet zur Jobsteuerung (b)	117
48	Arbeitsablauf Grid-basierter Modellrechnungen im Teilprojekt 2	120
49	Grid-basierte Modellrechnungen im Teilprojekt 2 aus Nutzersicht	120
50	Eingabemaske zur magnetohydrodynamischen Simulation	121
51	Start einer magnetohydrodynamischen Simulation	122
52	Skriptablauf einer magnetohydrodynamischen Simulation	122
53	Räumliche Variation der Temperatur in einem Plasmabrenner	123
54	Zeitliche Entwicklung verschiedener Teilchendichten in einem Luftplasma	125
55	Workflow für PIC-MC-Simulationen im Teilprojekt 3	129
56	PIC-MC-Programmarchitektur zu Beginn des Projekts PT-Grid	130

57	Konzept zur webbasierten Benutzerinteraktion mit der DSMC/PIC-MC-Gasfluss- und Plasmasimulation	132
58	Messung der Latenzzeiten beim Austausch einfacher Nachrichtenpakete für PVM und MPI in unterschiedlichen Aufrufszenarios	135
59	Messung der Gesamtrechenzeit für eine 2D-Plasmasimulation nach 0.1 μ s simulierter physikalischer Zeit mit 8 Parallelprozessen	136
60	Einstiegsseite der Benutzeroberfläche für PIC-MC-Simulationen mit einer Auswahl von Demomodellfällen (links) sowie Registerkarte zur Eingabe der Modellspezifikationen (rechts)	141
61	Für Grid-Benchmarks verwendetes DSMC-Modell einer Rohrströmung mit eingezeichneter Argon-Geschwindigkeitsverteilung	151
62	3D-Modell einer zirkularen Magnetron-Entladung	156
63	Gerechnetes Elektronendichteprofil bei 50 W Leistung nach 50 μ s mit sichtbaren Plasmafluktuationen	158
64	Modell des „Emerald Sputter Tools“ bei Osram Opto Semiconductor.	158
65	Zwei mögliche Magnetfeldkonfigurationen für das Sputtertarget (links) und berechnete radiale und vertikale Komponente der magnetischen Flussdichte (rechts)	159
66	Gerechnete Elektronendichteverteilungen für die Parametersätze in Tabelle 7161	
67	Zeitabhängiger Verlauf der Spannungsamplitude U_0 (links) und Ar^+ -Ionenenergie-Histogramme aus den Simulationsläufen für die Parametersätze in Tabelle 7	162
68	Prinzipieller Aufbau des Randschichtsimulators	167
69	Geometrieparameter (a) und Plasmaparameter (b) des Referenzreaktors	168
70	Programmablauf unter Verwendung von realen Messdaten aus Hercules® im Teilprojekt 4	169
71	Schema eines typischen Plasmareaktors im Teilprojekt 4	171
72	Ionenenergieverteilung für die Anregungsfrequenzen 2.56 MHz (links), 20.56 MHz (mittig) und 100 MHz (rechts)	174
73	Ionenenergieverteilung bei Variation der Masse von 2 bis 150 amu	175
74	Normierte Ionenenergieverteilung als Funktion der Ionenenergie in Abhängigkeit vom Druck	176
75	Normierte Ionenwinkelverteilung als Funktion des Winkels in Abhängigkeit vom Druck	176
76	Geschwindigkeitszuwachs in Abhängigkeit von der Anzahl der Prozesse	176
77	Parametereingabe im Portal in Teilprojekt 4	177

78	Jobsteuerung (links) und Visualisierung der Ausgabe (rechts) im Teilprojekt 4	178
79	Reaktorgeometrie (a) und numerisches Gitter (b) im Teilprojekt 4	178
80	Datenabbildung in das Modbus-Protokoll	180
81	Sensorschnittstelle mit Box	180
82	Portallösung für die Umsetzung des Randschichtmodells mit dem globalen Modell im Teilprojekt 4	181
83	Anbindung von CFD-ACE+ an den Randschichtsimulator	181
84	Implementierung von Toolparametern in die Auswertesoftware des Hercules [®] -Systems	182
85	Ansätze zur Kammer- und Prozesscharakterisierung	183
86	Schematische Darstellung zur Plasmabeschreibung durch Modelle	184
87	Gemessene (durchgezogene Linie) und modellierte (gestrichelte Linie) Io- nenenergieverteilung als Funktion der Ionenenergie	185
88	Randschichtmodellberechnung (durchgezogene Linie) und Particle-in-Cell- Simulation (gestrichelte Linie) der Spannungs-Ladungs-Kennlinie	185
89	Modulation der Ionendichte (links) und die Ionenenergieverteilung an der getriebenen Elektrode (rechts) aus dem analytischen Modell	185
90	Graphische Darstellung ausgewählter Parameter von CFD-ACE+ im Teil- projekt 4	186
91	Normierte Ionenenergieverteilung als Funktion der Ionenenergie	187
92	Normierte Ionenwinkelverteilung als Funktion des Eintreffwinkels	187
93	Ionenenergieverteilung für unterschiedliche Anregungsfrequenzen und Tast- verhältnisse	188
94	Arbeitsplanung im Bereich Projektleitung	214
95	Arbeitsplanung für die informationstechnische Infrastruktur	215
96	Arbeitsplanung für die Konkretisierung des Geschäftsmodells	216
97	Arbeitsplanung für Teilprojekt 1	217
98	Arbeitsplanung für Teilprojekt 2	218
99	Arbeitsplanung für Teilprojekt 3	219
100	Arbeitsplanung für Teilprojekt 4	220

Tabellenverzeichnis

1	Zusammenstellung der wichtigsten wissenschaftlich-technischen Ereignisse innerhalb der Projektlaufzeit	24
2	Zusammenstellung der Veranstaltungen im Rahmen des D-Grids mit PT-Grid-Beteiligung innerhalb der Projektlaufzeit	27
3	Anforderungen der Aktivität „Beschaffung“ an das Geschäftsmodell	59
4	Ergebnisse der Laufzeittests des Programms mpitest auf unterschiedlichen Grid-Ressourcen	150
5	Ergebnisse der Laufzeittests auf unterschiedlichen Grid-Ressourcen für das DSMC-Modell in Abbildung 61	152
6	Mögliche Adapter-Ausstattungsmerkmale und zugehörige Shell-Skripte . . .	154
7	In der Simulation untersuchten Parametersätze der „Design-of-Experiments“-Studie	160

Verzeichnis der Programmausdrucke

1	PBS-Submit-Skript für das Testprogramm mpitest	142
2	Demonstration eines parallelen Job-Submits auf einer D-Grid-Ressource mittels GSISSH/GSISCP und eines PBS-Skripts	143
3	Dateiinhalte zur Spezifikation MPI-parallele Jobs	144
4	RSL-Datei und Shellskript zum Aufruf des Programms mpitest via <code>globusrun-ws</code>	145
5	Beispielsession auf dem D-Grid-Rechner der Universität Mannheim	146
6	PBS-Submit-Skript zur Durchführung der 3D-PIC-MC-Simulation einer 3"-PVD-Entladung	156

1 Aufgabenstellung

Die Plasmatechnologie (PT) verfügt als Schlüsseltechnologie mit ausgesprochenem Querschnittscharakter über eine breites Anwendungsspektrum und ist für die Prozess- und Verfahrenstechnik von wesentlicher Bedeutung. Lichtbogenplasmen werden beispielsweise in Schaltstrecken, zum Schneiden und zum Schweißen eingesetzt. Plasmaquellen werden zur Oberflächenmodifizierung verwendet, wie z. B. zum Plasmaätzen, zur Plasmabehandlung und Dünnschichtabscheidung. Weitere Anwendungen betreffen Plasmastrahlungsquellen und -lampen, die Medizintechnik und die Halbleiterindustrie.

Im Bereich der Plasmatechnologie kommt der Modellierung von Plasmaquellen und -reaktoren eine zentrale Bedeutung zu. Auf der Grundlage umfangreicher Parameterstudien ermöglichen Modellrechnungen und Simulationen sowohl die gezielte Optimierung technologischer Plasmen als auch die Entwicklung neuer Anwendungen. Die flexible Nutzung von Ressourcen des D-Grids bot hierbei erhebliche Potentiale für eine anwenderfreundliche Auftrags- und Grundlagenforschung.

Die Aufgabenstellung des Plasma-Technologie-Grids (kurz PT-Grid) bestand darin, ein praxisorientiertes Online-Beratungswerkzeug zu etablieren, das eine Grid-basierte Modellierung und Simulation von plasmatechnologischen Anwendungen ermöglicht. Für die Anwender plasmatechnischer Modelle aus Industrie und Wissenschaft sollten eine nutzerfreundliche Bedienoberfläche und eine industrietaugliche Sicherheitsarchitektur bereitgestellt werden, die auf etablierten Diensten des D-Grids basieren und die vertragsgebundene Nutzung der Grid-Infrastruktur ermöglichen. Plasmatechnische Modellrechnungen aus der wissenschaftlichen Forschung sollten so direkt vom Arbeitsplatz aus durchgeführt und gesteuert werden können, um Parameterstudien zur Optimierung bzw. Entwicklung neuer Anwendungen auf D-Grid-Ressourcen auszuführen.

2 Voraussetzungen

Das Projekt erfolgte im Rahmen der Förderbekanntmachung „Grid-Dienste für Wirtschaft und Wissenschaft“ im Förderprogramm „IKT2020 - Forschung für Innovationen“ und hatte eine Laufzeit von drei Jahren (01.05.2009 bis 30.04.2012). Ziel der gesamten Projektförderung der D-Grid-Initiative, die im Jahre 2005 begann, ist die Vereinfachung des Einsatzes von Diensten und Ressourcen der Informationstechnik (IT) in Wissenschaft und Wirtschaft durch Verwendung der Grid-Technologie.

Im Rahmen der Vorbereitung des Projektantrages wurde deutlich, dass die Durchführung des Projektes einer interdisziplinären Zusammenarbeit von Partnern aus den Bereichen Plasmaphysik und -technologie, Informationstechnik und Wirtschaftswissenschaften bedarf und dass eine Kooperation von Partnern aus der Industrie und der Wissenschaft notwendig ist. Für die Zusammensetzung der Projektpartner galt, dass keiner der Partner das Thema alleine würde bearbeiten können und dass die Partner gewinnbringend zusammenarbeiten können.

Jeweils ein Partner aus dem universitären Bereich (Lehrstuhl für Theoretische Elektrotechnik der Ruhr-Universität Bochum), aus der Leibniz-Gemeinschaft mit wissenschaftlichem und industriellem Aufgabenfeld (Leibniz-Institut für Plasmaforschung und Technologie e.V. (INP) in Greifswald) sowie ein Partner mit starkem Industriefokus aus der Fraunhofer-Gesellschaft (Fraunhofer-Institut für Schicht- und Oberflächentechnik (IST), Braunschweig) wurde als plasmatechnischer Berater integriert. Als kommerziell arbeitender plasmatechnischer Berater konnte der Simulationsdienstleister und Softwaredistributor CFX Berlin Software GmbH gewonnen werden. Die Entwicklung der informationstechnischen Infrastruktur für die Plasmatechnologie übernahm federführend das Institut für Roboterforschung der Technischen Universität Dortmund. Teilaufgaben wurden unter anderem vom Grid-erfahrenen Projektpartner GNS Systems GmbH übernommen. Zudem wurde das Projekt durch den kommerziell arbeitenden Simulationsdienstleister und Softwarehersteller Engineering Systems International GmbH (ESI), Essen sowie den Fachbereich Wirtschaft der Fachhochschule Stralsund unterstützt. Als geförderter Pilotanwender nahm die Plasmetrex GmbH, Berlin am Vorhaben teil.

Die zehn assoziierten Projektpartner (Ernst-Moritz-Arndt-Universität Greifswald, Rechenzentrum; Euroglas GmbH, Haldensleben; EWM Hightec Welding GmbH, Mündersbach; Kjellberg Finsterwalde Plasma und Maschinen GmbH; Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin; Leybold Optics GmbH, Alzenau; Linde AG, Unterschleißheim; Max-Planck-Institut für Plasmaphysik, Teilinstitut Greifswald; Technische Universität Dresden; VON ARDENNE Anlagentechnik GmbH, Dresden) waren strategische Partner beim Aufbau des Plasma-Technologie-Grid oder Unternehmen, die an der kom-

merziellen Nutzung der PT-Grid-Infrastruktur interessiert und Kunden der beteiligten plasmatechnischen Berater sind. Als Unterauftragnehmer unterstützte die neoplas GmbH, Greifswald das Projekt u.a. hinsichtlich Marketing, Webdesign und -programmierung. Die Grid-erfahrenen Unterauftragnehmer Fachbereich Mathematik und Informatik der Philipps-Universität Marburg und onscale GmbH brachten ihre Kompetenzen hinsichtlich Virtualisierung bzw. Datenmanagement bei der Entwicklung der informationstechnischen Infrastruktur ein.

Im Folgenden werden die geförderten Projektpartner kurz vorgestellt.

2.1 Leibniz-Institut für Plasmaforschung und Technologie e.V.

Das Leibniz-Institut für Plasmaforschung und Technologie e.V. (INP Greifswald, gegründet 1992) ist Mitglied der Leibniz-Gemeinschaft und europaweit die größte außeruniversitäre Forschungseinrichtung zu Niedertemperaturplasmen, deren Grundlagen und technologischen Anwendungen. Ziel ist einerseits die anwendungsorientierte Grundlagenforschung und andererseits die Optimierung sowie Entwicklung etablierter plasmagestützter Verfahren und Produkte. Dies wird ergänzt durch die Anpassung von Plasmen an kundenspezifische Einsatzbedingungen sowie Machbarkeitsstudien, Serviceleistungen und Beratung. Das Institut betreibt Forschung und Entwicklung von der Idee bis zum Prototyp, die Themen orientieren sich an den Bedürfnissen des Marktes. Derzeit stehen Oberflächen und Materialien, Umwelt- und Energietechnik sowie interdisziplinäre Themen in Biologie und Medizin im Mittelpunkt des Interesses. Im Bereich der Plasmamodellierung werden Modelle und Simulationen zum technologischen und wissenschaftlichen Nutzungspotential anisothermer und thermischer Plasmen entwickelt. Der Fokus liegt hierbei auf Plasmaquellen zur Oberflächenbearbeitung und -beschichtung, Plasmastrahlungsquellen und -lampen sowie Lichtbogenplasmen in Schaltstrecken, zum Schneiden und zum Schweißen.

2.2 Technische Universität Dortmund, Institut für Roboterforschung

Das Institut für Roboterforschung, Abteilung Informationstechnik (IRF-IT) der Technischen Universität Dortmund betreibt seit Jahren Forschung im Bereich des Resource Managements für service-orientierte Architekturen mit besonderem Schwerpunkt auf Grid- und Cloud-Infrastrukturen und entwickelt in diesem Kontext verteilte Verfahren für das Scheduling in solchen Umgebungen. Das IRF-IT war am C3Grid und am HEP-CG-Projekt im D-Grid beteiligt und entwickelte dort communityspezifische Lösungen für koordiniertes Workflow-Scheduling und Koallokation von Rechen- und Datenressourcen. Zudem war

das IRF-IT maßgeblich an der Entwicklung der D-Grid-Referenzinstallation in Dortmund beteiligt und war zudem im DGI-Projekt (1. Phase) und im DGSI-Projekt aktiv. Im europäischen Kontext ist das IRF-IT am CoreGrid Network of Excellence federführend im „Virtual Institute on Resource Management und Scheduling“ beteiligt, welches sich unter anderem auch mit der Planung von föderierten Ressourcenverbänden befaßt. Das IRF-IT ist im Kontext der Standardisierung auf internationaler Ebene in mehreren Gruppen des Open Grid Forum - zum Teil in leitender Position - beteiligt

2.3 Fachhochschule Stralsund, Fachbereich Wirtschaft

Der Fachbereich Wirtschaft der Fachhochschule Stralsund befasst sich unter anderem mit Fragen der Unternehmensgründung, -führung und -planung in allen organisatorischen, rechtlichen und personellen Aspekten. Ein Schwerpunkt ist der Transfer von betriebswirtschaftlichem Wissen, speziell ausgerichtet auf kleine und mittelständische Unternehmen, in die Region sowie die Unterstützung von Ausgründungen. Hierzu wurden die „Gründerlehre“ institutionalisiert sowie zahlreiche Netzwerke gebildet.

2.4 Ruhr-Universität Bochum, Lehrstuhl für Theoretische Elektrotechnik

Der Lehrstuhl für Theoretische Elektrotechnik an der Ruhr-Universität Bochum (TETRUB) ist Mitglied des Research Department „Plasmas with Complex Interactions“ an der Ruhr-Universität und damit Teil eines der wichtigsten plasmatechnischen Forschungszentren in Deutschland. Neben der Modellierung und Simulation verschiedener technischer Plasmen, wie zum Beispiel Mikroplasmen bei Atmosphärendruck oder magnetisierten Plasmen, ist ein wichtiger praxisrelevanter Arbeitsbereich die Modellierung und Simulation von plasmabasierten Produktionsverfahren der Mikroelektronik.

2.5 Fraunhofer-Institut für Schicht- und Oberflächentechnik

Das Fraunhofer-Institut für Schicht- und Oberflächentechnik (IST Braunschweig) bündelt Kompetenzen auf den Gebieten Schichtherstellung und -analyse mit Schwerpunkt plasmaunterstützter Verfahren, insbesondere dem Magnetron-Sputtern, für Anwendungen z.B. im Bereich Architekturglas und Solarzellenherstellung. Es werden atomistische Modelle für Niederdruck-Gasströmungen und Plasmaentladungen entwickelt.

2.6 CFX Berlin Software GmbH

Die CFX Berlin Software GmbH (gegründet 1997) ist Dienstleister für Strömungssimulation mit Wärmeübergängen auf der Basis von ANSYS CFX und Software distributor von ANSYS-Produkten. ANSYS CFX wird unter anderem zur Simulation von Metall- und Wolframschutzgasschweißen, Plasmaschneiden, -schweißen und -spritzen und von Schaltlichtbögen eingesetzt.

2.7 Engineering System International GmbH

Die Engineering Systems International (ESI) GmbH ist ein Tochterunternehmen der ESI Group (gegründet 1973). ESI Group ist ein Softwareentwickler und Dienstleister im Bereich der numerischen Simulation von technischen Vorgängen in der Prototypen- und Prozessentwicklung. Mit CFD-ACE+ bietet ESI eine Softwarelösung für plasmatechnologische Anwendungen an.

2.8 GNS Systems GmbH

Die GNS Systems GmbH (1999 gegründet) ist eine Tochterfirma der Gesellschaft für numerische Simulation mbH (1995 gegründet). Im Bereich High Performance Computing hat sich GNS Systems auf die Installation und Betreuung von Compute Clustern sowie auf Grid-Computing spezialisiert. Die GNS Systems GmbH und die GNS GmbH waren Partner im PartnerGrid.

2.9 Plasmetrex GmbH

Die Plasmetrex GmbH (gegründet 2006) ist ein Service- und Equipmentprovider für die Halbleiterindustrie, Mikrosystemtechnik und Photovoltaik. Schwerpunkte sind Plasmaprozess-Monitoring mit dem robusten und vollautomatisierten Messsystem Hercules[®], Consulting zu Plasmaprozessen und Qualifikationsmaßnahmen für Prozessingenieure (Plasmaphysik, Prinzipien der Plasmaätz- und Abscheidungsanlagen, Plasmaprozesse und deren Charakterisierung, HF-Technik und deren industrielle Anwendung in der Halbleiterindustrie).

3 Wissenschaftlicher und technischer Stand

Die beteiligten Institute der Plasmatechnologie befassen sich mit der Modellierung (und der Diagnostik) von Plasmen und deren Anwendungen unter Berücksichtigung von technischen und wissenschaftlichen Fragestellungen. Grundlage der Modellrechnungen sind Gleichungssysteme der Strömungsmechanik, Elektrotechnik, Magnetohydrodynamik und kinetischen Gastheorie. Die Plasmamodellierung erfolgt mit hauseigenen Programmen auf der Basis von Programmiersprachen wie C++ und Fortran, mit kommerziellen Tools wie ANSYS (Fluent, CFX) und CFD-ACE+ oder mit kommerziellen Softwarewerkzeugen, die durch eigene Programmpakete ergänzt werden. Je nach Anwendungsgebiet, Aufgabenstellung und zugrundeliegendem mathematisch-numerischem Modell ist die Software für paralleles Rechnen vorbereitet. Die Nutzung der erstellten Modelle und der zugehörigen kommerziellen oder eigenen Software ist in der Regel nur durch hochspezialisiertes Personal möglich.

Für plasmaphysikalische Simulationen wurden vor Projektbeginn im Wesentlichen hauseigene Rechnernetzwerke, in Einzelfällen auch die zur Verfügung stehenden Ressourcen der Hochschulrechenzentren eingesetzt. Da weder die wissenschaftlich institutsinternen noch die kommerziell eingesetzten Softwarepakete für eine breite wissenschaftliche oder industrielle Grid-Nutzung ausgelegt waren, fand eine Nutzung von Grid-Ressourcen nicht statt. Sie sollte sowohl den plasmatechnischen Beratern als auch Kunden aus der Industrie und wissenschaftlichen Anwendern durch das Verbundprojekt nahegebracht werden. Hierbei war unter anderem auch zu eruieren und evaluieren, inwieweit die seit 2005 im Rahmen der Förderinitiative D-Grid etablierte Infrastruktur auf eine kommerzielle Nutzung ausgelegt und ausgerichtet ist.

Typische Beratungsleistungen im Bereich der Plasmamodellierung bestehen aus wissenschaftlich-technischen Ergebnissen, die mit hauseigenen und/oder kommerziellen Softwarepaketen unter Nutzung eigener oder externer Daten bestimmt werden. Sie umfassen unter anderem die Erstellung von Plasmamodellen, eine auftragsbezogene Untersuchung der Plasmaphänomene und die Optimierung von Prozessen oder Anlagen. Das Arbeitsergebnis wird in Form eines Beratungsberichtes, der auf den zum Auftragszeitpunkt bekannten wissenschaftlich-technischen Produktcharakteristika basiert, an den Auftraggeber weitergegeben und aufwandsbezogen bzw. pauschal abgerechnet.

Für eine innovative und nachhaltige Unterstützung der Entwickler plasmatechnologischer Anwendungen sollte somit ein Servicepaket, das sogenannte Online-Beratungswerkzeug, zur Verfügung gestellt werden, das einen wissenschaftlich-technischen Berater in die Lage versetzt, alle Leistungen aus einer Hand anzubieten, die zur Nutzung des Grid-basierten Plasmamodells notwendig sind. Dem Anwender plasmatechnischer Mo-

delle aus Industrie und Wissenschaft sollte damit ein Produkt zur Verfügung stehen, das er aus einer Hand bezieht. Es sollte sich durch eine nutzerfreundliche Bedienoberfläche und eine industrietaugliche Sicherheitsarchitektur auszeichnen, die auf etablierten Diensten des D-Grids basiert und die vertragsgebundene Nutzung der Grid-Infrastruktur ermöglicht. Modellrechnungen sollten vom Kunden so direkt vom Arbeitsplatz aus durchgeführt und gesteuert werden können, um Parameterstudien zur Optimierung bzw. Entwicklung neuer Anwendungen auf Ressourcen des D-Grids auszuführen. Fachliche Fragen z. B. zur Informationstechnik und Plasmamodellierung sowie rechtliche Fragen hinsichtlich Gewährleistung, Haftung, Lizenzen usw. sind vorab geklärt. Für eine nachhaltige Verwertung der Ergebnisse waren neben organisatorischen und rechtlichen Aspekten auch die betriebswirtschaftlichen Kenngrößen für das Online-Beratungswerkzeug zu ermitteln, um ein akzeptiertes Kosten-Nutzen-Verhältnis bei allen Beteiligten zu erreichen.

4 Planung und Ablauf des Vorhabens

Das Verbundprojekt „PT-Grid - Plasma-Technologie-Grid“ war auf eine Laufzeit von 3 Jahren ausgelegt und wurde am 01.05.2009 begonnen. Es zielte auf eine große Anwendungsbreite und nachhaltige Nutzung der realisierten Grid-Dienstleistungen. Die Projektstruktur ist in Abbildung 1 dargestellt.

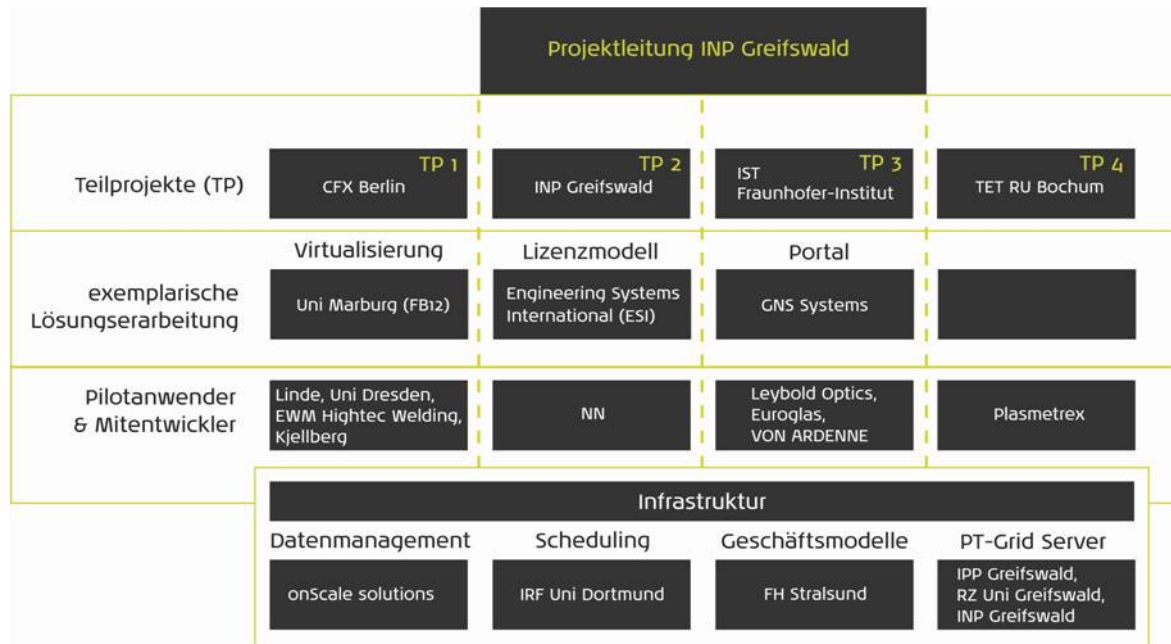


Abbildung 1: Projektstruktur des Plasma-Technologie-Grids

Die Gesamtprojektleitung wurde vom INP Greifswald übernommen. Neben der Projektkoordination war sie verantwortlich mit der Sicherstellung der D-Grid-Integration der PT-Grid-Infrastruktur und des Online-Beratungswerkzeuges, der Entwicklung und Umsetzung eines Geschäftsmodells für das PT-Grid, der Schulung der Projektteilnehmer und der Kooperation mit den D-Grid-Projekten befasst.

Das PT-Grid-Projekt bestand aus vier Teilprojekten, in denen im Allgemeinen jeweils ein plasmatechnischer Berater, die notwendigen Partner aus dem Bereich der Informationstechnik und einer oder mehrere Pilotanwender aus der Industrie oder Wissenschaft integriert waren, die Interesse an einer späteren kommerziellen Nutzung der Projektergebnisse hatten. Ausgangspunkt der Teilprojekte war jeweils ein industriell oder wissenschaftlich genutztes plasmatechnisches Modell, das zur Optimierung von plasmatechnischen Anlagen und Verfahren entwickelt wurde und im Rahmen des Projektes auf die Anwendung in einer Grid-Infrastruktur vorbereitet wurde.

Das Teilprojekt 1, geleitet durch CFX Berlin Software GmbH, beinhaltete die Simulation von Schweiß- und Schneidprozessen mit der kommerziellen Software ANSYS CFX,

die durch Virtualisierung gridfähig gemacht wurde. Die exemplarische Lösungserarbeitung zur Virtualisierung sollte im Unterauftrag erfolgen. Dieser Unterauftrag war im Zuwendungsbescheid des INP Greifswald vom 15.06.2009 mit einer Auszahlungssperre versehen, deren Aufhebung an die Vorlage eines Berichtes zur Virtualisierung geknüpft war, der die bestehenden Virtualisierungssysteme evaluieren und das beste System identifizieren sollte. Nach Vorlage des von der CFX Berlin Software GmbH mit Unterstützung durch das INP Greifswald und das Institut für Roboterforschung der Technischen Universität Dortmund erstellten Berichtes „Evaluierung der Virtualisierungslösungen XenBEE und XGE für die Anwendung im Plasma-Technologie-Grid“ vom 30.09.2009, der die Virtualisierungsmethoden Xen-Based Execution Environment (XenBEE) des Fraunhofer- Instituts für Techno- und Wirtschaftsmathematik in Kaiserslautern und Xen Grid Engine (XGE) der Philipps-Universität Marburg vergleicht und die Lösung XGE für das PT-Grid-Projekt als besser geeignet erwies, wurde die Sperre der Mittelvergabe aufgehoben und der Unterauftrag an die Philipps-Universität Marburg erteilt. Als Pilotanwender und Mitentwickler unterstützen einige assoziierte Projektpartner das Teilprojekt. Das Teilprojekt wirkte unterstützend bei der Entwicklung und Einführung eines Grid-basierten Online-Beratungswerkzeuges und bei der Entwicklung eines Geschäftsmodells für das PT-Grid mit.

Im vom INP Greifswald geleiteten Teilprojekt 2 wurde die magnetohydrodynamische Simulation von Plasmabrenneranwendungen im Grid etabliert. Das vorab erstellte Plasmamodell sollte beispielhaft für die Nutzung kommerzieller Softwaretools Grid-tauglich gemacht und auf den Servern des PT-Grids installiert werden sowie Pilotanwendern zur Unterstützung ihrer Entwicklungstätigkeit zur Verfügung gestellt werden. Schwerpunkte der Arbeiten waren die Erarbeitung und Realisierung eines Online-Beratungswerkzeuges inklusive Schnittstelle zwischen einheitlicher PT-Grid-Bedienoberfläche und der kommerziellen Software CFD-ACE+ der ESI GmbH, die Adaption von CFD-ACE+ an das PT-Grid-Portal, die Erarbeitung eines Lizenzmodells sowie der Aufbau und die Integration eines D-Grid-fähigen Lizenzservers für CFD-ACE+. Die exemplarische Lösungserarbeitung zum Lizenzmodell erfolgte hierbei federführend durch den geförderten Teilprojektpartner ESI GmbH. Ein weiteres Ziel bestand in der Unterstützung bei der Erarbeitung eines nachhaltigen und tragfähigen Geschäftsmodells des PT-Grid-Projektes.

Das Fraunhofer-Institut für Schicht- und Oberflächentechnik leitete das Teilprojekt 3, das die PIC-MC-Simulation von Niederdruck-Plasmaentladungen in Beschichtungsanlagen umfasste. Das Teilprojekt zielte auf die Integration der in früheren Projekten erstellten PIC-MC-Software für parallele Gasfluss- und Plasmasimulation in die D-Grid-Infrastruktur, die Erstellung einer auf Grid-Services basierten Benutzeroberfläche zur Öffnung der Simulationsumgebung für industrielle Anwender und die Durchführung von Si-

mulationsrechnungen im Bereich des Anlagenbaus und der Prozessentwicklung zusammen mit industriellen Pilotanwendern. Die Lösungserarbeitung für das Portal sowohl des Teilprojektes 3 als auch des gesamten PT-Grid-Projekts sollte durch den geförderten Teilprojektspartner GNS Systems GmbH erfolgen. Einige assoziierte Projektpartner unterstützten das Teilprojekt als Pilotanwender.

Das Teilprojekt 4 befasste sich mit der selbstkonsistenten kinetischen Berechnung von Ionen- und Neutralteilchenverteilungsfunktionen hinter einer Plasmarandschicht. Es wurde durch den Lehrstuhl für Theoretische Elektrotechnik der Ruhr-Universität Bochum geleitet, der gemeinsam mit den weiteren geförderten Partnern ESI GmbH und Plasmetrex GmbH dieses Teilprojekt umsetzte. Das Teilprojekt beinhaltete die Etablierung eines Online-Beratungswerkzeuges, das den Pilotanwender Plasmetrex GmbH und weitere potentielle Nutzer des PT-Grids in die Lage versetzt, ein validiertes Modell einer hochfrequenzmodulierten Plasmarandschicht für die jeweiligen Plasmazustände und Anwendungsbereiche optimal einzusetzen und seine Ergebnisse für die technisch-physikalische Optimierung von Plasmaprozessen zu nutzen. Das Simulationswerkzeug besteht aus dem Randschichtmodell selbst sowie drei alternativen Methoden zur Ermittlung des Betriebszustand des Plasmas: einem globalen Modell des Lehrstuhls für Theoretische Elektrotechnik, dem hydrodynamischen Simulationscode CFD-ACE+ der ESI GmbH und dem Plasmametrolgiesystem Hercules[®] der Plasmetrex GmbH. Die drei Methoden erlauben es, grundlegende wissenschaftliche Aussagen zu treffen (globales Modell), einen Plasmaprozess industrierelevant zu simulieren (CFD-ACE+) oder die durch eine prozessbegleitende Messung gewonnenen Daten (Hercules[®]) zu verwerten.

Für die Bereitstellung einer wirtschaftlich verwertbaren Plattform für Beratungsleistungen im Umfeld der Plasmatechnologie war die Planung und Umsetzung einer nachhaltigen informationstechnischen Infrastruktur für das PT-Grid auf Grundlage vorhandener, etablierter Technologien notwendige Voraussetzung. Der Entwurf eines umfassenden IT-Gesamtkonzeptes, die Beratung der fachlichen Projektpartner bei der Bereitstellung geeigneter Ressourcen nach den Vorgaben des D-Grids sowie Anpassung und Bereitstellung einer Lösung für Grid-Scheduling wurden federführend vom Institut für Roboterforschung der Technischen Universität Dortmund durchgeführt. Die Anpassung und Bereitstellung einer Lösung für Grid-Datenmanagement erfolgte über einen Unterauftrag durch die onScale solutions GmbH. Für den exemplarischen Entwurf einer PT-Grid-Portallösung zeichnete die GNS Systems GmbH verantwortlich.

Um die nachhaltige Verwertung der im Projekt entwickelten PT-Grid-Ressourcen und -dienstleistungen (Online-Beratungswerkzeug) zu erreichen, war ein Geschäftsmodell auf der Basis der bei den Projektpartnern vorhandenen technischen, finanziellen, personellen

und marktorientierten Voraussetzungen zu konkretisieren und auf der Basis der Erkenntnisse aus der Pilotphase umzusetzen. Die Konkretisierung des Geschäftsmodells (Erfassung der Kenndaten und Erarbeitung von Schlussfolgerungen) unter Berücksichtigung der Charakteristika der beteiligten Projektpartner wurde vom Fachbereich Wirtschaft der Fachhochschule Stralsund durchgeführt.

Die Projektplanung für die Projektleitung, die informationstechnische Infrastruktur, die Konkretisierung des Geschäftsmodells und die vier Teilprojekte mit der Verteilung der Arbeitspakete auf die 36 Monate Projektlaufzeit und den Meilensteinen ist im Anhang A dargestellt. Sie entspricht der im Projektantrag ausgewiesenen Planung. Die Meilensteine wurden im Allgemeinen erreicht, zum Teil mit zeitlichem Verzug. Somit war es möglich, eine innovative Infrastruktur für die Plasmatechnologie bereitzustellen, wobei unter anderem Grid-Knoten am INP Greifswald und bei Projektpartnern installiert wurden. Ein gemeinsames Portal dient als Benutzerschnittstelle. In den vier Teilprojekten wurde das Online-Beratungswerkzeug exemplarisch umgesetzt. Die Demonstratoren sind im Internet unter <http://portal.inp-greifswald.de> erreichbar. Jedoch ist die geplante Gründung einer Verwertungsorganisation für das PT-Grid weiterhin offen, da die Rahmenbedingungen für die Verwertung nicht gegeben sind und die öffentlich geförderten Rechenressourcen des D-Grids nicht für kommerzielle Zwecke verwendet werden dürfen. Die halbjährlichen Zwischenberichte der geförderten Projektpartner und Sachberichte des Projektkoordinators sowie die eingehende Darstellung der erzielten Ergebnisse im Rahmen dieses Schlussberichtes enthalten eine detaillierte Beschreibung.

Die erreichten Ergebnisse wurden auf den Projekttreffen des PT-Grids vorgestellt, auf nationalen und internationalen Tagungen und Workshops präsentiert und in Zeitschriftenbeiträgen veröffentlicht. In Tabelle 1 sind die wichtigsten wissenschaftlich-technischen Ereignisse innerhalb der Projektlaufzeit zusammengestellt.

Tabelle 1: Zusammenstellung der wichtigsten wissenschaftlich-technischen Ereignisse innerhalb der Projektlaufzeit

Datum	Ort	Anlass
17.-18.06.2009	Greifswald	1. PT-Grid-Projekttreffen
18.-19.06.2009	Greifswald	1. PT-Grid-Schulung: Systemarchitektur und Installation
07.08.2009	Greifswald	Projektinterner Workshop zur Anwendung des Grid Workflow Execution Services
07.10.2009	Berlin	Projekttreffen des Teilprojektes 1

Fortsetzung auf nächster Seite

Datum	Ort	Anlass
07.-08.12.2009	Dortmund	Teilprojektleitertreffen zur IT-Konzeption
26.01.2010	Berlin	2. PT-Grid-Projekttreffen
22.-24.03.2010	Dresden	Teilnahme am 3. D-Grid All-Hands-Meeting
07.07.2010	Braunschweig	3. PT-Grid-Projekttreffen
08.07.2010	Braunschweig	2. PT-Grid-Schulung: Portlet-Programmierung (Workshop „Applikationsintegration“)
07.08.2010	Bochum	Projekttreffen des Teilprojektes 4
13.08.2010	Greifswald	Projektinterner Workshop „Greifswalder PT-Grid-Server“
04.10.2010	Paris	Teilnahme am internationalen Workshop „Plasma data exchange project“ im Rahmen der ICRP-7/SPP-28/GEC-63
16.-17.12.2010	Stralsund	Projektinterner PT-Grid-Workshop „Verwertung“
03.-04.03.2011	Berlin	Arbeitstreffen zur IT-Konzeption
31.03.2011	Kiel	Symposium Plasmatechnologie-Grid (SYPG) im Rahmen der DPG-Frühjahrstagung der Fachverbände Plasmaphysik und Kurzzeitphysik
20.-21.07.2011	Berlin	4. PT-Grid-Projekttreffen
01.11.2011	Berlin	Teilnahme an der Veranstaltung „Cloud Computing - Chancen und Risiken“ der TU Berlin
21.-22.02.2012	Greifswald	PT-Grid-Abschlussprojekttreffen
12.-16.03.2012	Stuttgart	Teilnahme an der DPG-Frühjahrstagung der Sektion AMOP
20.03.2012	Bonn	Gemeinsamer Workshop der Projekte MoS-Grid, OptiNum-Grid und PT-Grid „Simulationsservices für Industrie und Wissenschaft: Chemie, Plasmen und Mechatronik“ im Rahmen der Ergebniskonferenz des D-Grids
20.03.2012	Bonn	Workshop „PT-Grid - PT-Grid-Services für Wissenschaft und Industrie“ im Rahmen der Ergebniskonferenz des D-Grids
30.3.2012	Dresden	Abschlusstreffen des Teilprojektes 1

Zur Koordination des Verbundprojektes, zur Diskussion aktueller Themen, zur Information der Projektpartner über beispielsweise die Ergebnisse projektrelevanter Workshops anderer D-Grid-Projekte und zur Steuerung des Projektfortschritts wurden monatlich Webkonferenzen mit WebEx™ durchgeführt, an denen die geförderten Partner und Unterauftragnehmer regelmäßig und die assoziierten Partner optional teilnahmen. Das Management innerhalb der einzelnen Projektteile (Projektleitung, IT, Geschäftsmodell, Teilprojekte) lag jeweils beim verantwortlichen Projektpartner.

Der BSCW-Server <http://bscw.uni-duisburgessen.de/bscw/bscw.cgi/> wurde als Kommunikationsinfrastruktur zur Dokumentenablage innerhalb des PT-Grids verwendet. Interne Berichte, Protokolle und Präsentationen des PT-Grids wurden dort abgelegt und standen den Projektpartnern unmittelbar zur Verfügung. Die Dokumentation für den Auf- und Ausbau der PT-Grid-Infrastruktur erfolgte im PT-Grid-Wiki <http://forge.it.irf.uni-dortmund.de/trac/ptgrid/wiki>.

5 Zusammenarbeit mit anderen Stellen

Neben der engen Zusammenarbeit zwischen den Projektpartnern erfolgten umfangreiche Diskussionen und Erfahrungsaustausche mit einer Reihe anderer Projekte der D-Grid-Initiative, wie z. B. den Projekten BWGrid, DGSI, MoSGrid, OptiNum-Grid, PartnerGrid und SLA4D-Grid. Die Tabelle 2 gibt einen Überblick über Veranstaltungen des D-Grids mit Beteiligung des PT-Grids. Die Projektleitung bzw. -koordination des PT-Grids nahm zudem regelmäßig an den Treffen des D-Grid-Beirates teil.

Tabelle 2: Zusammenstellung der Veranstaltungen im Rahmen des D-Grids mit PT-Grid-Beteiligung innerhalb der Projektlaufzeit

Datum	Ort	Anlass
04.05.2009	Sankt Augustin	D-Grid-Workshop „Software-Lizenzmanagement in Grid Umgebungen“
25.06.2009	Dortmund	D-Grid-Workshop „Geschäftsmodelle im D-Grid“
03.09.2009	Bonn	1. SLA4D-Grid Workshop
21.09.2009	Göttingen	GapSLC-Workshop
15.-16.10.2009	Göttingen	4. D-Grid Security Workshop
26.11.2009	Göttingen	OptiNum-Grid-Workshop zu numerischen Simulationen im D-Grid
28.01.2010	Erlangen	OptiNum-Grid-Workshop zu Virtualisierung im D-Grid
22.-24.03.2010	Dresden	3. D-Grid All-Hands-Meeting
04.05.2010	Berlin	2. SLA4D-Grid Workshop
20.12.2011	Karlsruhe	D-Grid-Nachhaltigkeitsworkshop
19.-21.03.2012	Bonn	Ergebniskonferenz des D-Grids

Durch das Leibnizrechenzentrum München erfolgte nach einer Einweisung in die Middleware Globus Toolkit inklusive Installation, Kommandos und praktischer Arbeit zu Projektbeginn kontinuierliche Beratung während der Projektlaufzeit.

Im Rahmen der Anpassung und Integration des existierenden C3Grid Workflow Scheduling Service (C3WSS) wurde verstärkt mit Entwicklern aus dem C3Grid-Projekt zusammengearbeitet, um eine Codebase¹ zu erreichen, die in beiden Projekten eingesetzt werden konnte. Zudem wurden die im Projekt WissGrid entwickelten Konzepte zur Er-

¹Gesamter Quelltext einer Anwendung

stellung eines Softwaremanagementprozesses für die konkrete Umsetzung eines entsprechenden Prozesses und Releaseplans im PT-Grid verwendet.

Mit den kommerziellen Ressourcenanbietern GWDG² und T-Systems SfR GmbH wurden Gespräche über die Bereitstellung ihrer Ressourcen für kommerzielle Anwendungen durchgeführt.

Im Laufe des Projektes entwickelten sich im Rahmen des Teilprojektes 4 zudem Kooperationen mit Lehrstühlen innerhalb der Ruhr-Universität Bochum, insbesondere mit der Arbeitsgruppe „Physik reaktiver Plasmen“. Darüber hinaus konnte mit der Robert Bosch GmbH ein Interessent für die Nutzung der im Teilprojekt 4 erzielten Ergebnisse gefunden werden.

Im Bereich internationaler Entwicklungen wurden Arbeiten des Open Grid Forums zur Standardisierung der eingesetzten Job Specification Description Language (JSDL) beobachtet und teilweise direkt begleitet. Auch die Entwicklung neuer Standards, wie der Cloud-Schnittstelle OCCI³, wurde im Hinblick auf den zukünftig verstärkten Einsatz von virtualisierten Ressourcen auch im Grid-Kontext aktiv begleitet.

²Gesellschaft für wissenschaftliche Datenverarbeitung mbH Göttingen

³OCCI: Open Cloud Computing Interface

6 Ergebnisse

6.1 Projektleitung

D. Loffhagen

Leibniz-Institut für Plasmaforschung und Technologie e.V. (INP), Greifswald

Die Leitung für das Gesamtprojekt lag beim INP Greifswald. Wesentliche Aufgaben im Bereich der Projektleitung waren

1. der Aufbau einer adäquaten PT-Grid-Infrastruktur im Rahmen des D-Grids mit Servern beim INP Greifswald und weiteren Partnern,
2. die Erarbeitung eines Online-Beratungswerkzeuges und seine Integration in die D-Grid-Infrastruktur,
3. die Entwicklung und Konkretisierung eines Geschäftsmodells,
4. Gründungsplanung, Strategieentwicklung und Partnerakquisition für eine PT-Grid-Verwertungsorganisation,
5. die Integration virtueller Maschinen im Rahmen des Teilprojektes 1,
6. Gestaltung, Umsetzung und Pflege des Internetauftritts und von Werbemitteln,
7. die Organisation von PT-Grid-Projekttreffen und Schulungen sowie
8. Lektorat und Dokumentation.

Die Punkte 1 und 2 waren Teil der Arbeitspakete 1 (AP1-PL: Soll-Ist-Erfassung Projektbeginn), 2 (AP2-PL: PT-Grid-Server), 3 (AP3-PL: PT-Grid-Portallösung) und 5 (AP5-PL: Soll-Ist-Erfassung Projektende) im Bereich der Projektleitung und werden im Abschnitt 6.1.1 behandelt. Über die Aufgaben 3 und 4, die Teil von AP1-PL, AP4-PL (PT-Grid-Verwertungsorganisation) und AP5-PL waren, wird im Abschnitt 6.1.2 berichtet. Die Integration der virtuellen Maschinen (AP8-PL) wird im Rahmen der Ergebnisse des Teilprojektes 1 im Abschnitt 6.2 dokumentiert. Im Folgenden werden Resultate der Punkte 6 bis 8 (Arbeitspakete 6, 7 und 9) dargestellt. Die Arbeitsplanung im Bereich Projektleitung ist im Anhang A.1 in Abbildung 94 dargestellt.

AP6-PL: Internetauftritt und Werbemittel

Die Umsetzung des Internetauftrittes des PT-Grids und die Bereitstellung von Werbemitteln (AP6-PL) erfolgte im Unterauftrag durch die neoplas GmbH. Der Auftrag an

die neoplas GmbH zur Erstellung des Corporate Design, einschließlich Logo, Flyer, Webdesign und Vorbereitung sowie Durchführung eines Mailings wurde nach Eingang des Zuwendungsbescheides erteilt. Die Arbeiten zum Corporate Design wurden mit den Projektpartnern abgestimmt und im ersten Projekthalbjahr erfolgreich abgeschlossen.

Die Internet-Domänen www.pt-grid.de und www.plasma-technologie-grid.de/ wurden angemeldet. Der PT-Grid-Webserver wurde beim INP Greifswald in der Abteilung Plasmamodellierung installiert und ist seit August 2009 online. Der Zugang ist über HTML (Hypertext-Auszeichnungssprache) öffentlich möglich. Die Webseitenstruktur wurde von der neoplas GmbH entworfen. Die Inhalte wurden von den Projektpartner zugearbeitet, PT-Grid-intern geprüft und weiter gepflegt.

Die Gestaltung und Umsetzung der Flyer des PT-Grids durch die neoplas GmbH erfolgte in Abstimmung mit den Projektpartnern. Die Flyer des PT-Grids wurden erstmals auf dem 3. D-Grid All-Hands-Meeting im März 2010 in Dresden öffentlich verbreitet.

AP7-PL: Projekttreffen und Schulungen

Im Rahmen des Arbeitspaketes AP7-PL wurden regelmäßig Projekttreffen des gesamten PT-Grids oder einzelner Teilprojekte bzw. -bereiche sowie Schulungen durch die Projektleitung in Zusammenarbeit mit den lokalen Projektpartnern organisiert und durchgeführt. Darüber hinaus fanden in den einzelnen Teilprojekten weitere teilprojektspezifische Arbeitstreffen und Schulungen statt. Die wichtigsten Projekttreffen und Schulungen sind in Tabelle 1 aufgeführt.

Im Rahmen der Frühjahrstagung 2011 der Deutschen Physikalischen Gesellschaft (DPG) der Fachverbände Plasmaphysik und Kurzzeitphysik in Kiel wurde zudem durch die Projektleitung ein Symposium Plasmatechnologie-Grid organisiert und veranstaltet. Das Symposium bot die Möglichkeit, die PT-Grid-Infrastruktur einem breiteren wissenschaftlichen Publikum vorzustellen und weitere plasmatechnische Berater für die Nachnutzung der PT-Grid-Infrastruktur zu gewinnen. Die Resonanz war mit etwa 15 Personen auf Grund unterschiedlicher Faktoren gering.

Im Rahmen der Ergebniskonferenz des D-Grids 2012 in Bonn hat die Projektleitung des PT-Grids zwei Workshops durchgeführt, auf denen Ergebnisse des PT-Grid öffentlich präsentiert wurden: den Ergebnisworkshop „PT-Grid - PT-Grid-Services für Wissenschaft und Industrie“ und den gemeinsamen Ergebnisworkshop der Projekte MoSGrid, OptiNum-Grid und PT-Grid „Simulationsservices für Industrie und Wissenschaft: Chemie, Plasmen und Mechatronik“.

Die Projekttreffen und Schulungen innerhalb des Verbundprojektes „PT-Grid - Plasma-Technologie-Grid“ wurden ergänzt durch monatlich von der Projektleitung mit WebEx™

durchgeführte Webkonferenzen, an denen die geförderten Partner und Unterauftragnehmer regelmäßig und die assoziierten Partner optional teilnahmen. Die Webkonferenzen dienten unter anderem zur Diskussion aktueller Themen, zur Information der Projektpartner über beispielsweise die Ergebnisse projektrelevanter Workshops anderer D-Grid-Projekte und zur Steuerung des Projektfortschritts.

AP9-PL: Lektorat und Dokumentation

Das Arbeitspaket 9 im Bereich der Projektleitung (AP9-PL) umfasste die Erstellung, Prüfung und zentrale Ablage von Berichten, Schulungsunterlagen und anderen Materialien. Unter anderem war es gemäß dem Zuwendungsbescheid erforderlich, dass jeder der geförderten Projektpartner halbjährlich zum 15.02. und 15.08. eines Jahres Zwischenberichte an den Projektträger zuzuleiten hatte. Ferner war das INP Greifswald als Koordinator des Verbundvorhabens gehalten, dem Projektträger zusätzlich zu den eigenen Zwischenberichten jeweils spätestens zum 01.03. und 01.09. eines Jahres zusammenfassende Sachberichte vorzulegen. Zudem war im Zuwendungsbescheid des INP Greifswald der Unterauftrag an die Universität Marburg bis zur Vorlage eines Berichtes zur Virtualisierung gesperrt. Die Aufhebung der Auszahlungssperre war an die Vorlage eines durch das INP Greifswald und die CFX Berlin Software GmbH erstellten Berichtes geknüpft, der die bestehenden Virtualisierungslösungen evaluiert und das beste System identifiziert (siehe auch Abschnitt 6.2). Darüber hinaus wurden seitens der Projektleitung regelmäßig die Monatsberichte für die D-Grid gGmbH erstellt und versandt, die den Projektstatus anhand der Meilensteine dokumentieren, kritische Punkte und Probleme, die im Beirat des D-Grid zu diskutieren sind, darstellen und projektübergreifende Mitteilungen enthalten.

Die Dokumentenablage innerhalb des PT-Grids wurde über den BSCW-Server <http://bscw.uni-duisburg-essen.de/bscw/bscw.cgi/> realisiert. Unter der Adresse <https://bscw.uni-duisburg-essen.de/bscw/bscw.cgi/7830362> wurden die im Rahmen des Projektes erstellten Vorträge, Textvorlagen, internen Analysen, Berichte und sonstige relevante Texte geführt. Die wichtigsten Ordner in der PT-Grid-Dokumentenablage sind

1. Antrag - öffentlicher und nichtöffentlicher PT-Grid-Antrag,
2. Berichte - interne Analysen, Strategiepapiere und Pflichtenhefte sowie Berichte an den Projektträger,
3. Dokumentation - für das PT-Grid verpflichtende Dokumente, Gesetze und D-Grid-Betriebshinweise sowie PT-Grid-Infrastruktur-Dokumentation,
4. Presse- und Öffentlichkeitsarbeit - Pressemitteilungen und -artikel sowie wissenschaftliche Veröffentlichungen,

5. Projekttreffen, -schulungen und andere Meetings - Tagesablauf, Vorträge, Poster usw. von Veranstaltungen innerhalb und außerhalb des PT-Grids mit PT-Grid-Beteiligung,
6. Vorlagen - Logos, Vortragsfolientemplate, PT-Grid-Präsentationen und -Poster sowie
7. sonstige Literatur - interessante, für das PT-Grid relevante Literatur aus dem Grid-Umfeld.

Die neben den Monats-, Zwischen- und Sachberichten im Rahmen der Projektlaufzeit erstellten und auf dem BSWC-Server abgelegten PT-Grid-internen Berichte sind mit Angabe von Autor, Titel, federführende Einrichtung und Veröffentlichungsdatum im Abschnitt 11.1 zusammengestellt.

Da zum Ende der Projektlaufzeit die zugeteilte Archivierungshöchstgrenze auf dem BSCW-Server erreicht wurde und somit eine Ablage weiterer Dokumente nicht mehr gegeben war, wurde am 27.03.2012 die vollständige Dokumentenablage in komprimierter Form als PT-Grid.zip zum INP Greifswald transferiert, wo die Unterlagen archiviert wurden und neuere Dokumente, wie z. B. die Abschlussberichte der Projektpartner, gespeichert werden.

Neben der Dokumentenablage des PT-Grids auf dem BSCW-Server erfolgte die Dokumentation für den Auf- und Ausbau der PT-Grid-Infrastruktur im PT-Grid-Wiki <http://forge.it.irf.uni-dortmund.de/trac/ptgrid/wiki>. In dieser Online-Hilfe wurden alle Dokumente und Arbeitsschritte eingefügt, die zu einer Arbeitsvereinfachung bei den Projektpartnern führten und es externen, nicht im PT-Grid mitarbeitenden Partnern oder potentiellen Kunden ermöglichen sollen, sich in die PT-Grid-Infrastruktur zu integrieren. Das Inhaltsverzeichnis der technischen PT-Grid-Dokumentation (PT-Grid-Wiki) ist im Anhang B wiedergegeben.

Ferner erfolgte die Dokumentation des PT-Grid-Portals (<http://portal.inp-greifswald.de>) am INP Greifswald. Die Beschreibung ist zumeist in englischer Sprache umgesetzt. Eine ausführliche Beschreibung der Funktionen der umgesetzten bzw. noch geplanten Portlets des Portals erhält man nach dem Anmelden unter <https://portal.inp-greifswald.de:8443/web/pt-grid-infrastructure/welcome>. Das Inhaltsverzeichnis dieses Hilfe-Wikis ist im Anhang C dargelegt.

6.1.1 Informationstechnische Infrastruktur

Die Realisierung einer nachhaltigen informationstechnischen Infrastruktur für das PT-Grid auf Basis der im D-Grid etablierten Technologien war notwendige Voraussetzung für die Bereitstellung einer wirtschaftlich verwertbaren Service-Plattform (Online-Beratungswerkzeug) im Bereich der Plasmatechnologie. Die Umsetzung erfolgte in den folgenden Arbeitspaketen des IT-Bereiches, die im Anhang A.1.1 in Abbildung 95 näher spezifiziert sind:

1. Erstellung eines IT-Gesamtkonzeptes (AP1-IT),
2. Anpassung und Deployment einer Lösung für Grid-Scheduling (AP2-IT),
3. Anpassung und Deployment einer Lösung für Grid-Datenmanagement (AP3-IT),
4. Anpassung und Deployment einer Grid-Portal-Lösung (AP4-IT) und
5. Beratung (AP5-IT).

Der Entwurf des IT-Gesamtkonzeptes und die Beratung (AP5-IT) der Partner aus dem Bereich der Plasmaphysik und -technologie bei der Basisinstallation und der D-Grid-Integration geeigneter Ressourcen wurde maßgeblich vom Institut für Roboterforschung der Technischen Universität Dortmund durchgeführt. Dieses Institut zeichnete auch für AP2-IT verantwortlich. Die erzielten Ergebnisse und Erkenntnisse sind auch im PT-Grid-internen Bericht des Instituts für Roboterforschung der Technischen Universität Dortmund „Schlussbericht“ [P33] zusammengefasst, der eine Grundlage für die Darstellung der Arbeitspakete AP1-IT, AP2-PL, AP2-IT und AP5-IT im Rahmen dieses Berichtes repräsentierte. Die Implementierung einer geeigneten Middleware-Lösung zur Koordination von Ressourcen und Arbeitslast in bezug auf das Datenmanagement wurde im Unterauftrag durch die onScale solutions GmbH bearbeitet. Mit der Bearbeitung von AP4-IT (entsprechend AP3-PL) war die GNS Systems GmbH betraut. Die informationstechnischen Aspekte der Arbeitspakete AP1-PL (Soll-Ist-Erfassung Projektbeginn), und AP5-PL (Soll-Ist-Erfassung Projektende) waren Teil des Arbeitspakets AP1-IT. Die Umsetzung des IT-Gesamtkonzeptes erfolgte im AP2-PL (PT-Grid-Server) und war - mit unterschiedlicher Gewichtung - Teil der Aufgabenstellung in den Teilprojekten 1 bis 4 (siehe Abschnitte 6.2, 6.3, 6.4 und 6.5).

6.1.1.1 Erstellung eines IT-Gesamtkonzeptes

C. Grimme, M. Kemmerling, J. Lepping und A. Papaspyrou
Institut für Roboterforschung, Technische Universität Dortmund

Um eine allgemein verwendbare informationstechnische (IT) Infrastruktur für das PT-Grid zu entwerfen, erfolgte eine systematische Befragung in den Teilprojekten durch das Institut für Roboterforschung der Technischen Universität (TU) Dortmund. Die Erfassung und Analyse der IT-Anforderungen im PT-Grid konzentrierte sich auf die Beschreibung der unterschiedlichen Computerprogramme, der benötigten informationstechnischen Umgebungen, wie Betriebssysteme und Rechnerarchitekturen, und der Arbeitsschritte, die zur Durchführung einer Simulation notwendig sind. Weiterhin umfasste sie bereits vorhandene Vorarbeiten zur Parallelverarbeitung und die lokal bei den Teilprojektpartnern vorhandenen Rechenressourcen einschließlich deren Ausstattung mit Stapelverarbeitungsprogrammen oder Middleware-Komponenten. Die Ergebnisse sind in dem internen Bericht der TU Dortmund „Soll-Ist-Erfassung der Informationstechnik-Infrastruktur im PT-Grid“ [P4] zusammengefasst. Es stellte sich unter anderem heraus, dass sich ein grundlegender Arbeitsablauf für alle Teilprojekte formulieren und realisieren lässt und dass ähnliche Anforderungen an Datensicherheit, Überwachung von Jobs, Zuverlässigkeit und Nachhaltigkeit in den Teilprojekten gestellt werden. Der Bericht zur Soll-Ist-Erfassung der IT-Landschaft im PT-Grid stellt den Ausgangspunkt für das IT-Konzept des PT-Grids dar, das in Abstimmung zwischen dem Institut für Roboterforschung der TU Dortmund, dem Fachbereich Wirtschaft der Fachhochschule Stralsund, GNS Systems GmbH und dem Unterauftragnehmer onScale solutions GmbH erarbeitet und mit den vier Teilprojekten abgestimmt wurde. Das IT-Konzept Generation 1 ist im internen Bericht „IT-Konzeption im PT-Grid“ [P9] zu finden.

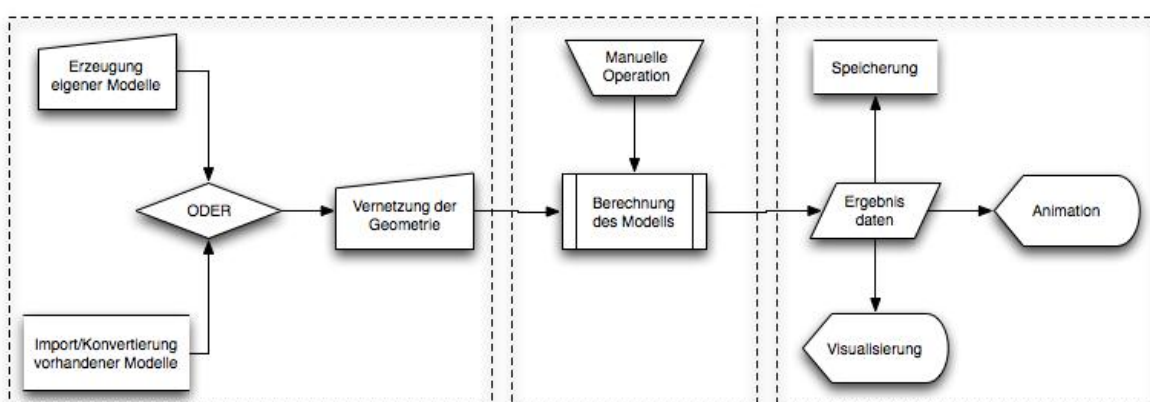


Abbildung 2: Allgemeiner Arbeitsablauf im Plasma-Technologie-Grid bestehend aus Preprocessing (links), Solver (mittig) und Postprocessing (rechts)

Der allgemeine Arbeitsablauf (Workflow) im PT-Grid ist in Abbildung 2 dargestellt. Es handelt sich dabei um einen dreiteiligen Ablauf, der sich aus der Datenvorbereitung (Preprocessing), der Lösung des Modells (Solver) und der Aufbereitung der Ergebnisse

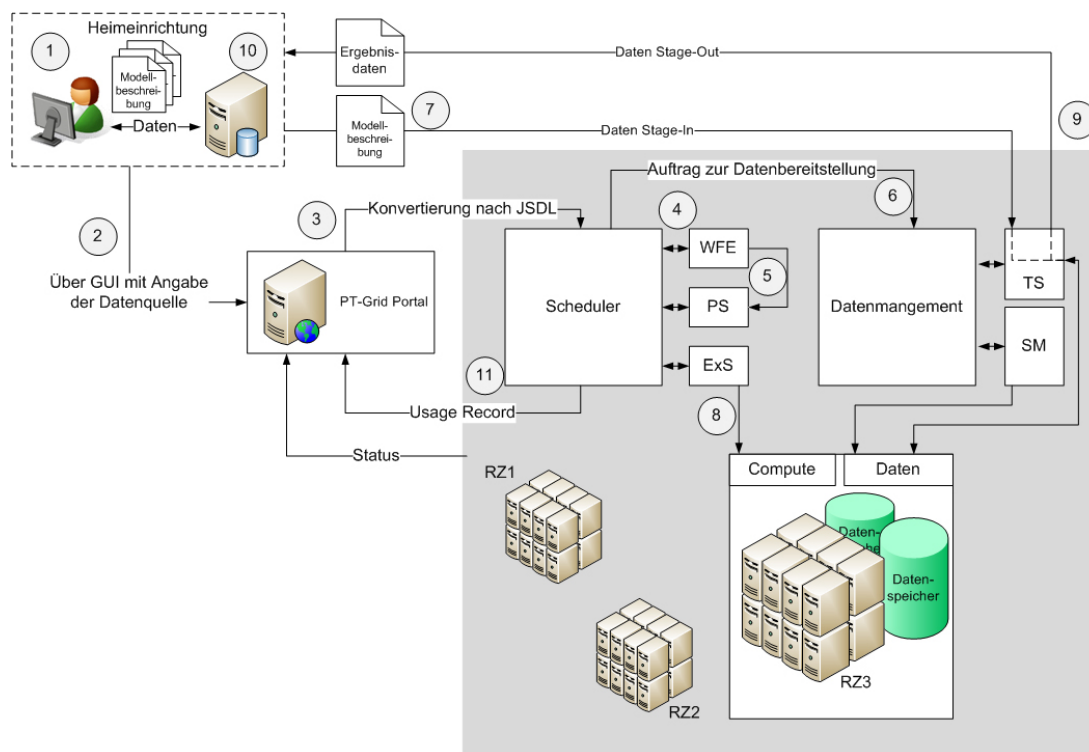


Abbildung 3: Allgemeiner Arbeitsablauf im PT-Grid unter Berücksichtigung der beteiligten Grid-Dienste und der ablaufbedingten Wechselwirkungen

(Postprocessing) zusammensetzt. Bei der Datenvorbereitung werden die geometrischen und/oder physikalischen Eigenschaften der Modelle festgelegt und entsprechende Vernetzungen der Geometrie vorgenommen. Bei der Lösung des Modells werden die verschiedenen Software- und Programmkomponenten, die basierend auf den spezifischen Eingabedaten zugehörige Ausgabedaten als Lösung erzeugen, zur Berechnung gestartet. Dabei entstehen keine weiteren Datenabhängigkeiten. Der Nutzer (Kunde) muss jedoch in der Lage sein, durch manuelle Operation Zwischenergebnisse gezielt abzurufen und direkten Einfluss auf die weitere Modellberechnung zu nehmen. Bei der Aufbereitung der Ergebnisse werden die Daten zurückgeschrieben und für die weitere Analyse bzw. visuelle Darstellung vorgehalten.

Dieser dreiteilige Arbeitsablauf wird durch die in Abbildung 3 gezeigte komponenten- und dienstebasierte Architektur umgesetzt. Im ersten Schritt erstellt der Nutzer Modelle, die auf einem lokal verwalteten und vertrauenswürdigen Datenserver durch den plasma-technischen Berater bereitgestellt werden. Dieser Datenserver verfügt über eine Anbindung an die Grid-Middleware Globus, so dass Daten mittels GridFTP, einer Erweiterung des Standarddatenübertragungsprotokolls FTP zur Verwendung beim Rechnen im Grid, transferiert werden können. In Schritt 2 verbindet sich der Nutzer über eine grafische Benutzeroberfläche (engl. Graphical User Interface, Abk. GUI) mit dem PT-Grid-Portal

(siehe Abschnitt 6.1.1.5). Er startet dort über eine Webschnittstelle seine Modellrechnungen, wobei mit der bereitgestellten Information die Koordination der Berechnung im Grid durch das Portal eingeleitet wird. Der dritte Schritt umfasst die Konvertierung der Nutzereingaben durch die Portaloberfläche in eine standardisierte Jobbeschreibung (JSDL: Job Submission Description Language) und die Übergabe an den Scheduler-Dienst des PT-Grids. Der Scheduler (siehe Abschnitt 6.1.1.3) übernimmt im vierten Schritt die weitere Koordination der Jobanforderungen und unterteilt mittels einer integrierten Workflow Engine (WFE), d. h. einem Programm für die Automatisierung von Prozessen, die JSDL-Beschreibung in elementare Aufgaben. In Schritt 5 werden anschließend einzelne Aufgaben an den Planungsservice (PS) übergeben. Dort werden sie in Kooperation mit dem Datenmanagement des PT-Grids (siehe Abschnitt 6.1.1.4) durch zusätzliche Aufgaben für die Bereitstellung von Daten in den Workflow ergänzt. In Schritt 6 garantiert das Datenmanagement des PT-Grids, dass die erforderlichen Daten auf der Zielressource verfügbar sind. Der ursprünglich vorgesehene Speicherungsmanagements- (engl. Storage Management, Abk. SM) Services wurde nicht umgesetzt. Durch den im PT-Grid-Datenmanagement implementierten Transferservice (TS) wird in Schritt 7 die Eingabe (Stage-in) der Daten von der zuvor im JSDL angegebenen Datenquelle zu der vom Scheduler ausgewählten Zielressource (hier RZ3) angestoßen. Im Anschluss daran wird im achten Schritt durch den Ausführungsdienst (engl. Execution Service, Abk. ExS) die Berechnung auf den vorgesehenen Grid-Ressourcen (RZ3) gestartet. In Schritt 9 gibt der Scheduler nach erfolgter Berechnung entsprechende Aufträge an das Datenmanagement des PT-Grids, die Ergebnisse an die Heimeinrichtung zurückzusenden (Stage-out). Die in Abbildung 2 als Postprocessing zusammengefassten Arbeitsschritte wurden bereits auf der Grid-Ressource durchgeführt, wie z. B. in den Teilprojekten 1 und 2, bzw. können in Schritt 10 in gesicherter Umgebung durch entsprechende Computerprogramme lokal beim Nutzer ausgeführt werden. Im abschließenden Schritt 11 sollten die Aufzeichnungen über den Ressourcenverbrauch im Grid vom Scheduler an das Portal des PT-Grids übertragen und dort für die Realisierung von Accounting- und Billing-Konzepten verwendet werden. Dieser Punkt steht noch aus.

6.1.1.2 PT-Grid-Server

C. Grimme¹, M. Kemmerling¹, J. Lepping¹, D. Loffhagen² und A. Papaspyrou¹

¹ Institut für Roboterforschung, Technische Universität Dortmund

² Leibniz-Institut für Plasmaforschung und Technologie e.V. (INP), Greifswald

Die Umsetzung des IT-Gesamtkonzeptes (AP2-PL) erfolgte in den Teilprojekten mit Unterstützung durch die informationstechnischen Berater. Bei der Umsetzung des IT-

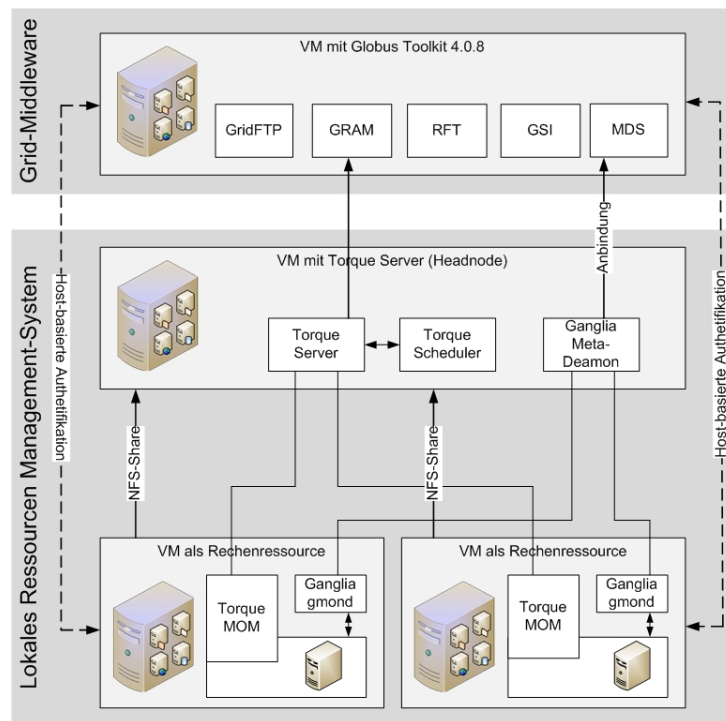


Abbildung 4: PT-Grid-Referenzsystem

Konzepts war unter anderem zu beachten, dass die Infrastruktur des PT-Grids sich in die vorhandene Infrastruktur des D-Grids integrieren lässt. Als Middleware wurde die Version des Globus Toolkit 4.0.8 [1] verwendet. Die testweise Installation von Globus Toolkit 4.2 auf dem Grid-Rechner des INP Greifswald zeigte, dass diese höhere Version von Globus Toolkit nicht im Rahmen des Teilprojektes 2 eingesetzt werden kann. Die Abwärtskompatibilität jeder Weiterentwicklung einer Middleware, sei es Globus, Unicore oder gLite, wurde beim D-Grid-Beirat angefragt.

Für den Aufbau der Infrastruktur des PT-Grids waren die benötigten Middleware-Komponenten zum Datentransfer (GridFTP), zur Jobeinreichung (GRAM) und für das Datenmanagement durch die beteiligten Teilprojekte auf eigenen Servern bereitzustellen. Damit die Entwicklungsarbeit bei allen Projektpartnern einheitlich war, einigten sich die Projektpartner auf eine von der TU Dortmund vorgeschlagene PT-Grid-Referenzinstallation. Die grundlegende Struktur dieser auf den Servern der Teilprojekte einzurichtenden Infrastruktur ist in Abbildung 4 dargestellt. Sie besteht im Wesentlichen aus zwei Schichten: Grid-Middleware und lokales Ressourcen-Management-System (LRMS). Im Folgenden werden kurz die Komponenten des Minimalsystems und deren Aufgaben beschrieben. Weitere Details findet man unter <http://forge.it.irf.uni-dortmund.de/trac/ptgrid/wiki/PtgridReferenzsystem#PT-GridReferenzsystem>.

Zum Aufbau des Minimalsystems wird aus praktischen Gründen von einer vollständig

virtualisierten Infrastruktur ausgegangen, d. h., alle aufzusetzenden Server bzw. Dienste werden in ein Basisimage einer virtuellen Maschine (VM) mit einem empfohlenen Linux-Betriebssystem integriert. Die Verwendung virtueller Maschinen erlaubt die notwendige Flexibilität bei der Einrichtung und Wartung der Systeme. Weiterhin können durch die entsprechende Wahl eines Grundsystems (z. B. Ubuntu Linux) Inkompatibilitätsprobleme verringert werden. Zur Realisierung der Minimalinstallation müssen drei Schichten in mindestens vier virtuellen Maschinen aufgesetzt werden.

- Eine virtuelle Maschine gilt als Grid-Middleware. Sie stellt die notwendigen Dienste GridFTP, GRAM, RFT, GSI und MDS des Globus Toolkit 4.0.8 bereit. Dabei ist GridFTP eine Variante des FTP (File Transfer Protocol) mit zusätzlichen Funktionalitäten. GRAM (Grid Resource Allocation Management) ermöglicht es, Rechenaufträge (Compute-Jobs) zu lokalisieren, abzuschicken, zu überwachen und abzubrechen. RFT (Reliable File Transfer) implementiert einen zuverlässigen Dateitransfer auf der Basis von GridFTP. GSI (Grid Security Infrastructure) stellt Werkzeuge für eine sichere Kommunikation und zur Authentifizierung und Autorisierung von Benutzer und beteiligten Ressourcen im Grid bereit. MDS (Monitoring and Discovery Services) stellt Funktionalitäten für das Auffinden und Monitoring von Ressourcen im Grid bereit.
- Eine virtuelle Maschine gilt als Scheduler-Server. Dieses LRMS-Headnode ist der Steuerknoten für den Cluster, der von der Globus-Toolkit-Schicht zur Einreichung und Steuerung von Jobs verwendet wird. Torque wird in diesem Falle verwendet. Folgenden Dienste sind im LRMS-Headnode integriert.
 - Der Torque-Server ist ein Ressourcen-Management-Dienst, der die Kontrolle über Batch-Jobs und verteilte Arbeitsknoten realisiert. Es handelt sich um eine freie Software, die auf OpenPBS Version 2.3.12 basiert und Mechanismen zur Fehlertoleranz beinhaltet.
 - Der Torque-Scheduler steuert die Zuordnung von eingereichten Jobs und die lokal verwalteten Ressourcen.
 - Das Ganglia-Monitoring-System ist ein System, das Informationen über Ressourcen eines Rechnernetzes sammelt und optional auch darstellt.
- Zwei virtuelle Maschinen gelten als Rechenressourcen und werden als Torque-Client definiert, wobei die Anzahl von Rechenressourcen-VM beliebig erhöht werden kann. Sie sind entsprechend mit den Diensten Torque-MOM und gmond zu versehen. Torque-MOM (MOM - Machine Oriented Miniserver) ist ein Dienst, der auf jedem

Rechenknoten verfügbar sein muss und primär für die Ausführung nach der Übermittlung einer Kopie des Jobs durch den Torque-Server verantwortlich ist. Weiterhin gibt er auf Anfrage Informationen über dessen aktuellen Status zurück. Der Dienst gmond des Ganglia-Monitoring-Systems überwacht verschiedene Metriken der lokalen Ressource und sendet diese über das Netzwerk.

Zu Beginn des Verbundvorhabens waren Server nur bei den informationstechnischen Beratern vorhanden. Im Rahmen der Projektlaufzeit wurden Rechenressourcen mit entsprechenden Managementsystemen bei den plasmatechnischen Beratern, der ESI GmbH und dem assoziierten Partner Max-Planck-Institut für Plasmaphysik, Greifswald etabliert. Die Server (Compute- und/oder Portal-Server) befinden sich zum Teil in der demilitarisierten Zone der Institution⁴ und wurden mit eigener Firewall oder durch geeignetes Aufsetzen des Servers abgesichert. Die Spezifika der Rechenressourcen sind in den Darstellungen der Teilprojekte (Abschnitte 6.2, 6.3, 6.4 und 6.5) dargelegt. Grundsätzlich sind die von den Partnern aufgebauten Ressourcen nicht von der Qualität einer typischen D-Grid-Rechenressource. Es sind kleinere Maschinen, die ausschließlich dazu dienen, mit dem Grid Erfahrung zu sammeln, und je nach Anwendungsfall und Anbieter zu einem späteren Zeitpunkt aufgestockt werden können.

Die Server wurden in die Gesamtinfrastruktur des PT-Grids integriert, die im Rahmen des Teilprojektes 2 (Abschnitt 6.3) am und durch das INP Greifswald mit Unterstützung durch die informationstechnischen Berater umgesetzt wurde. Die Liste der an die Infrastruktur angeschlossenen Rechenressourcen wurde über <http://ptgrid.it.irf.tu-dortmund.de:8080/webmds/webmds?info=indexinfo&xsl=servicegroupxsl> angezeigt. Um die Server des PT-Grids D-Grid-weit bekanntzumachen, wurden sie im D-Grid-WebMDS unter <http://webmds.lrz-muenchen.de:8080/webmds/xslfiles/csm/> aufgeführt.

Die Infrastruktur des PT-Grids, die die Demonstratoren der Teilprojekte beinhaltet, ist in Abbildung 5 dargestellt. Wesentliche Bestandteile der PT-Grid-Infrastruktur sind

- der PT-Grid-Portalserver (<http://portal.inp-greifswald.de>), der durch das INP Greifswald die Demonstratoren zur Verfügung stellt (siehe Abschnitt 6.3),
- ein Server mit Image Creation Station (ICS) mit voreingestellter virtueller Maschine für die Anwendung von ANSYS CFX an der Philipps-Universität Marburg (siehe Abschnitt 6.2),
- Globus-Compute-Server (ptgrid.inp-greifswald.de, ptgrid.it.irf.tu-dortmund.de) für

⁴Die demilitarisierte Zone ist der Bereich des Netzwerkes der Institution, der nicht durch die Firewall der Institution geschützt wird.

Rechnungen am INP Greifswald (siehe Abschnitt 6.3) bzw. am IRF der TU Dortmund inklusive des Multi-Physics-Werkzeugs CFD-ACE+,

- ein Lizenzserver (ptgrid.esigmbh.de) der ESI GmbH für das Lizenzmanagement und Abrechnungsverfahren (siehe Abschnitt 6.3),
- der Produktivportalserver (<https://ptgrid.ist.fraunhofer.de:8443/portal>) für PIC-MC-Simulationen des IST Braunschweig (siehe Abschnitt 6.4),
- der Produktivportalserver (<http://sheath.tet.rub.de>) für das Randschichtmodell der Ruhr-Universität Bochum (siehe Abschnitt 6.5),
- der IRF-PT-Grid-Scheduler am IRF der TU Dortmund zur Verteilung von Rechenjobs auf die verfügbaren Ressourcen (siehe Abschnitt 6.1.1.3),
- das PT-Grid-Datenmanagement (GNDMS) zur Verwaltung der Daten auf dem Server ptgrid.inp-greifswald.de (siehe Abschnitt 6.1.1.4) und
- die Dienste und Ressourcen des D-Grids.

Details zu den einzelnen Komponenten sind in den angegebenen Abschnitten dargestellt. Ein Endnutzer ist somit in der Lage, direkt von seinem Arbeitsplatz aus über den PT-Grid-Portalserver (Onlineberatungswerkzeug) Berechnungen und Parameterstudien zur Optimierung bzw. Entwicklung von Plasmaanwendungen mit den vorbereiteten wissenschaftlichen Modellen durchzuführen, ohne sich um informationstechnische Aspekte kümmern zu müssen.

Zur Unterstützung der Plasmaberater hat das INP Greifswald zudem einen für Teilprojekt 2 (Abschnitt 6.3) konzipierten Portalentwicklungsarbeitsplatz aufgebaut und stellt diesen in Form einer virtuellen Maschine über einen ftp-Server zum Download bereit. Mit diesem im INP-internen Netz installierten Portalentwicklungsarbeitsplatz sowie dem damit erstellten Portlet-Template für die Dateneingabe und Simulationssteuerung steht eine Entwicklungsinfrastruktur zur Verfügung, die den Zeitaufwand zur Anpassung weiterer Softwarepakete aus Wissenschaft und Industrie und deren Integration in den PT-Grid-Portalserver minimiert.

Zur Nutzung der D-Grid-Infrastruktur waren die Registrierung einer virtuellen Organisation (VO) und die Aufnahme in die D-Grid-Nutzerverwaltung (VOMRS - Virtual Organization Management Registration Service) erforderlich. Die virtuelle Organisation „ptgrid“ und der entsprechende VOMRS-Server mit dem Unix-Kürzel „pt“ wurden zu Beginn des Projektes auf dem Registrierungsserver des Forschungszentrums Jülich (https://dispatch.fz-juelich.de:8814/dgrid_virtorgall_list/back=%2fDGVOMEMB)

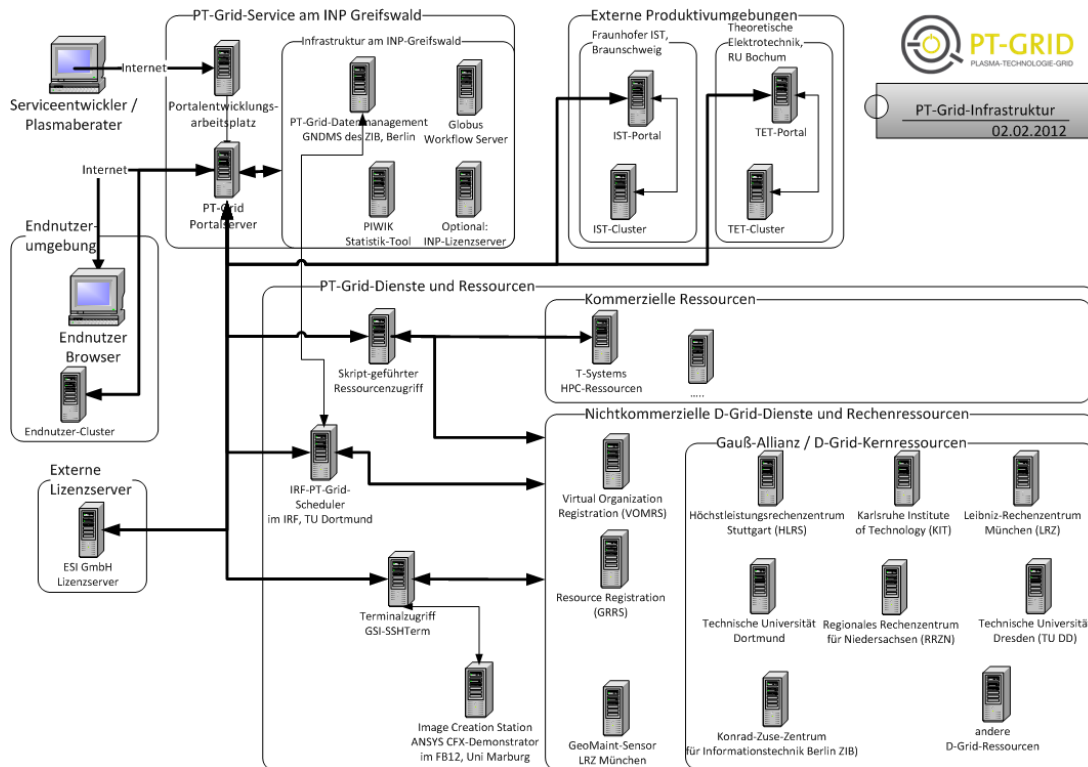


Abbildung 5: Infrastruktur des PT-Grids 2012

registriert. Zur Vereinfachung der Nutzerverwaltung wurde das INP Greifswald Grid-RA (Registration Authority) und konnte so Zertifikatsanträge von Nutzern entgegennehmen. Mitglieder der VO „ptgrid“ sind die geförderten und assoziierten Projektteilnehmer.

Die VO- und Nutzerdienste werden im D-Grid am Forschungszentrum Jülich zentral betrieben. Um im Sinne einer nachhaltigen Nutzung des PT-Grids von dieser Serviceinstanz unabhängig zu sein und um mögliche PT-Grid-spezifische Konfigurationen und neue Softwareversionen außerhalb dieser Produktionsumgebung testen zu können, wurde ein PT-Grid-eigener VOMRS-Server (vomrs.inp-greifswald.de) testweise auf den Servern des INP installiert, jedoch nicht weiter betrieben. Der Betrieb eines PT-Grid-eigenen Ressourcenmanagements (GRRS - Grid Resource Registry Service, GRRS-Server) wurde geprüft und als nicht notwendig eingeschätzt.

Größtes Hindernis auf dem Weg der kommerziellen Verwertung bleibt das Verbot, D-Grid-Ressourcen kommerziell zu nutzen. Zur flexiblen Nutzung des Online-Beratungswerkzeuges wurde deshalb auch die Option zur Ansteuerung von externen kommerziellen Rechenressourcen (z. B. von GWDG oder T-Systems SfR GmbH) umgesetzt und getestet.

6.1.1.3 Anpassung und Deployment einer Lösung für Grid-Scheduling

C. Grimme, M. Kemmerling, J. Lepping und A. Papaspyrou

Institut für Roboterforschung, Technische Universität Dortmund

Um eine effiziente Nutzung der Ressourcen sicherzustellen und eine zuverlässige Verwendung der Infrastruktur des PT-Grids für Nutzer zu ermöglichen, ohne dass sie Kenntnisse über die zugrundeliegende Struktur der Systeme und Verbindungen im Netzwerk benötigen, war ein geeignetes, in anderen Vorhaben des D-Grids etabliertes Grid-Scheduling-System zur Verfügung zu stellen und mit der im PT-Grid eingesetzten Datenmanagement-Lösung (Abschnitt 6.1.1.4) zu integrieren. Diese Aufgabe übernahm das Institut für Roboterforschung an der Technischen Universität Dortmund. Die Arbeitsplanung beinhaltete im Einzelnen die Schritte Erstellung der Integrationsarchitektur, Umsetzung dieser Architektur, Integration mit dem Datenmanagement, Tests und Dokumentation, Bereitstellung des Grid-Scheduling-Systems sowie Adaption und Feinschliff mit den Pilotprojekten für die erste Generation sowie anschließend die entsprechenden Schritte für die Generation 2 des Grid-Scheduling-Systems.

Das Konzept der Grid-Scheduling-Lösung basierte auf der im Rahmen des C3-Grids entwickelten Software. Der Scheduling-Dienst war an der TU Dortmund bereits innerhalb der den Projektpartnern zur Verfügung gestellten Middleware-Installation integriert und nutzbar. Während der Projektlaufzeit wurde die Software an die spezifischen Anforderungen des PT-Grids angepasst. Zur Code-Harmonisierung wurden die im PT-Grid bereitgestellten Funktionalitäten abschließend in die Urversion überführt, welche eine einheitliche Basisinfrastruktur in C3Grid-INAD und PT-Grid bildet.

Die Anpassungen beinhalteten

- die Vereinheitlichungen der Protokollierungsmechanismen,
- die Implementierung des Datenimports via GSIFTP über das Datenmanagementsystem,
- die Umsetzung paralleler Aufgabenabarbeitung über JSDL/RSL-Translation⁵,
- die Stabilisierung der Zertifikatsdelegation (Wiederholung und Zeitüberschreitungen),
- die durchgehende Unterstützung für den Abbruch von Arbeitsabläufen sowie
- die Verbesserung der Scheduling-Logik im Hinblick auf die Weitergabe des gewählten Hosts nach der Scheduling-Entscheidung.

⁵RSL: Resource Specification Language; Ressourcenspezifikationsprache

Die Referenzinstallation des Scheduling-Systems des PT-Grids an der TU Dortmund wurde durchgängig betrieben und gewartet, so dass den Projektpartnern fortwährend ein Testsystem für die Nutzung und Weiterentwicklung von Anwendungen und gemeinsamen Komponenten zur Verfügung stand. Im Betrieb mit realen Anwendungen, wie beispielsweise PIC-MC-Simulationen im Rahmen des Teilprojektes 3 und Simulationen mit CFD-ACE+, wurden diverse Engpässe bei der Leistungsfähigkeit des Schedulers ermittelt und beseitigt, die aufgrund der unterschiedlichen Anwendungsszenarien im Rahmen der C3-Grid-Entwicklungen nicht getestet werden konnten. Hierbei handelte es sich vorrangig um Probleme mit der Lebenszeit der WSRF-Ressourcen⁶. Zusätzlich wurden weitere Optimierungen zur Vermeidung doppelter und/oder unnötiger Transfers bei Datenidentität integriert.

Zwecks stärkerer Einbindung in die D-Grid-Dienstlandschaft wurde eine Machbarkeitsstudie über die Anbindung des vom Forschungszentrum Jülich betriebenen VOMRS-Systems durchgeführt. Das Ziel war hierbei die programmatische Nutzung der VOMRS-Dienste für eine Vorab-Authentifizierung und Autorisierung im Rahmen der Scheduling-Entscheidung in der PT-Grid-Infrastruktur vor der Anfrage beim konkreten Ressourcenprovider. Dies hätte insbesondere zur Entlastung auf der Ebene der Rechenzentren beigetragen, da weniger Arbeitslast durch gültige, aber unzureichend berechtigte Jobs entstünde. Bedingt durch die spezifische Konfiguration der Systeme am Forschungszentrum Jülich sowie die fehlende API-Freischaltung⁷ überstieg der Aufwand für die Integration in den Scheduler-Code den Nutzen bei weitem, und es wurde auf die Umsetzung verzichtet.

Zur besseren Testbarkeit wurden im PT-Grid-Projekt eine Java-basierte Programmierschnittstelle und eine entsprechende kommandozeilenbasierte Client-Applikation (CLI⁸) entwickelt, die die Nutzung des Workflow-Scheduling-Systems für einfache Anwendungsszenarien und wiederholte Ausführung erleichterte. Dies war für Parameterstudien von Interesse, die über das PT-Grid-Portal vorkonfiguriert und über die Kommandozeilenschnittstelle mehrfach zur Ausführung gebracht wurden.

6.1.1.4 Anpassung und Deployment einer Lösung für Grid-Datenmanagement

F. Schintke¹ und D. Loffhagen²

¹ onScale solutions GmbH, Berlin

² Leibniz-Institut für Plasmaforschung und Technologie e.V. (INP), Greifswald

⁶WSRF: Web Services Resource Framework

⁷API: application programming interface; Programmierschnittstelle

⁸CLI: Command line interface; Kommandozeilenschnittstelle

Um die Anforderung an ein integriertes, nutzerorientiertes System erfüllen zu können, war ein auf die Bedürfnisse des PT-Grids abgestimmtes Datenmanagementsystem zu entwerfen, weiterzuentwickeln und in das IT-Gesamtkonzept des PT-Grids zu integrieren, das möglichst auf existierenden D-Grid-Lösungen basierte. Mit dieser Aufgabe wurde die onScale solutions GmbH über einen Unterauftrag betraut. Die Arbeitsplanung beinhaltete im Einzelnen die folgenden, aufeinander aufbauenden Arbeitsschritte: Erfassung und Dokumentation der Anforderungen, Anforderungsanalyse und Entwurf der Systemarchitektur, Erstellen der Integrationsarchitektur, Umsetzung der Architektur, Integration mit dem Scheduling, Tests und Dokumentation, Bereitstellung des Datenmanagementsystems für das PT-Grid sowie Adaption und Feinschliff mit den Pilotprojekten.

Das PT-Grid-Datenmanagement wurde auf der Basis der im C3-Grid-Projekt des D-Grids entwickelten Software GNDMS (Generation N Data Management System) aufgebaut und an die spezifischen Anforderungen aus dem PT-Grid angepasst. Während der Projektlaufzeit erfolgte die Bereitstellung der zentralen, am Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) betriebenen Datenmanagementsystem- (DMS-) Komponente für das PT-Grid über die Ressource mardschana.zib.de. Zum Ende des Projektes wurde das Datenmanagementsystem dann auf dem Globusserver (ptgrid.inp-greifswald.de) am INP Greifswald installiert (siehe Abbildung 5).

Die Anpassungen der GNDMS-Software betrafen Anforderungen an das Rechtekmanagement und die Service-Qualität, Bedürfnisse hinsichtlich Installation und Konfiguration, die Dokumentation, Installationsarbeiten am ZIB sowie die Bereitstellung einer GNDMS-Version für das PT-Grid.

Rechtekmanagement: Die Anforderung (insbesondere der kommerziellen Partner) an Datenisolation, d. h., dass Daten während ihrer gesamten Existenz nur für den Besitzer lesbar sind, ging über die im D-Grid üblichen und in der GNDMS-Software ursprünglich implementierten Autorisierungsmechanismen mittels Grid-Zertifikaten hinaus. Deshalb wurde GNDMS so erweitert, dass die Benutzerrechte auch auf Betriebssystemebene konsequent umgesetzt werden. Dies bedeutet, dass Nutzerdaten mit den Eigentumsrechten des dem Nutzerzertifikat lokal zugeordneten UNIX-Accounts gespeichert werden und nur von diesem gelesen und geschrieben werden können. Da dies im Konflikt mit der Aufgabe von GNDMS stand, Speicherressourcen zu verwalten, d. h. gegebenenfalls auch Daten zu löschen, wenn ihre „Lebenszeit“ abgelaufen ist, wurde eine Lösung für diese Problematik erarbeitet und implementiert, die auf einer entsprechenden Funktionalität von Globus GRAM basiert. Werden von einem Client, hier der Scheduler der TU Dortmund, Speicherplatz und -ort angefordert, so muss diese Anfrage mit dem Zertifikat des Benutzers abgesichert sein. Handelt es sich beim Eigentümer des Zertifikats um ein Mit-

glied der PT-Grid-VO, wird von GNDMS dieser Platz bereitgestellt und dem Client eine Referenz auf den Bereich übermittelt. Der Client kann diese Referenz nutzen, um mit dem von GNDMS angebotenen Datentransferdienst auf diesen Bereich zuzugreifen. Der Datentransferdienst des GNDMS setzt auf GridFTP auf und erweitert dieses um Ausfallsicherheit und Fähigkeit der Ablaufplanung und -koordination zusammen mit dem Grid-Scheduler der TU Dortmund. Aus technischer Sicht befindet sich der Bereich in einem Verzeichnis des GNDMS, der dem Globus-Nutzer untersteht. Dort wird ein weiteres Verzeichnis angelegt, das dem Eigentümer von Speicherplatz und -ort, d.h. dem „Auftraggeber“, gehört und mit Dateisystemrechten so abgesichert wird, dass nur er lesen und schreiben kann. Benötigt der Client den Bereich (Speicherplatz und -ort) nicht mehr, so wird er samt Inhalt von GNDMS gelöscht.

Service-Qualität: Während in nichtkommerziellen Grids ein Dienstausfall zwar ärgerlich, aber zu verkraften ist, könnte beim Ausfall während eines kommerziellen Kundenauftrags finanzieller Schaden entstehen. Aufgrund früherer Erfahrungen hinsichtlich Zuverlässigkeit wurde GNDMS um die Möglichkeit erweitert, die Protokolldateien von einzelnen GNDMS-Installationen über das Netzwerk abzufragen. Dabei wird die Kommunikation unter Nutzung von Grid-Zertifikaten verschlüsselt. Je nach Bedarf können die vollständige Protokolldatei oder nur Auszüge davon, die ein Schlüsselwort, wie z. B. eine Workflow-Identifikation enthalten, übertragen werden. Der Betreiber eines Grid-Standortes hat vollständige Kontrolle darüber, ob diese Funktion verfügbar ist und von welchem Mitglied der PT-Grid-VO sie genutzt werden darf. Die Identifikation der Benutzer erfolgt auch hier über das Vorlegen eines gültigen Gridzertifikats der PT-Grid-VO. Dieser Mechanismus ermöglicht es einer Gruppe von Benutzern, die für den Support berechtigt ist, im Problemfall schnell die Protokolldateien der einzelnen PT-Grid-Partner einzusehen und somit umgehend den verantwortlichen Betreiber der Installation auf die notwendigen Schritte zur Problembeseitigung hinzuweisen. Die Rolle der geplanten Verwertungsorganisation im Zusammenspiel mit den „Plasmaberatern“ und Endkunden ist noch zu klären.

Installation und Konfiguration: Um die GNDMS-Software möglichst leicht installierbar zu gestalten, wurde das Build- und Installationssystem von GNDMS ausgetauscht. Das neue Build-System bietet folgende Vorteile:

- Bibliotheken von Drittanbietern sind nicht mehr Teil der Version, sondern werden vor dem Installationsprozess automatisch heruntergeladen. Somit wurde das Installationspaket signifikant kleiner und Administratoren brauchen kaum noch Zusatzsoftware zu installieren. Aus Entwicklersicht wurde es folglich einfacher, die Version einer eingesetzten Fremdkomponente zu fixieren bzw. auszutauschen.
- Das neue Build-System ist schneller, was die Kompilierungszeit merklich verkürzt

und dadurch Entwicklung und Fehlersuche beschleunigt.

- Der komplexe Setup-Prozess konnte weitgehend automatisiert werden.

Zusammengefasst ermöglicht das neue Build-System ein fast vollständig automatisiertes Aufsetzen der Datenmanagementkomponenten einer PT-Grid-Ressource, nachdem die notwendigen und unumgänglichen Konfigurationsschritte ausgeführt wurden.

Die Restrukturierung der Software wurde auch dazu genutzt, um die Abhängigkeiten von GNDMS zu Drittanbieter-Bibliotheken auf den aktuellen Stand zu bringen. Im Zuge dieser Überarbeitungen überprüfte die onScale solutions GmbH die Lizenzanforderungen von Drittanbietern und tauschte ungeeignete Komponenten aus. Die Komponentenwechsel bewirkten einige Softwareänderungen an Kernkomponenten und erforderten die erneute Durchführung von ausführlichen Tests. Insgesamt wirkten sie sich positiv auf Stabilität und Leistung des Datenmanagementsystems aus.

Dokumentation: Die Dokumentation wurde gemäß der durchgeführten Arbeiten aktualisiert, ergänzt und aus verschiedenen, nichtöffentlichen Quellen (Wikis) konsolidiert. Sie wurde vollständiger Bestandteil des Softwarepakets und ist sowohl unter <http://gndms.zib.de/index.html> als auch im PT-Grid-Wiki <http://forge.it.irf.unidortmund.de/trac/ptgrid/wiki> verfügbar.

Installationsarbeiten am ZIB: Zum Betreiben der neuen GNDMS-Version wurde während der Projektlaufzeit am ZIB eine neue Ressource eingerichtet, die unter ptgrid.zib.de verfügbar war. Außerdem wurde der bestehende D-Grid-Cluster für die nichtkommerzielle Nutzung durch das PT-Grid konfiguriert.

GNDMS-Version für das PT-Grid: Die Änderungen an GNDMS hatten zur Folge, dass eine neue, auf das PT-Grid zugeschnittene Version von GNDMS angefertigt wurde, die über die Ergänzung von Konfigurationsskripten für PT-Grid hinaus, Softwareänderungen und das neue Build-System enthält. Das Datenmanagementsystem für das PT-Grid wurde auf dem Globusserver am INP Greifswald installiert (siehe Abbildung 5).

Wir danken S. Plantikow und M. Jorra (onScale solutions GmbH, Berlin) für die Durchführung dieser Arbeiten im PT-Grid-Projekt.

6.1.1.5 Anpassung und Deployment einer Grid-Portal-Lösung

J. Niemann¹ und D. Loffhagen²

¹ GNS Systems GmbH, Braunschweig

² Leibniz-Institut für Plasmaforschung und Technologie e.V. (INP), Greifswald

Basierend auf der im Teilprojekt 3 (Abschnitt 6.4) realisierten webbasierten Steuerung sollte ein erweitertes Plasma-Technologie-Grid-Portal vom Projektpartner GNS Systems

GmbH erstellt werden. Dieses sollte allen Teilprojekten die Möglichkeit bieten, eigene Anwendungen in das Portal zu integrieren und somit ebenfalls eine Steuerung der einzelnen Applikationen über das Internet zu erreichen. Weiterhin war für dieses Portal die Entwicklung der für die Plasmatechnologie spezifischen Funktionalität in Kooperation mit der Projektleitung und wirtschaftswissenschaftlichen Beratern vorgesehen, um nicht nur eine Nutzerplattform für die Dienstleistungen der geplanten Verwertungsorganisation des PT-Grids zu schaffen, sondern auch den Betrieb dieser Verwertungsorganisation durch geeignete betriebswirtschaftliche Funktionen und Werkzeuge zu unterstützen. Die drei Arbeitspakete waren:

1. Entwicklerschulung zur Integration eigener Anwendungen in das Community-Portal,
2. Entwurf und Implementation generischer, community-spezifischer Portal-funktionalität und
3. Optimierung der Leistungs- und Funktionsfähigkeit des Portalserversystems.

Im Anschluss an die meilensteinkonform durch GNS Systems GmbH durchgeführte PT-Grid-Schulung zur Portlet-Programmierung (Workshop „Applikationsintegration“ in Tabelle 1) wurde deutlich, dass die für das Teilprojekt 3 entwickelte Portalumgebung und Ressourcenansprache den Zielen und Anwendungsfällen des Fraunhofer IST in Braunschweig genügten. Für eine Verallgemeinerung auf die anderen Teilprojekte des PT-Grids waren diese Portalumgebung und Ressourcenansprache jedoch nicht geeignet. Zudem verzögerte sich der Entwurf zur Portal-funktionalität seitens GNS Systems GmbH erheblich. Da sich somit der Transfer des Know-hows zu den Projektpartnern schwierig gestaltete, wurden im Rahmen der Teilprojekte 2 und 4 zusätzliche Aktivitäten zur Portallösung durchgeführt, die in den Abschnitten 6.3 und 6.5 eingehender dokumentiert werden. Diese führten zu der in Abbildung 5 dargestellten Infrastruktur des PT-Grid, die die Demonstratoren der Teilprojekte beinhaltet. Das INP Greifswald stellt diese Demonstratoren, die einheitliche Oberflächen für die Teilprojekte besitzen, über das Portal <http://portal.inp-greifswald.de> im Internet zur Verfügung. Als Portalsoftware wird, wie auch in anderen D-Grid-Projekten, Liferay 5⁹ eingesetzt. Die Startseite des Demonstrator-Portals des PT-Grids ist in Abbildung 6 darstellt.

Nach der Anmeldung als Nutzer gelangt man über <https://portal.inp-greifswald.de:8443/web/pt-grid-infrastructure/welcome> zu den Demonstratoren der Teilprojekte. Abbildung 7 zeigt diese Titelseite des Hilfe-Wikis des PT-Grid-Portals.

Um den Zeitaufwand für die Umsetzung und Anpassung der Softwarepakete sowohl des PT-Grid-Projektes als auch weiterer aus Wissenschaft und Industrie zu minimieren,

⁹Siehe <http://www.liferay.com/>



Abbildung 6: Bildschirmaufnahme der Startseite des PT-Grid-Portals

wurde vom INP Greifswald zudem ein Portal-Entwicklungsarbeitsplatz aufgebaut und den Projektpartnern in Form einer virtuellen Maschine bereitgestellt. Details hierzu werden im Abschnitt 6.3 gegeben.

Über das Portal können sowohl die Ressourcen des D-Grids als auch interne oder externe kommerzielle Rechenressourcen angesteuert werden. Damit steht auch für Fachbereiche außerhalb der Plasmatechnologie eine wissenschaftliche Serviceplattform für kommerzielle und nichtkommerzielle Anwendungen in Industrie und Wissenschaft zur Verfügung. Da die Gründung der geplanten Verwertungsorganisation weiterhin offen ist (siehe Abschnitt 6.1.2) sind weitere Anpassungen und Erweiterungen des Portals für eine kommerzielle Nutzung zu erwarten.

6.1.1.6 Beratung

A. Papaspyrou¹, J. Lepping¹ und D. Loffhagen²

¹ Institut für Roboterforschung, Technische Universität Dortmund

² Leibniz-Institut für Plasmaforschung und Technologie e.V. (INP), Greifswald

Um den Aufbau der Server bei den Teilprojektpartnern des PT-Grids, die Basisinstallation z. B. hinsichtlich Batch-System, Middleware und Firewall-Einstellungen sowie die Integration ins D-Grid zu erreichen, waren für den Projektbeginn Beratungsleistungen seitens der D-Grid-erfahrenen informationstechnischen Partner vorgesehen. Im Laufe des Projektes zeigte sich, dass die Schwierigkeiten bei der Umsetzung der PT-Grid-Infrastruktur größer waren als zunächst abgeschätzt, und dass in zunehmendem Maße Detailfragen Be-

Language

English (United States)

Sign In

You are signed in as [Dettef Loffhagen](#).

Site Map

- [Welcome](#)
 - [Administration](#)
 - [Project Administration](#)
 - [User Administration](#)
 - [Resources Administration](#)
 - [Resource Access Form](#)
 - [Resources Overview](#)
 - [Accessible D-Grid Resources](#)
 - [Accessible PT-Grid Resources](#)
 - [Accessible Commercial Resources](#)
 - [Your Own Internally Provided Resources](#)
 - [PT-Grid Resource Monitoring](#)
 - [D-Grid Resource-Monitoring](#)
 - [INP-Server-Administration](#)
 - [T-Systems-Server-Administration](#)
 - [ESI-Server-Administration](#)
 - [GWDG-Server-Administration](#)
- [Legal Notice](#)
- [Acknowledgement](#)
- [PIWIK - Website Analysis](#)
- [Google Analytics - Website Analysis](#)
- [Wiki-Editor](#)

- [Direct Grid Access](#)
- [Run: GSI-SSHTerm](#)
- [Guided Grid Access](#)
- [Run: guided grid access](#)
- [PT-Grid Demo Pages](#)
- [Run: Virtual Machine Creation \(external\)](#)
- [Run: Welding and Cutting](#)
- [Run: Magnetohydrodynamics](#)
- [External Server Access: Particle-in-Cell-Monte-Carlo Simulation](#)
- [Run: Plasma-Sheath Calculations \(external\)](#)
- [Plasma Physics](#)
- [Run: Plasma-QSSA](#)
- [Run: Plasma Transport Parameters](#)
- [Run: 0-d Atmospheric Plasma Calculations](#)
- [Run: Plasma-Surface Interaction](#)
- [Scientific Teaching](#)
- [Plasma-QSSA - Exercise 1](#)

Wiki-EN [Edit](#) [Details](#) [Print](#)

FrontPage

About this Portal

This portal provides access to demonstrator software from the PT-Grid project (www.pt-grid.de). Four main service categories are included

- direct D-Grid access via the terminal portlet of GSI-SSHterm
- guided access to D-Grid and commercial resources
- PT-Grid demonstrators of the PT-Grid's sub-projects
- service examples of the intended "Science Services Network" (SSN).

Please read and accept the use policy and terms of conditions before using this portal.

The following services of the PT-Grid project are projected or already usable

- user administration and access to resources (LifeRay-based)
 - non-commercial D-Grid infrastructure
 - commercial resources as from GWDG GmbH and T-Systems Sfr GmbH
 - user owned resources
- [grid terminal \(GSI-SSHterm\) - portlet](#) (done)
- ["guided grid access"- portlet](#) (portlet: projected)
- [PT-Grid demonstrator pages for sub-projects of the PT-Grid project](#)
 - [Welding and Cutting](#) (model: done; software: partially grid checked, portlet: projected)
 - [Virtual Machine Creation](#) (software:done, software: locally grid checked; portlet: ready)
 - [Magnetohydrodynamics](#) (model: done;software: grid checked, portlet: partially done)
 - [Particle-in-Cell Monte-Carlo simulations](#) (model: ready; software: grid checked; portlet: partially done)
 - [Plasma-Sheath Calculations](#) (model: done; software: grid checked; portlet: partially ready)

The projected Science Services Network (SSN) is intended to provide access to scientific software of any kind. During the PT-Grid project INP Greifswald decided to prepare the following software packages as SSN examples for the plasma community. Further projects may work out metadata structures and standards, metadata based access, the integration of databases, e.g. of cross sections, and unit and data structure conversion tools.

- [Scientific software: Plasma Physical Basics](#)
 - [Reducing Plasma-Chemical Reaction Kinetics](#) (Tool: Plasma-QSSA; software: grid checked, portlet: demonstrator 80% ready to use)
 - [Plasma Transport Parameters](#) (software: ready)
 - [0-d Atmospheric Plasma Calculations](#) (model: ready; software: grid checked; portlet: projected)
 - [Plasma-Surface Interaction](#) (software: grid checked; portlet: projected)
- [Scientific Teaching](#)
 - [Time scale analysis for chemical and plasma-chemical reaction kinetics using the Plasma-QSSA tool](#)

Short information about the implemented software and services is integrated in this Help-Wiki.

Children Pages

- [Accessible Resources](#)
- [Administration](#)
- [Direct Grid Access](#)
- [Guided Grid Access](#)
- [PT-Grid Demo Pages](#)
- [Scientific Teaching](#)
- [Terms and Conditions](#)

[Add Child Page](#) . [0 Attachments](#) | 2945 Views

Your Rating Average (0 Votes)

★ ★ ★ ★ ★ ★ ★ ★ ★ ★

[Add Comment](#)

Abbildung 7: Titelseite des Hilfe-Wikis des PT-Grid-Portals mit Zugang zu den Demonstratoren der Teilprojekte

ratungsbedarf verlangten. Neben den in Tabelle 1 enthaltenen Schulungen bestand die Unterstützung, die insbesondere durch das Institut für Roboterforschung der Technischen Universität Dortmund erfolgte, in

- durchgängiger Betreuung der Projektpartner über Mailinglisten,
- individuellem Support (telefonisch und per E-Mail) bei spezifischen Fragen,
- dem Ausbau der Dokumentation des PT-Grids (<http://forge.it.irf.uni-dortmund.de/trac/ptgrid/wiki>) sowie
- dem Auf- und Ausbau einer Testumgebung als Referenzsystem an der Technischen Universität Dortmund, die den Projektpartnern für Tests ihrer Anwendungen zur Verfügung stand.

Die Beratungsleistungen trugen sehr zur erfolgreichen Umsetzung der PT-Grid-Infrastruktur (Abbildung 5) und des praxisorientierten Online-Beratungswerkzeuges bei.

6.1.2 Konkretisierung des Geschäftsmodells

M. Klotz

Fachbereich Wirtschaft, Fachhochschule Stralsund

Die Ermittlung der rechtlichen, organisatorischen und betriebswirtschaftlichen Kenngrößen für das Online-Beratungswerkzeug bei den beteiligten Projektteilnehmern bzw. Teilnehmergruppen zur Erreichung eines akzeptierten Kosten-Nutzen-Verhältnisses bei allen Marktteilnehmern stellt eine wesentliche Bedingung für eine nachhaltige Ergebnisverwertung dar. Dabei wurde im Rahmen des PT-Grid-Projektes von dem in Abbildung 8 dargestellten zweistufigen Geschäftsmodell zur nachhaltigen Grid-Bewirtschaftung ausgegangen. Die erste Stufe beruhte auf dem Interesse der Projektpartner an der kommerziellen Nutzung des Online-Beratungswerkzeuges und der Grid-Ressourcen, und die zweite Stufe sah eine Nutzung sowohl durch weitere plasmatechnische Berater als auch durch angrenzende ingenieurtechnische Branchen oder weitere Nutzergruppen vor.

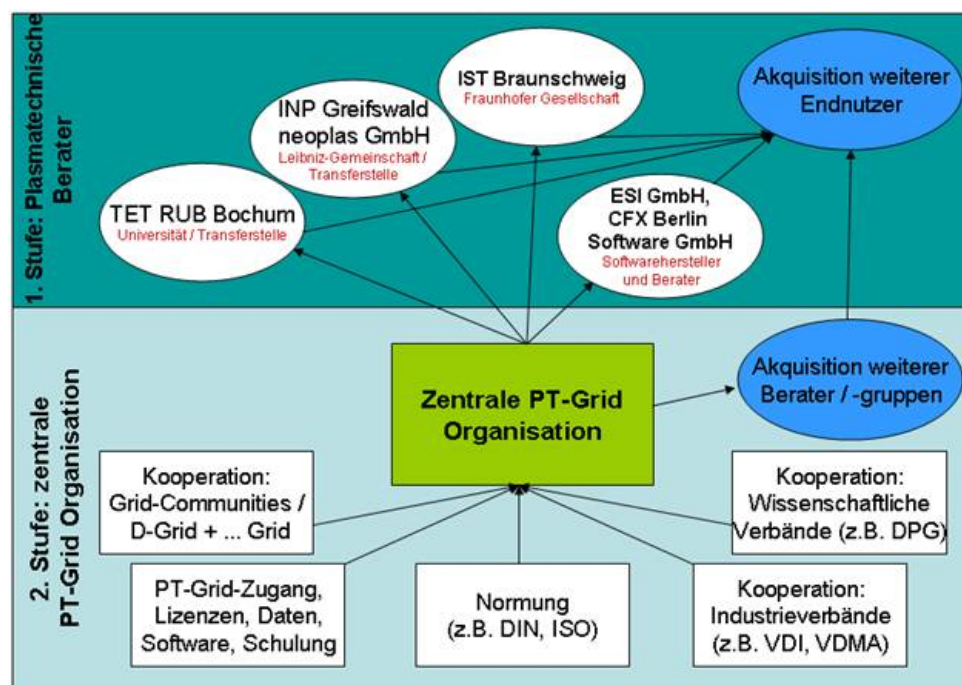


Abbildung 8: Zweistufige Geschäftsorganisation zur nachhaltigen Grid-Bewirtschaftung

Die betriebswirtschaftliche Begleitberatung der Projektleitung erfolgte durch den Fachbereich Wirtschaft der Fachhochschule Stralsund. Die Arbeitsplanung (Abbildung 96 im Anhang A.1.2) erfolgte in den drei Phasen [P31]

1. Istaufnahme und -analyse (AP1-BW),
2. Gründungsplanung (AP2-BW) und

3. abschließende Soll-Ist-Analyse (AP3-BW)

mit 11 Aktivitäten und beinhaltete Lektorat und Dokumentation im Rahmen des Arbeitspaketes AP4-BW. Die betriebswirtschaftlichen Aspekte der Arbeitspakete AP1-PL (Soll-Ist-Erfassung Projektbeginn), AP4-PL (PT-Grid-Verwertungsorganisation) und AP5-PL (Soll-Ist-Erfassung Projektende) im Bereich der Projektleitung waren Teil der Arbeitspakete AP1-BW, AP2-BW bzw. AP3-BW.

6.1.2.1 Istaufnahme und -analyse

Die erste Phase (AP1-BW) gliederte sich in die Erhebung der Grid-Aktivitäten (AP1a-BW) des Projektverbundes insgesamt zu Beginn des Projektes, die Ermittlung der geschäftsorientierten Zielvorstellungen (AP1b-BW) der Projektpartner, eine Gap-Analyse (AP1c-BW) und die Ableitung des Handlungsbedarfs (AP1d-BW) hinsichtlich einer ökonomischen Verwertung. Sie ist in Abbildung 9 graphisch dargestellt.

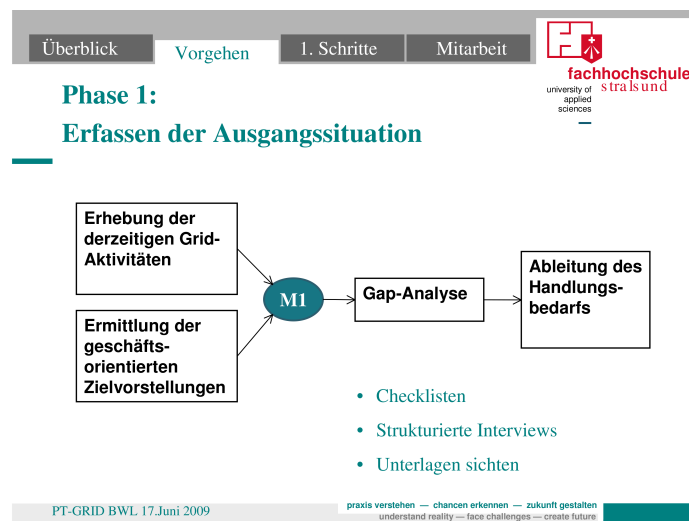


Abbildung 9: Aktivitäten der Phase 1: Istaufnahme und -analyse

Erhebung der derzeitigen Grid-Aktivitäten (AP1a-BW): Die Erfassung der Grid-bezogenen geschäftsorientierten Aktivitäten und der auf das Plasma-Technologie-Grid bezogenen Zielvorstellungen bei den plasmatechnischen Beratern waren Voraussetzungen für die Entwicklung eines Geschäftsmodells. Gemäß der Projektplanung wurden hierzu semistrukturierte, checklistengestützte Befragungen per Telefon oder vor Ort durchgeführt, protokolliert und dokumentiert. Entsprechend der Projektstruktur erfolgt die Erhebung bei folgenden Projektpartnern der vier Teilprojekte:

- CFX Berlin Software GmbH,
- Leibniz-Institut für Plasmaforschung und Technologie e.V. in Greifswald,

- Fraunhofer-Institut für Schicht- und Oberflächentechnik in Braunschweig,
- Lehrstuhl für Theoretische Elektrotechnik der Ruhr-Universität Bochum und
- Engineering Systems International GmbH in Eschborn.

Im Einzelnen wurden Informationen zu den Bereichen Projekt- und Lizenzgeschäft, Wettbewerb und Markt, Umgang mit Geheimhaltung, Personal, Kontakte und Kunden sowie zur Internationalität des geschäftlichen Wirkungsraumes erhoben. Die Protokolle der Gespräche wurden gemäß den Vereinbarungen mit den Ansprechpartnern nicht veröffentlicht, da sie vertrauliche Informationen beinhalten. Die dokumentierten Einzeldarstellungen der plasmatechnischen Berater wurden mit diesen vor der Veröffentlichung abgestimmt. Die Dokumentation erfolgte im Rahmen des PT-Grid-internen Berichts „Erhebung der derzeitigen Gridaktivitäten und der geschäftsorientierten Zielvorstellungen (Meilenstein 1) der plasmatechnischen Berater des Plasma-Technologie-Grid-Projektes“ [P2].

Ermittlung der geschäftsorientierten Zielvorstellungen (AP1b-BW): Wesentliche Ergebnisse bezüglich der geschäftsorientierten Zielvorstellungen der plasmatechnischen Berater wurden in einer vergleichenden Darstellung gewonnen. Hiernach wird die Geschäftstätigkeit der Verwertungsorganisation mehr durch das Projektgeschäft als durch das Lizenzgeschäft geprägt sein. Das Schulungsgeschäft stellt ein ergänzendes Geschäftsfeld dar. In wettbewerblicher Hinsicht zeigte die Erhebung die zentrale Bedeutung eines effektiven und effizienten Marketings, trotz oder gerade weil es sich bei dem Online-Beratungswerkzeug um ein komplexes technisches Produkt (und ergänzende Dienstleistungen) handelt. Im Vergleich der eingesetzten Marketing-Instrumente konnten die Teilnahme an wissenschaftlichen Tagungen und Veranstaltungen sowie an Messen und eine qualitativ hochwertige Veröffentlichungstätigkeit als prioritär ermittelt werden. Besondere Anforderungen an die Geschäftsabwicklung bestehen im Bereich der Sicherheit, da es sich in den Bereichen der Produktentwicklung und -optimierung zumeist um in geschäftlicher Hinsicht sensible Daten handelt.

Als wesentlicher Erfolgsfaktor für eine Verwertungsorganisation wurde die Verfügbarkeit von qualifiziertem Personal eingestuft. Dagegen sollte der internationale Fokus in der Aufbauphase von geringerer Bedeutung sein. Bei den geschäftsorientierten Zielvorstellungen stand die Nutzung zentraler externer Rechenressourcen, vor allem die der D-Grid-Infrastruktur, bei allen Partnern im Vordergrund. Insbesondere sollten aber durch die im Rahmen des Projekts entwickelte Grid-Technologie eigenständige bzw. betreute Simulationsrechnungen durch die Kunden ermöglicht werden. Hierbei wurde ein standardisierter Zugang der Kunden zu den Plasmamodellen als erfolgskritisch angesehen. Die zugehörige Dokumentation erfolgte ebenfalls im PT-Grid-internen Bericht [P2].

Gap-Analyse (AP1c-BW): Im Anschluss an den termingerecht fertiggestellten Bericht [P2] zum Meilenstein 1 begannen die analytisch-konzeptionellen Arbeiten für die Konkretisierung des Geschäftsmodells mit einer Gap-Analyse, in der die geschäftsorientierten Zielvorstellungen dem Ist-Zustand der Grid-Aktivitäten zu Projektbeginn gegenübergestellt wurden. Aus der Soll-Ist-Differenz ergaben sich Lücken als Grundlage der nachfolgenden Aktivität, d. h. der Ableitung des daraus resultierenden Handlungsbedarfs. Die durchgeführten Arbeiten umfassten somit die Gap-Analyse als solche, d. h. die strukturierte Ermittlung von Lücken als Differenz zwischen geschäftsorientierten Zielvorstellungen und dem Ist-Zustand, sowie die Ergebnisdarstellung der Gap-Analyse als bewertete Liste der identifizierten Lücken und als Liste der identifizierten Risiken. Entsprechend den Ergebnissen des vorherigen Arbeitspaketes AP1b-BW wurde die Gap-Analyse nach Projekt-, Lizenz- und Schulungsgeschäft differenziert.

Die Analyse der Lücken erfolgte zuerst je Projektpartner. Anschließend wurden die identifizierten Lücken konsolidiert. Im Ergebnis wurde anhand eines Scoring-Modells¹⁰ eine bewertete Liste der identifizierten Lücken erstellt, in der die wesentlichen Lücken aufgeführt wurden. Hierbei handelte es sich um einen fehlenden Zugang zu den Rechenressourcen des PT-Grids bzw. D-Grids sowie zu Modell(en), Software und Rechenressourcen des plasmatechnischen Beraters. Aber auch ein fehlender Zugang zu externen Rechenressourcen über die PT-Grid/D-Grid-Infrastruktur hinaus inklusive einer Erfassungsmöglichkeit für die Abrechnung von Leistungen wurde als Lücke identifiziert. Weitere Lücken waren ein Fehlen des Lizenzmodells, die fehlende Möglichkeit, Kunden kurzfristig zusätzlich benötigte Lizenzen zu gewähren, und die Schwierigkeit der Bedienung des Online-Beratungswerkzeuges durch Anwender ohne Modellierungskompetenzen. Lücken mit geringerer Priorität im Sinne von Dringlichkeit innerhalb des Projekts bezogen sich auf erforderliche Marketingmaßnahmen hinsichtlich Nutzenargumentation, Testmöglichkeit und der Möglichkeit einer wissenschaftlichen Zusammenarbeit. Als Lücken, die vor allem in der Betriebsphase zentral werden, wurden eine zu geringe Kundenanzahl im Projektgeschäft und eine unprofessionelle Betreuung bzw. Beratung des Kunden zur Nutzung von Plasmamodellen identifiziert.

In einem nächsten Arbeitsschritt wurde für jede der Lücken eine Risikodiskussion geführt. Das Ergebnis wurde in einer Liste der identifizierten Risiken dokumentiert. Hierbei wurde jedes Risiko detailliert nach Risikoinhalt, Fristigkeit und Risikohandhabung beschrieben und wiederum anhand eines Scoring-Modells priorisiert. Die Dokumentation des Arbeitspaketes AP1c-BW erfolgte im Rahmen des PT-Grid-internen Berichts „Ergebnisbericht Meilenstein 2 Teil I (Gap-Analyse - Ergebnis der Phasentätigkeiten I.3 und

¹⁰Scoring-Modell: Nutzwertanalyse oder auch Punktwertverfahren genannt.

Ableitung des Handlungsbedarfs - Ergebnis der Phasentätigkeiten I.4)“ [P13].

Ableitung des Handlungsbedarfs (AP1d-BW): Basierend auf den im Rahmen der Gap-Analyse ermittelten Lücken wurde der Handlungsbedarf ermittelt, der im weiteren Projektverlauf bzw. nach Projektende durch die plasmatechnischen Berater und/oder die Verwertungsorganisation abzudecken war. Der Handlungsbedarf wurde anschließend in einen Aktionsplan überführt, in dem insgesamt 17 Aktionsfelder für die Projektarbeit beschrieben sind:

1. Nutzungs- und Zugangsmöglichkeiten zu den D-Grid-Ressourcen als grundlegende Voraussetzung einer Verwertung prüfen.
2. Bei gegebener Nutzungsmöglichkeit von D-Grid-Ressourcen Modalitäten des Zugangs und der Nutzung (insbesondere Lizenzmodell) klären.
3. Möglichkeit der Bildung eines Grids aus den Ressourcen der beteiligten Projektpartner klären und bei Vorliegen der Möglichkeit eine grundlegende Vereinbarung hierüber herbeiführen.
4. Bei gegebener Nutzungsmöglichkeit von Grid-Ressourcen der Partner Modalitäten des Zugangs und der Nutzung (insbesondere Lizenzmodell) klären.
5. Alternativen für die Inanspruchnahme externer Rechenressourcen identifizieren und analysieren.
6. Zugänge zu Modell(en), Software und Rechenressourcen des plasmatechnischen Beraters für Kunden einrichten.
7. Lizenzmodell für den Zugang zu vorhandenen oder entwickelten Plasmamodellen entwickeln.
8. Möglichkeit kurzfristiger Lizenzen technisch und lizenzrechtlich klären.
9. Modellangebot verschiedener Plasmamodelle im Sinne eines Produktspektrums der Verwertungsorganisation klären und hierbei gegebenenfalls eine Angebotsdifferenzierung nach privatwirtschaftlichem Angebot und Angebot für Forschungseinrichtungen vornehmen.
10. Modell mit Testgeometrie als Trainings- bzw. Testangebot entwickeln, das den Vertrieb in der Verwertungsorganisation unterstützen kann.
11. Anwenderfreundliche Ergonomie der Oberfläche des Online-Beratungswerkzeuges sicherstellen.

12. Für vertriebliche Aktivitäten ist eine Vorteilsargumentation für die Leistungen der Verwertungsorganisation zu entwickeln, beispielsweise hinsichtlich der Nutzung umfangreicherer Rechenressourcen.
13. Für vertriebliche Aktivitäten ist ein Kommunikationskonzept für Kunden und Interessenten zu entwickeln.
14. Für die wissenschaftliche Zusammenarbeit zwischen Forschungseinrichtungen und Kunden der Verwertungsorganisation ist ein grundlegendes Konzept zu entwickeln, das aus Sicht der Verwertungsorganisation vor allem die wirtschaftliche Tragfähigkeit beinhalten muss.
15. Für die Akquisition von Kunden der Verwertungsorganisation ist eine Vertriebsstrategie zu entwickeln, die nach Lizenz- und Projektgeschäft differenziert
16. Nutzung von bestehenden Referenzen der Projektpartner durch die Verwertungsorganisation ermöglichen.
17. Kundenbetreuungskonzept entwickeln, das sämtliche Aspekte des CRM¹¹ inklusive einer technischen Unterstützung abdeckt.

Für jedes dieser Aktionsfelder wurde eine Kostenbetrachtung vorgenommen, die sich am Design-to-Cost-Ansatz¹² orientiert und eine grobe Abschätzung im Hinblick auf die Folgekosten der Verwertungsorganisation vornimmt. Die Dokumentation des Arbeitspaketes AP1d-BW erfolgte wiederum im Rahmen des PT-Grid-internen Ergebnisberichts [P13].

6.1.2.2 Gründungsplanung

Die zweite Phase (AP2-BW) beinhaltet die Durchführung einer vertriebsorientierten Marktstudie, die PT-Grid-orientierte Überprüfung und Präzisierung des Geschäftsmodells und die darauf basierende Ableitung einer „PT-Grid-Verwertungsorganisation“ bzw. von Alternativen hierfür. Die Aktivitäten der zweiten Phase sind in Abbildung 10 graphisch dargestellt.

Durchführung der Marktstudie (AP2a-BW): Die Durchführung der Marktstudie ist das erste Arbeitspaket der zweiten Phase, der Gründungsplanung. Zur Vorbereitung der Marktstudie sollten umfangreich Kundendaten der Projektpartner verwendet werden. Diese Daten konnten jedoch aufgrund von Geheimhaltungsvereinbarungen nur sehr begrenzt zur Verfügung gestellt werden. Der Umfang war so gering, dass die geplante Konsolidierung

¹¹CRM: Customer-Relationship-Management; Kundenbeziehungsmanagement oder Kundenpflege

¹²Design-to-cost: kostenorientierte (Weiter-)Entwicklung

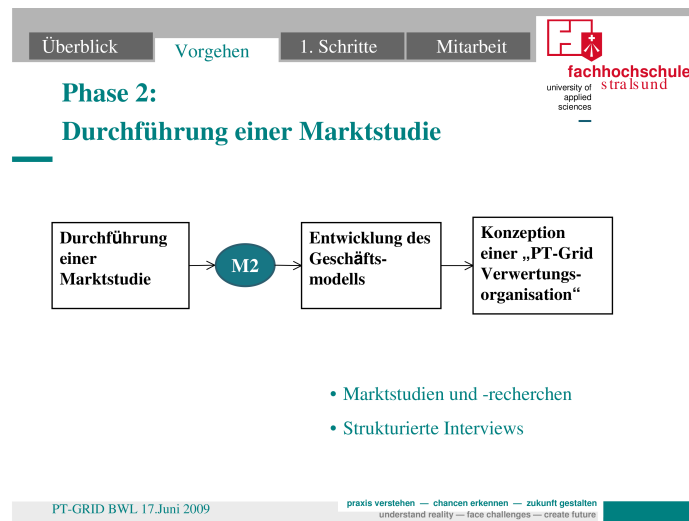


Abbildung 10: Aktivitäten der Phase 2: Gründungsplanung

und Gruppierung nicht sinnvoll durchgeführt werden konnte. Die Befragung der Kundestämme konzentrierte sich dementsprechend auf Einzelfälle. Als ausgleichende Maßnahme wurde die vorgesehene Kurzbefragung zu einem strukturierten Interview von etwa einer Stunde Dauer umgestaltet. In 13 Interviews wurde ein Abbild des Marktumfeldes der Projektpartner erstellt. Die Auswertung der qualitativen Analyse ging über die geplante quantitative Analyse hinaus und gestaltete sich entsprechend aufwändig. Der ursprünglich geplante Termin für den zweiten Teil des Meilensteins 2 konnte aus diesen Gründen nicht eingehalten werden.

Als Basis der Marktstudie wurde ein Interviewleitfaden entwickelt, der plangemäß im März und April 2011 erstellt und umfangreich mit den Projektpartnern abgestimmt wurde. Die Fragebögen wurden den Interviewpartnern im Vorfeld des Interviews zugesendet, so dass diese zu einer Vorbereitungszeit hatten. Die Ergebnisse eines jeden Interviews wurden den Interviewpartnern zwecks Prüfung zur Kenntnis gegeben. Anschließend wurden die Ergebnisse anonymisiert verdichtet.

Im Ergebnis der Marktstudie wurden Anforderungen an das Geschäftsmodell erstellt. Zur Strukturierung der Anforderungen wurde das Wertkettenmodell nach Porter verwendet, siehe Abbildung 11 [2], da dieses auch in der nächsten Phasenaktivität zum Einsatz gelangte. Es bildet die Grundlage aller heutigen Konzepte des Geschäftsprozess-Managements

Die Dokumentation der Anforderungen erfolgte als Liste der Anforderungen an das Geschäftsmodell. Diese Liste umfasst 52 Einzelanforderungen, die den Bereichen des Porterschen Wertkettenmodells, also Infrastruktur, Personal, Technologieentwicklung usw., zugeordnet sind. In Tabelle 3 sind beispielhaft die Anforderungen der Aktivität „Beschaf-

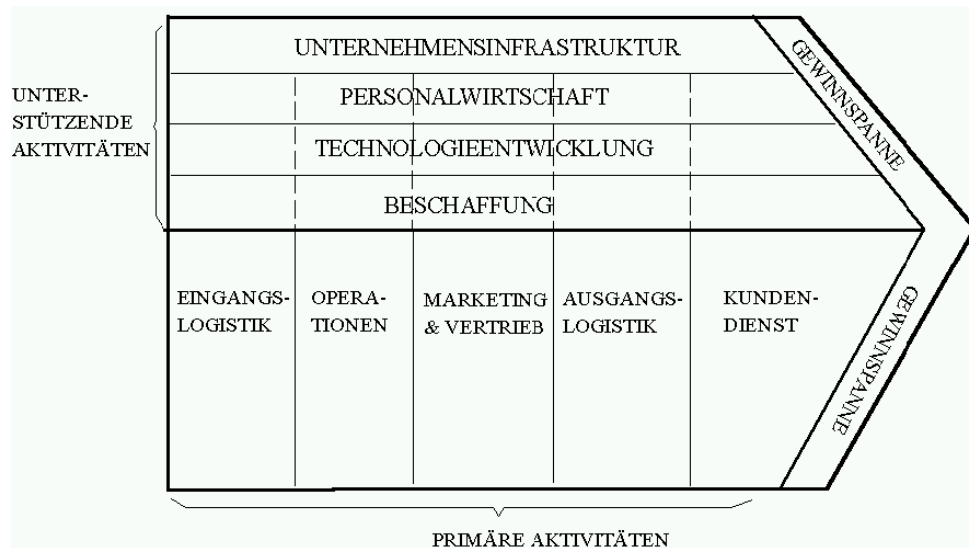


Abbildung 11: Modell einer Wertkette nach Porter [2]

fung“ an das Geschäftsmodell dargestellt.

Die Dokumentation dieses Arbeitspaketes erfolgte im Rahmen des PT-Grid-internen Berichts „Ergebnisbericht Meilenstein 2 Teil II (Durchführung der Marktstudie - Ergebnis der Phasentätigkeit II.1)“ [P20].

Entwicklung des Geschäftsmodells (AP2b-BW): Grundlage des ursprünglichen Geschäftsmodells war die Nutzung von Grid-Ressourcen für kommerzielle Zwecke. Hierbei unterteilen sich die Grid-Ressourcen in Rechenressourcen und grid-bezogene Software.

Das PT-Grid-Projekt hatte das Ziel, auf der Basis der Ressourcen und Erfahrungen des D-Grids eine Infrastruktur zu erarbeiten und aufzubauen. Dieses Ziel konnte für industrielle Anwendungen nicht erreicht werden, da im Projektverlauf deutlich wurde, dass die Organisationen im D-Grid keine kommerziellen Anwendungen auf Rechenressourcen des D-Grids zulassen können. In der Konsequenz dieses Hindernisses musste sich auch die betriebswirtschaftliche Begleitberatung bei der Konzeption der Verwertungsorganisation von dieser wesentlichen Voraussetzung des Geschäftsmodells trennen. Die D-Grid-Rechenressourcen werden innerhalb des PT-Grids somit ausschließlich für wissenschaftliche nichtkommerzielle Anwendungen genutzt.

Zum Ausgleich musste auf die alternative Nutzung von Cloud-Ressourcen kommerzieller Anbieter zurückgegriffen werden. Die Fachhochschule Stralsund identifizierte deshalb frühzeitig passende Ansprechpartner und konzipierte Möglichkeiten der Zusammenarbeit, die z. B. in den PT-Grid-internen Berichten „Kooperation PT-Grid mit GROUP Live“ [P14] und „Kooperation PT-Grid mit GWDG“ [P15] dargelegt wurden. Weiterhin wurde ein Marktüberblick über Cloudanbieter erstellt und im PT-Grid-internen Bericht „Marktüberblick Cloud-Anbieter“ [P21] zusammengefasst, um hier weitere Optionen für

Tabelle 3: Anforderungen der Aktivität „Beschaffung“ an das Geschäftsmodell

Beschaffung	Im Rahmen von Technologieentwicklung und Beschaffung sollten nur bewährte Simulationsmodelle Berücksichtigung finden.
	Für das beratungsorientierte Projektgeschäft sind im Rahmen einer juristischen Beratung vertragliche Voraussetzungen zu schaffen, ebenso gegebenenfalls Versicherungen. Dies hat die Beschaffung sicherzustellen.
	Für das Teilsegment der Unternehmen, die durch hohe Rechenzeiten in ihren Arbeitsabläufen limitiert werden, ist ein Angebot bezüglich externer Rechenressourcen von der Beschaffung sicherzustellen und im Rahmen der Unternehmensinfrastruktur anzubieten.
	Marketing/Vertrieb sollten in Zusammenarbeit mit der Beschaffung eigene Muster für vertragliche Sicherheitsvereinbarungen, z. B. ein Non-Disclosure Agreement (Geheimhaltungsvertrag) entwickeln, die die voraussichtlichen Sicherheitsanforderungen ihrer industriellen Kunden abbilden.
	Den Sicherheitsbedenken der industriellen Kunden muss dadurch Rechnung getragen werden, dass in der Beschaffung und der Eingangslogistik entsprechende Sicherheitsmaßnahmen ergriffen bzw. geregelt werden.

eine Verwertung nach der Projektlaufzeit zu eröffnen. Der Projektleitung (INP Greifswald) ist es zudem gelungen, mit T-Systems erste Ansätze der Zusammenarbeit mit kommerziellen Ressourcen zu entwickeln und den Zugang zu kommerziellen Ressourcen - vorbehaltlich einer Nutzungserlaubnis - in der PT-Grid-Infrastruktur (Abbildung 5) zu integrieren.

Als zweites wesentliches Hindernis stellte sich die wissenschaftlich orientierte Softwareentwicklung im D-Grid heraus. Neben unzureichender Dokumentation z. B. im Bereich Lizenzmanagement und -server (siehe auch Arbeitspaket AP4-TP2 im Abschnitt 6.3) behinderte die fehlende Nachhaltigkeit bei der (Weiter-)Entwicklung von Softwarelösungen die strategisch orientierte Verwendung durch kommerziell orientierte Anwender. Beim Projektpartner CFX Berlin Software GmbH im Teilprojekt 1 (Abschnitt 6.2) wird eine weitere Anwendung einer virtuellen Maschine der Philipps-Universität Marburg deshalb voraussichtlich nicht möglich sein. Eine Überführung der entwickelten Technologie der virtuellen Maschine zu anderen Trägerorganisationen wurde von der Projektleitung erfolglos ange-

strebt. Da Virtualisierung eine Grundlage des Cloud-Computings darstellt, entstanden perspektivisch Hindernisse bei der Nutzung von kommerziellen Cloud-Ressourcen.

Trotz dieser Hindernisse entwickelte der Projektpartner ESI Eschborn ein Lizenzmodell (Arbeitspaket AP4-TP2 im Abschnitt 6.3) für die Software CFD-ACE+ und etablierte einen Lizenzserver in der Infrastruktur des PT-Grids (Abbildung 5). Dadurch ist es gelungen, eine demonstrative Lösung zu erstellen, deren Anpassung als Dienstleistung durch die beteiligten Projektpartner angeboten werden kann. Hinzu kommt die Präsentation der Modelle der Projektpartner gegenüber potentiellen Kunden im Rahmen des Marketings.

Aufgrund der genannten Hindernisse wurde die Entwicklung des Geschäftsmodells entsprechend den Entwicklungen im Projekt angepasst. Die Geschäftsmodellentwicklung basierte auf den Ergebnissen des Meilensteins 2, d. h. der Durchführung der Marktstudie (AP2a-BW), die im PT-Grid-internen Bericht „Ergebnisbericht Meilenstein 2 Teil II (Durchführung der Marktstudie - Ergebnis der Phasentätigkeit II.1)“ [P20] dargestellt sind. Der inhaltliche Umfang der Entwicklung des Geschäftsmodells richtete sich entsprechend dem Projektantrag auf eine gesamtheitliche Beschreibung, bei der jedoch einige Handlungsbereiche fokussiert und andere eher grob beschrieben werden. Zuerst wurden theoretische Grundlagen zum Begriff des Geschäftsmodells erörtert, insbesondere das weit verbreitete Wertkettenmodell nach Porter, das der Strukturierung der vorgenommenen Geschäftsmodellentwicklung diene.

Die Modellentwicklung erfolgte in zwei Schritten. Zuerst wurden die im Arbeitspaket AP2a-BW ermittelten Anforderungen den primären und sekundären Aktivitätengruppen des Wertkettenmodells zugeordnet und in eine konsolidierte Beschreibung je Aktivitätengruppe überführt. Im zweiten Schritt erfolgte eine Erweiterung des Geschäftsmodells. Hierfür wurden sämtliche Konzepte der betriebswirtschaftlichen Begleitberatung sowie Dokumente der Projektpartner, anderer D-Grid-Projekte und weitere Literatur herangezogen. Hieraus resultierte sowohl eine inhaltliche Komplettierung als auch eine Verprobung der Konsistenz mit der Arbeit der Projektleitung und der weiteren Projektpartner. Im Ergebnis liegt ein ausformuliertes Geschäftsmodell vor, das als Grundlage der weiteren Konzeption der „PT-Grid-Verwertungsorganisation“ diene. Die konzeptionellen Ausführungen beinhalten zudem Zusammenfassungen für jede Aktivitätengruppe des Wertkettenmodells, die als Input für Präsentationen des Geschäftsmodells genutzt werden können. Die Dokumentation dieses Arbeitspaketes erfolgte im Rahmen des PT-Grid-internen Berichts „Ergebnisbericht Meilenstein 3 Teil I (Entwicklung des Geschäftsmodells - Ergebnis der Phasentätigkeit II.2)“ [P22].

Konzeption einer „PT-Grid-Verwertungsorganisation“ (AP2c-BW): Mit den Ergebnissen dieses Arbeitspaketes wurde die zweite Phase der betriebswirtschaftlichen Begleitbe-

ratung, die Gründungsplanung, erfolgreich abgeschlossen. Die Konzeption einer PT-Grid-Verwertungsorganisation richtet sich auf die grundlegenden Fragen eines strukturellen Rahmens für die Kooperation der Projektpartner hinsichtlich der gemeinsamen Verwertung der erzielten Projektergebnisse.

Für die Standortwahl wurde eine Nutzwertanalyse mit den durch Literaturrecherche gestützten Bewertungskriterien Arbeitsmarkt, Gewerbesteuer, Energieversorgung, Büroräumlichkeiten sowie Verkehrs- und Marktanbindung durchgeführt. Das Kriterium „Lieferantennähe“ wurde in der Analyse als irrelevant gestrichen. Als Standortalternativen wurden die Städte Berlin, Bochum, Braunschweig, Eschborn und Greifswald betrachtet, also die Standorte, die dem Firmen- oder Organisationssitz von am PT-Grid-Projekt beteiligten, geförderten Partnern entsprechen. Für die Bewertung wurden Skalen mit Nutzwerten von 1 bis 10 Punkten verwendet, was zu einem Maximalnutzwert von 1000 Punkten führt. Im Ergebnis ergab sich folgende Rangfolge: (1) Bochum, 710 Punkte; (2) Greifswald, 563 Punkte; (3) Berlin, 479 Punkte; (4) Braunschweig, 419 Punkte und (5) Eschborn, 247 Punkte. Somit lautet die Empfehlung für den Standort der PT-Grid-Verwertungsorganisation auf Bochum. Sollte aus gesellschaftspolitischen Gründen ein anderer Standort erforderlich sein, sollte Bochum als Zweitstandort, beispielsweise als Niederlassung, in Betracht gezogen werden, um die mit diesem Standort verbundenen Vorteile (vor allem hinsichtlich des Zugangs zu hochschulischen und wissenschaftlichen Einrichtungen und in Bezug auf die exzellente Marktanbindung) zu realisieren. Dies würde sich anbieten, wenn die PT-Grid-Verwertungsorganisation eine Ausgründung aus dem INP Greifswald werden sollte, das dann wahrscheinlich als Mehrheitsgesellschafter agieren würde.

Die Analyse der für eine PT-Grid-Verwertungsorganisation zu wählenden Rechtsform bezieht sich grundlegend auf die von PricewaterhouseCoopers Legal AG (PwC), Düsseldorf, am 19.10.2010 vorgelegte Stellungnahme, die im Auftrag der D-Grid GmbH erstellt wurde. Die in dieser Stellungnahme [3] von der weltweit führenden Wirtschaftsprüfungsgesellschaft aufgeführten Gründe wurden für die PT-Grid-Verwertungsorganisation untersucht und bestätigt. Auch neuere Rechtsformen, wie die Kleine Aktiengesellschaft (AG), die englische Limited (Ltd.) und die deutsche haftungsbeschränkte Unternehmergesellschaft (UG) als Sonderform der GmbH, wurden berücksichtigt. Als wichtiger zusätzlicher Vorteil im Vergleich der Gesellschaftsformen ist der höhere Formalisierungsgrad der GmbH (Gesellschaft mit beschränkter Haftung) hervorzuheben. Dieser fordert von den Gesellschaftern in der Gründungsphase eine genaue Klärung der gegenseitigen Rechte und Pflichten sowie der Aufgaben und Verantwortlichkeiten. Die häufig genannten Nachteile der GmbH (vor allem die Höhe des Mindestkapitals und die Eintragung in

das Handelsregister) treffen für die PT-Grid-Verwertungsorganisation nicht zu, da diese geradezu auf derartige seriöse Rahmenbedingungen angewiesen ist, um die definierte Zielgruppe der forschungsintensiven Industrieunternehmen zu adressieren. Die PT-Grid-Verwertungsorganisation sollte somit in der Rechtsform einer Gesellschaft mit beschränkter Haftung gegründet werden. Das Stammkapital dieser GmbH sollte das gesetzliche Mindestkapital in Höhe von 25 Tsd. € deutlich überschreiten. Empfohlen wird ein Stammkapital in Höhe von mindestens 300 Tsd. €, das aus Vereinfachungsgründen von den Gesellschaftern als Bareinlage zu erbringen ist.

Hinsichtlich der Konzeption der Organisationsstruktur wurden strukturelle Alternativen entwickelt, die von einer gering strukturierten Zusammenarbeit im Einzelfall (lose Kopplung) über die gesteuerte Nutzung gemeinsamer Ressourcen auf Vertragsbasis (strukturierte Zusammenarbeit im Integrator-Modell) bis hin zu einer Gemeinschaftsgründung (Kapitalgemeinschaft im Joint-Venture-Modell) reichen. Im Rahmen dieser Alternativen wurden ihre Voraussetzungen diskutiert, Aufgaben- und Qualifikationsprofile entwickelt, die Aufbaustruktur als Organigramm dargestellt und die Risiken der jeweiligen Struktur betrachtet. Als geeignete Koordinationsinstrumente wurden identifiziert:

- ein Steuerungsgremium, in dem die verschiedenen Partner der PT-Grid-Verwertungsorganisation vertreten sind,
- Verrechnungssysteme, mit denen die Leistungen und Gegenleistungen vor allem in ihrer finanziellen Dimension gesteuert werden,
- Anreizsysteme, mit denen sich priorisierte Leistungsbeiträge der Partner steuern lassen und
- Richtlinien und Standards, die handlungsleitende Vorgaben hinsichtlich der erforderlichen Leistungsqualität und -sicherheit machen.

Für die Kapitalgemeinschaft im Joint-Venture-Modell wurden die alternativen Anteilsverteilungen am Stammkapital einer GmbH aufgezeigt sowie die Rechte und Pflichten der Gesellschafter einer PT-Grid-Verwertungsorganisation GmbH erörtert. Für die Annahme, dass die PT-Grid-Verwertungsorganisation einen Mehrheitsgesellschafter haben wird, wurden als Alternativen des Minderheitenschutzes

- die Einschränkung der Abberufung als Geschäftsführer,
- Zustimmungsvorbehalte zugunsten von Minderheitsgesellschaftern,
- Vetorechte zugunsten von Minderheitsgesellschaftern und

- die Erhöhung der Stimmenzahl in der Gesellschafterversammlung

diskutiert.

Für die Finanzierung wurde eine komplette Geschäftsplanung für den Planungszeitraum 2013 bis 2017 in einer realistischen, einer pessimistischen und einer optimistischen Variante durchgeführt. Selbst bei der optimistischen Planung kann die PT-Grid-Verwertungsorganisation erst im zweiten Geschäftsjahr ein positives Jahresergebnis erreichen. Bei der realistischen Planung ist dies erst im dritten Geschäftsjahr der Fall. Danach wird eine Umsatzrendite von über 30% erwirtschaftet. Hinsichtlich der Finanzierung zeigt sich, dass die PT-Grid-Verwertungsorganisation auf ein Stammkapital in Höhe von (mindestens) 300 Tsd. €, die Inanspruchnahme von Fördermitteln und eine zusätzliche Kreditaufnahme angewiesen ist, wenn nicht die Gesellschafter zu einer höheren Einlage bereit sind. Erst nach der Hälfte des Planungszeitraumes kann der jährliche Finanzbedarf aus dem Chashflow gedeckt werden. Die errechneten Zahlen geben den derzeitigen Planungsstand so gut wie möglich wieder. Bei den Kosten wurden aktuelle Werte bezogen auf den Standort Greifswald ermittelt. Trotzdem soll das Zahlenwerk eher die wirtschaftlichen Zusammenhänge aufzeigen, die bei einer künftigen Gründung zu bedenken sind. Sollte diese erfolgen, kann die (als Excel-Datei) vorliegende Geschäftsplanung für eine konkrete Planung genutzt werden.

Das Arbeitspaket AP2c-BW wurde im Rahmen des PT-Grid-internen Berichts „Ergebnisbericht Meilenstein 3 Teil II (Konzeption einer „PT-Grid-Verwertungsorganisation“ - Ergebnis der Phasentätigkeit II.3)“ [P23] in Verbindung mit dem Bericht „Anlage zu Ergebnisbericht Meilenstein 3 Teil II (Konzeption einer „PT-Grid-Verwertungsorganisation“ - Ergebnis der Phasentätigkeit II.3) - Geschäftsplanungen für den Planungszeitraum 2013-2017“ [P24] dokumentiert.

6.1.2.3 Abschließende Soll-Ist-Analyse

Mit der Soll-Ist-Analyse im Anschluss an die Pilotphase sollte überprüft werden, ob die Zielvorstellungen und das entwickelte Geschäftsmodell für die im Rahmen des Projektes realisierten Plasma-Technologie-Grid-Ressourcen und -Dienstleistungen realistisch sind. Hierzu sollte der Verlauf der Pilotanwendungen ausgewertet werden. Auf dieser Basis sollten die Annahmen, Modelle, Kalkulationen usw. des Geschäftsmodells kritisch auf ihre Realitätsnähe geprüft und gegebenenfalls angepasst werden. Im Ergebnis sollte eine Bewertung vorliegen, die in die weiteren Maßnahmen der Anpassung des Geschäftsmodells bzw. der Umsetzung der „PT-Grid-Verwertungsorganisation“ führen sollte. Als Aktivitäten dieser dritten Phase (AP3-BW), die in Abbildung 12 graphisch dargestellt sind, waren die Auswertung der Pilotphase (AP3a-BW), die Prüfung des Geschäftsmodells und der

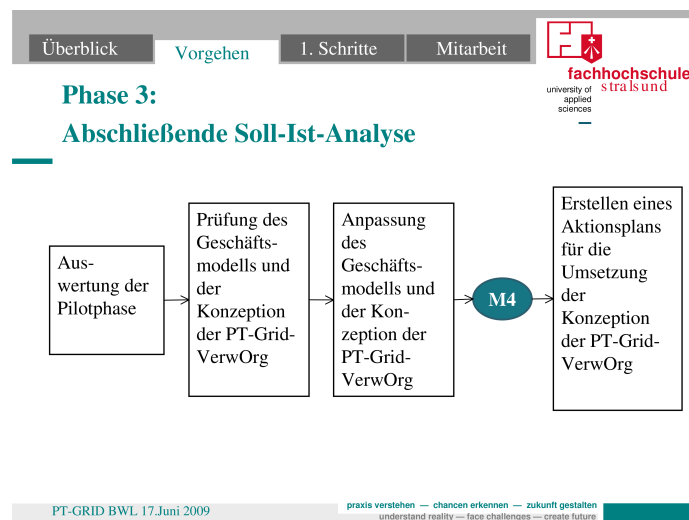


Abbildung 12: Aktivitäten der Phase 3: Abschließende Soll-Ist-Analyse

Konzeption der „PT-Grid Verwertungsorganisation“ (AP3b-BW), die Anpassung des Geschäftsmodells und der Konzeption der „PT-Grid Verwertungsorganisation“ (AP3c-BW) sowie die Erstellung eines Aktionsplans für die Umsetzung der Konzeption der „PT-Grid-Verwertungsorganisation“ (AP3d-BW) vorgesehen.

Das Verbot der kommerziellen Nutzung der D-Grid-Ressourcen (siehe auch Arbeitspaket AP2b-BW) hatte erhebliche Auswirkungen auf den Arbeitsplan, da ein wesentliches Aufgabenfeld der zu gründenden PT-Grid-Verwertungsorganisation wegfiel. Zusammen mit den Ergebnissen der Marktstudie [P20] führte dies zum Fallenlassen der konkreten Gründungspläne und zu entsprechenden Verzögerungen bei der Erstellung der PT-Grid-internen Berichte [P22, P23] zu Meilenstein 3 (Vorliegen der Konzepte zum Geschäftsmodell und der PT-Grid-Verwertungsorganisation).

Aufgrund der Verzögerungen und genannten Schwierigkeiten konnte die angestrebte Pilotphase im Rahmen des Projektes nicht mehr durchgeführt werden. Insofern entfielen die Arbeitspakete AP3a-BW, AP3b-BW und AP3c-BW. Ersetzend zu AP3c-BW wurde die Geschäftsplanung anhand des von der ESI GmbH Eschborn erstellten Lizenzvertrags- und Abrechnungsmodells (siehe Abschnitt 6.3, Arbeitspaket AP4-TP2 und den PT-Grid-internen Bericht [P26]) in ihrer realistischen Variante angepasst. Das Arbeitspaket AP3d-BW wurde neu ausgerichtet und enthält jetzt eine Beschreibung der Aktionen, die erforderlich sind, um bei einer Fortführung der Projektarbeit einen parallelen Geschäftsaufbau zu verfolgen.

Die Dokumentation der dritten Phase erfolgte im Rahmen des PT-Grid-internen Berichtes „Ergebnisbericht Phase III (Auswertung der Pilotphase - Ergebnis der Phasentätigkeit III.1, Prüfung des Geschäftsmodells und der Konzeption der „PT-Grid-

Verwertungsorganisation“ - Ergebnis der Phasentätigkeit III.2, Anpassung des Geschäftsmodells und der Konzeption der „PT-Grid Verwertungsorganisation“ - Ergebnis der Phasentätigkeit III.3 und Erstellung eines Aktionsplans für die Umsetzung, Konzeption der „PT-Grid-Verwertungsorganisation“ - Ergebnis der Phasentätigkeit III.4)“ [P25] zum Meilenstein 4, der inhaltlich den geänderten Bedingungen angepasst wurde.

6.1.2.4 Lektorat und Dokumentation

Das Arbeitspaket 4 der betriebswirtschaftlichen Begleitberatung durch die Fachhochschule Stralsund (AP4-BW) beinhaltete die Erstellung, Prüfung und zentrale Ablage von Berichten, Schulungsunterlagen und andere Materialien. Dem Zuwendungsentscheid entsprechend verfasste der Fachbereich Wirtschaft der Fachhochschule Stralsund halbjährlich zu Mitte Februar und August eines Jahres jeweils einen Zwischenbericht, der dem Projektträger zugeleitet wurde. Diese Zwischenberichte und die PT-Grid-internen Berichte [P2, P6, P13–P15, P18, P20–P25, P31] sowie Präsentationen der Fachhochschule Stralsund wurden im Allgemeinen auf dem BSCW-Server <http://bscw.uni-duisburg-essen.de/bscw/bscw.cgi/> abgelegt bzw. liegen dem Projektkoordinator (INP Greifswald) vor.

6.2 Teilprojekt 1: Simulation von Schweiß- und Schneidprozessen mit ANSYS CFX im D-Grid

A. Spille-Kohoff und B. Bosc-Bierne

CFX Berlin Software GmbH

Ziel des Teilprojektes 1 war die exemplarische Erprobung für das gesamte Plasma-Technologie-Grid, inwieweit komplexe Programme, wie das kommerzielle CFD-Programm ANSYS CFX, über Virtualisierung Grid-fähig gemacht und hierbei grundlegende Anforderungen erfüllt werden können. Ausgangspunkt waren zwei Hauptprobleme von kleinen und mittleren Unternehmen bei komplexen Plasmasimulationen. Zum einen sind ihre lokal vorhandene Rechenkapazität und die Softwarelizenzen auf den Grundbedarf abgestimmt. Sind im Verlauf einer Produktentwicklung aufwändigere oder mehrere Berechnungen notwendig, so fehlen die hierfür notwendigen Rechenkapazitäten und Softwarelizenzen, so dass diese Berechnungen gar nicht oder nicht in der vorgesehenen Zeit durchgeführt werden können. Zum anderen fehlt das notwendige Fachwissen, um eine erfolgreiche Simulation durchzuführen, oder es ist auf nur eine Person beschränkt.

Das Teilprojekt 1 war in das Ziel des Plasma-Technologie-Grid-Verbundprojekts eingebettet, kleinen und mittleren Unternehmen den Zugang zu komplexen plasmatechnischen Berechnungen auf der Basis der D-Grid-Infrastruktur zu ermöglichen. Um die verschiedenen Arten von Anfragen beantworten zu können, sollte ein Verwertungsmodell entwickelt werden, das die Auslagerung einfacher bzw. komplexer Simulationen in Grid-Umgebungen sowie ein Online-Beratungswerkzeug beinhaltet.

Bei der Auslagerung einfacher Simulationen in Grid-Umgebungen erfolgt das Pre-processing lokal beim Benutzer. Die notwendigen Löserdaten werden dann in die Grid-Umgebung hochgeladen und die Berechnung findet dort statt. Am Ende der Simulation werden die Ergebnisse heruntergeladen und das Postprocessing erfolgt wieder lokal. Komplexere Simulationen sollen auch komplett in der Grid-Umgebung stattfinden können. Dazu gehören Parametervariationen, Optimierungen (teilweise inklusive Pre- und Postprocessing) mit Monitoring, Interaktion und Multiphysikanwendungen.

Das Verwertungsmodell mittels Online-Beratungswerkzeug soll das fehlende Fachwissen im Unternehmen durch eine vom externen Plasmaberater vorbereitete Simulationsumgebung ersetzen (siehe Abbildung 8). In einer ersten Phase wird die Aufgabenstellung vom Plasmaberater erfasst. In einem zweiten Schritt werden ein Grid-fähiges Plasmamodell, die notwendige Infrastruktur (Daten, Lizenzen, Ressourcen) und eine endnutzerfreundliche Steuerungsoberfläche dem Benutzer zur Verfügung gestellt. Zusätzlich werden noch Schulungen, Support und Dokumentation angeboten. In einer dritten Phase wäre es mög-

lich, die Ergebnisse des Kunden vom Plasmaberater (z. B. in einem Wiki) interpretieren und kommentieren zu lassen. Insbesondere wenn es in industrieller Umgebung zur Simulation von Schweiß- und Schneidprozessen eingesetzt werden soll, erfordert dieses Modell die Nutzung eines komplexen kommerziellen und bereits weit verbreiteten Programms für Strömungssimulation. Ferner sind die Sicherheit der Simulations-, Benutzer- und Benutzungsdaten, sowie Bedienfreundlichkeit von Zertifizierung, Authentifizierung und Billing, der Installation und Vorbereitung der Software, der Jobeinreichung, des Datentransfers und des Scheduling notwendig. Des Weiteren erfordert es Übertragbarkeit auf andere Anwendungen, andere Software und andere Ressourcen, Zuverlässigkeit durch Scheduling, Service-Level-Agreement (SLA) und durch Planungssicherheit sowie Nachhaltigkeit. Durch die beiden letzten Punkte soll der Benutzer die Garantie haben, dass seine Berechnungen - je nach Bezahlung - kurzfristig starten (Scheduling), soll klar sein, welche Leistungen der Benutzer zu erwarten hat und wer haftet (SLA), und soll garantiert werden, dass die Hardware-Infrastruktur und die Schnittstellen, wie Middleware und Portal, langfristig zur Verfügung stehen (Planungssicherheit) und die entwickelte Lösung langfristig funktionsfähig ist (Nachhaltigkeit).

Das Teilprojekt wurde von der CFX Berlin Software GmbH geleitet. Die Umsetzung der Virtualisierung erfolgte im Unterauftrag durch die Philipps-Universität Marburg, Fachbereich Mathematik und Informatik, Arbeitsgruppe „Verteilte Systeme“. Um die CFX Berlin Software GmbH bei der Erstellung eines Anforderungshefts und bei der Evaluierung der entwickelten Lösung zu unterstützen, waren die vier assoziierten Partner Institut für Oberflächentechnik der Technischen Universität Dresden, Kjellberg Finsterwalde Plasma und Maschinen GmbH, Linde AG in Unterschleißheim und EWM Hightec Welding GmbH, Mündersbach am Teilprojekt 1 beteiligt.

Die Arbeitsplanung beinhaltete elf Arbeitspakete (AP1-TP1 bis AP11-TP1). Sie ist im Anhang A.2 in Abbildung 97 einschließlich der geplanten Meilensteine dargestellt. Die wesentlichen Ergebnisse erfolgten gemäß des PT-Grid-internen Berichts „Schlussbericht zur Arbeit von CFX Berlin: Virtuelle Infrastruktur für rechenintensive Master-Slave-Prozesse im D-Grid am Beispiel der Software ANSYS CFX“ [P32] in den Gebieten

- A: Soll-Ist-Erfassung zu Projektbeginn (AP1-TP1),
- B: Betreuung der Weiterentwicklung der Virtualisierungslösung (Teilaspekt von AP3-TP1, AP4-TP1 und AP7-TP1),
- C: Einrichtung einer Grid-Infrastruktur bei der CFX Berlin Software GmbH (Teilaspekt von AP3-TP1),
- D: Integration von ANSYS CFX in die virtuelle Maschine (AP3-TP1),

E: Erstellung einer Benutzeroberfläche (AP4-TP1) und Integration ins PT-Grid (AP7-TP1),

F: Betreuung der Pilotanwender (AP5-TP1) sowie

G: Evaluierung der Portierung (AP8-TP1) und Soll-Ist-Erfassung zu Projektende (AP11-TP1).

Die Arbeitspakete AP2-TP1 (erste PT-Grid-Administration), AP6-TP1 (zweite PT-Grid-Administration) und AP9-TP1 (dritte PT-Grid-Administration) beinhalteten die Projekttreffen, Schulungen und Anwendertreffen mit den Pilotanwendern. Die CFX Berlin Software GmbH hat regelmäßig an den Projekttreffen des gesamten PT-Grids und den durch die Projektleitung veranstalteten Schulungen (siehe Tabelle 1) teilgenommen, Projekttreffen des Teilprojektes 1 mit assoziierten Partnern durchgeführt und an vielen der in Tabelle 2 zusammengestellten Veranstaltungen partizipiert. Die Erstellung von Dokumentation und Berichten (AP10-TP1) erfolgte regelmäßig und termingerecht. Die Zwischenberichte an den Projektträger, die PT-Grid-internen Berichte [P1, P5, P8, P32] und die Präsentationen der CFX Berlin Software GmbH sind größtenteils auf dem BSCW-Server <http://bscw.uni-duisburgessen.de/bscw/bscw.cgi/> verfügbar bzw. liegen dem Projektkoordinator (INP Greifswald) vor.

A: Soll-Ist-Erfassung zu Projektbeginn

Die Soll-Ist-Erfassung zu Projektbeginn (AP1-TP1) wurde für die Bereiche Informationstechnik, Online-Beratungswerkzeug und Betriebswirtschaft durchgeführt.

Informationstechnik: Die Software ANSYS CFX wird von ANSYS, Inc. hergestellt und unter anderem von der CFX Berlin Software GmbH vertrieben. Es handelt sich dabei um ein kommerzielles Programm zur Strömungssimulation und ermöglicht die Berechnung von dreidimensionalen reibungsbehafteten Strömungen mit Wärmeübergang in komplexen Geometrien. Die CFX Berlin Software GmbH ist unabhängiger Vertreiber der ANSYS-Software und hatte im Rahmen des BMBF-geförderten Verbundprojekts „ChopArc“ (2001-2004) die Software ANSYS CFX zur Simulation des Lichtbogen-Schweißverfahrens erweitert. Die Plasmasimulationen beinhalten die Berechnung von Strömung, Turbulenz, Wärmestrom, elektromagnetischen Phänomenen sowie Entmischung und die Vorgänge in den Fallgebieten. Da die CFX Berlin Software GmbH über keinen Zugriff auf den Quellcode der Software ANSYS CFX verfügt, kann der Quellcode nicht angepasst werden, was z. B. die Lizenzierung betrifft. Jedoch kann die Software um physikalische und numerische Modelle erweitert werden (sogar durch Fortran).

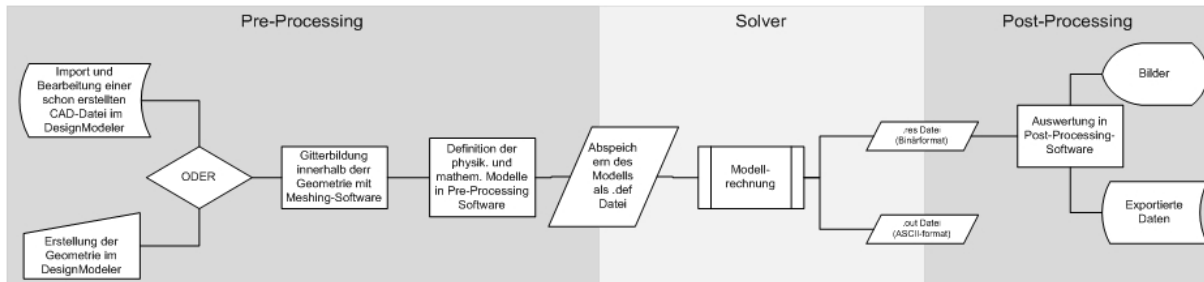


Abbildung 13: Workflow für ANSYS CFX

In ANSYS CFX wird eine Simulation in fünf wesentliche Schritte unterteilt. Zunächst wird die Geometrie der zu untersuchenden Anordnung spezifiziert, wobei CAD-Daten¹³ importiert und bearbeitet oder CAD-Modelle selbst erstellt werden können. Anschließend wird mittels einer Meshing-Komponente¹⁴ die Geometrie vernetzt, wozu unterschiedliche Techniken und Algorithmen zur Erstellung von Gitternetzstrukturen vorhanden sind. Danach können mit Hilfe des Preprocessors von ANSYS CFX die physikalischen und numerischen Modelle für die einzelnen Gitterbereiche ausgewählt und Anfangs- und Randbedingungen angegeben werden. Im Anschluss an diese drei Schritte der Datenvorbereitung wird die Lösung des festgelegten Modells berechnet. Dabei können Zwischenergebnisse abgespeichert und Simulationsparameter auch während der Simulation dynamisch angepasst werden. Der Solver unterstützt dabei die parallele Abarbeitung mit Interprozesskommunikation mittels PVM¹⁵ oder MPI¹⁶. Schließlich werden die Ergebnisse im Postprocessing visualisiert. Dabei können unterschiedliche Werte sowohl numerisch als auch graphisch betrachtet werden. Zu diesem Zwecke werden Ergebnisse sowohl in einem binären als auch einem textbasierten Format ausgegeben. Abbildung 13 zeigt den gesamten Workflow. Er wurde in den in Abbildung 2 dargestellten allgemeinen Arbeitsablauf im Plasma-Technologie-Grid integriert und in den PT-Grid-internen Berichten „Soll-Ist-Erfassung der Informationstechnik-Infrastruktur im PT-Grid“ [P4] und „Meilensteinbericht MT1.1“ [P5] dokumentiert.

Die Eingabedaten des Solvers sind in der Definitionsdatei (.def) enthalten und werden zum Teil auch aus dem Installationsverzeichnis geladen. Die Ergebnisdateien müssen bis zur Übertragung zum Nutzer bzw. zu einem zwischengelagerten Server vorhanden sein. Für den Datenaustausch zwischen den einzelnen Anwendungsschritten werden unterschiedliche Dateiformate verwendet. Ebenso sind die einzelnen Schritte mittels unterschiedlicher Skriptsprachen (Perl) automatisierbar. Im Preprocessing kann der Nutzer

¹³CAD: computer aided design; rechnerunterstützte Konstruktion und Arbeitsplanung

¹⁴Meshing: Gittererzeugung

¹⁵PVM: parallel virtual machine

¹⁶MPI: message passing interface

im Vorfeld Unterbrechungspunkte definieren, d. h., die Berechnung soll aufhören, wenn bestimmte Bedingungen erfüllt sind. Zudem kann der Nutzer jederzeit die Berechnung abbrechen, wobei der aktuelle Zustand als Ergebnisdatei geschrieben wird.

Online-Beratungswerkzeug: Die PT-Grid-internen Berichte [P4,P5] beinhalten zudem Aussagen zur Parallelrechnerausstattung der CFX Berlin Software GmbH, zur parallelen Ausführung von ANSYS CFX, zu den wichtigsten Anwendungsfällen, d. h. der verteilten Lösung mit lokalem Pre- und Postprocessing und der Durchführung von Parameterstudien oder Optimierungsrechnungen mit und ohne Portallösung, sowie zu den Anforderungen von ANSYS CFX z. B. hinsichtlich Betriebssystem, Lizenzmanagement und Bedienfreundlichkeit. Für die Bedienfreundlichkeit der Grid-Anwendung sollte dabei ein Portal (Online-Beratungswerkzeug) zur Verfügung gestellt werden, in dem der Nutzer die Parameter Zuverlässigkeit, Schnelligkeit, Monitoring, Archivierung sowie Anforderungen an die Grid-Ressourcen und Virtualisierungslösung spezifizieren kann. Weitere wichtige Anforderungen betreffen die Nachhaltigkeit der zu erstellenden Architektur und Softwarelösungen. Die notwendige Software sollte auf aktuellem Stand und deren kontinuierliche Pflege und der Support sollten entweder durch den Hersteller oder einen Vertreiber sichergestellt sein. Der Bereich Online-Beratungswerkzeug wurde vom INP Greifswald betreut (siehe Abschnitte 6.1 und 6.3) und durch die CFX Berlin Software GmbH und seine assoziierten Partner unterstützt.

Betriebswirtschaft: Die CFX Berlin Software GmbH unterstützte die Fachhochschule Stralsund bei der Erstellung des bewirtschaftlichen Konzepts. Die Erfassung der Grid-bezogenen geschäftsorientierten Aktivitäten der CFX Berlin Software GmbH erfolgte telefonisch und beinhaltete die Aspekte Projekt- und Lizenzgeschäft, Wettbewerb und Markt, Geheimhaltung, Personal, Kontakte und Kunden sowie Internationalität. Zudem wurden die geschäftsorientierten Zielvorstellung im PT-Grid erläutert. Die Ausführungen der CFX Berlin Software GmbH wurden im PT-Grid-internen Bericht „Meilensteinbericht MT1.1“ [P5] dargelegt, in dem auch die Anforderungen der Pilotanwender an die Virtualisierung zusammengefasst sind. Zudem fanden die Ergebnisse der Befragung, die teilweise vertrauliche Informationen enthielt, Eingang in den PT-Grid-internen Ergebnisbericht „Erhebung der derzeitigen Gridaktivitäten und der geschäftsorientierten Zielvorstellungen (Meilenstein 1) der plasmatechnischen Berater des Plasma-Technologie-Grid-Projektes“ [P2] der Fachhochschule Stralsund (siehe Abschnitt 6.1.2).

B: Betreuung der Weiterentwicklung der Virtualisierungslösung

Die wesentlichen Vorteile der Ausführung der Nutzeranwendung in einer virtuellen Maschine gegenüber der üblichen Ausführung direkt auf den Clusterknoten sind höhere Sicher-

heit, höhere Bedienfreundlichkeit, bessere Übertragbarkeit und bessere Nachhaltigkeit. Eine höhere Sicherheit wird durch die Kapselung der Daten und Anwendung erreicht. Andere Nutzer des Clusterknotens sehen nur, dass eine virtuelle Maschine läuft, aber nicht welche Anwendung. Die Sicherheit ist weniger von den Ressourcen-Providern abhängig, da der Anwender sichere oder optimal auf die Anwendung abgestimmte Betriebssysteme¹⁷ in der virtuellen Maschine nutzen kann, ohne auf die Umgebung des Cluster-Knotens angewiesen zu sein. Zusätzliche Sicherheitskomponenten, wie z. B. Verschlüsselungsmechanismen, sind möglich.

Durch vorgefertigte virtuelle Maschinen anstelle von Neuinstallation erhöht sich die Bedienfreundlichkeit. Bei der Nutzung eines neuen Clusters muss somit nur die fertige virtuelle Maschine übertragen werden. Eine Installation der Anwendersoftware, die bei kommerziellen Programmen häufig Administratorrechte erfordert, ist nicht notwendig. Zudem steigert der Administratorzugang auf virtuellen Maschinen die Bedienfreundlichkeit, da er eine vollständige Kontrolle bzw. Anpassung erlaubt. Probleme mit fehlenden oder falschen Bibliotheken können so direkt vom Anwender für die virtuelle Maschine gelöst und müssen nicht vom Administrator der jeweiligen Cluster-Ressource behoben werden.

Durch die direkte Portierbarkeit der gesamten virtuellen Maschine auf eine andere Ressource ist es auch mit komplexen kommerziellen Programmpaketen leicht, verschiedene Grid-Ressourcen zu nutzen, wenn diese für den Betrieb mit virtuellen Maschinen eingerichtet sind. Zudem können Lösungen, z. B. hinsichtlich Bedienbarkeit oder Sicherheit, für die virtuelle Maschine entwickelt und anschließend für verschiedenste Anwendungen in der virtuellen Maschine verwendet werden, anstatt diese in jede Anwendung zu integrieren, wie beispielsweise eine Laufzeitverschlüsselung von Daten, die auf die Festplatte geschrieben werden.

Da die virtuelle Maschine alle für den Start einer Anwendung notwendigen Komponenten enthält, wie Betriebssystem, Bibliotheken, Sicherheitskomponenten und die Anwendung selbst, bleibt eine Anwendung in der virtuellen Maschine auch bei Änderung der Cluster-Software auf Dauer lauffähig, was die Nachhaltigkeit verbessert. Insbesondere können auch veraltete Versionen, die eventuell ältere Betriebssysteme benötigen, lauffähig gehalten werden, ohne dass die eigentliche Cluster-Software auf einem alten Stand bleiben müsste. Wesentlich ist nicht die Pflege der Cluster-Ressource, sondern die Pflege der Virtualisierungssoftware.

Nachteilig an der Virtualisierung sind geringe Performanceeinbußen, die weniger als 10% der CPU-Zeit betragen, höhere Netzwerklast durch die Übertragung von virtuellen Maschinen und die Belegung von Arbeitsspeicher durch die virtuelle Maschine mit ihrem

¹⁷Kommerzielle Programme werden im Allgemeinen nur für bestimmte Betriebssysteme unterstützt.

zusätzlichen Betriebssystem. Zudem muss der Cluster-Administrator die Ausführung der virtuellen Maschine ermöglichen. In der aktuellen Implementierung muss bei parallelen Berechnungen für jeden Prozess eine virtuelle Maschine gestartet werden. Bei Mehrkernsystemen läuft für jeden Kern eine virtuelle Maschine, auch wenn diese eventuell immer die gleiche ist.

Die exemplarische Lösungserarbeitung zur Virtualisierung sollte im Unterauftrag erfolgen. Dieser Unterauftrag war im Zuwendungsbescheid des INP Greifswald vom 15.06.2009 mit einer Auszahlungssperre versehen. Die Aufhebung dieser Auszahlungssperre war an die Vorlage eines Berichtes zur Virtualisierung geknüpft war, der die bestehenden Virtualisierungssysteme evaluieren und das beste System identifizieren sollte.

Zur Auswahl einer Virtualisierungslösung erstellte die CFX Berlin Software GmbH gemeinsam mit den assoziierten Partnern im Teilprojekt 1, den anderen Teilprojektpartnern und der Projektleitung ein Lastenheft, in welchem die Anforderungen der CFX Berlin Software GmbH an die Virtualisierungslösung aufgelistet wurden. Dieses Dokument wurde an zwei mögliche Anbieter geschickt: das Fraunhofer-Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik (ITWM) in Kaiserslautern und die Philipps-Universität Marburg. Auf dieser Basis fanden Gespräche zum Thema Virtualisierung statt, die am 02.09.2009 beim Fraunhofer ITWM in Kaiserslautern und am 03.09.2009 bei der Philipps-Universität Marburg in Marburg erfolgten. Die Ergebnisse des Vergleichs der Virtualisierungsmethoden Xen-Based Execution Environment (XenBEE) des Fraunhofer ITWM und Xen Grid Engine (XGE) der Philipps-Universität Marburg wurden im PT-Grid-internen Bericht „Evaluation der Virtualisierungslösungen XenBEE und XGE für die Anwendung im Plasma-Technologie-Grid“ [P1] zusammengefasst, der von der CFX Berlin Software GmbH mit Unterstützung durch das INP Greifswald und das Institut für Roboterforschung der Technischen Universität Dortmund erstellt wurde. Nach kritischer Abwägung wurde die Lösung XGE der Philipps-Universität Marburg ausgewählt. Nach Aufhebung der Sperre der Mittelvergabe wurde ein Arbeitsplan mit Meilensteinen im Rahmen des Forschungs- und Entwicklungsvertrags zwischen INP Greifswald und Philipps-Universität Marburg unter maßgeblicher Beteiligung der CFX Berlin Software GmbH festgesetzt.

An der Philipps-Universität Marburg wurde für die Erstellung, Verwaltung und Einrichtung von virtuellen Maschinen in vorherigen Forschungsprojekten, Diplom- und Doktorarbeiten, insbesondere den Dissertationen „Infrastructural Security for Virtualized Grid Computing“ von M. Schmidt [4] und „Virtual Machine Image Management for Elastic Resource Usage in Grid Computing“ von N. Fallenbeck [5] aus dem Jahre 2011, eine Lösung entwickelt, die aus zwei Hauptkomponenten besteht: Image Creation Station (ICS) und Xen Grid Engine (XGE). Die ICS ist ein Werkzeug, mit dem der Benutzer virtuelle

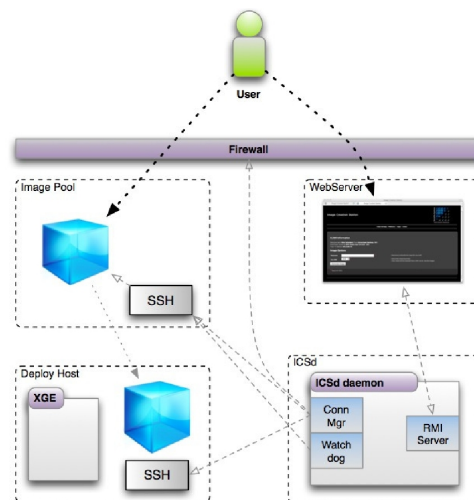


Abbildung 14: Architektur der Image Creation Station

Maschinen erstellen und verwalten kann. Ihre Komponenten sind in Abbildung 14 dargestellt. Sie besteht aus einem Frontend über eine RMI-Schnittstelle¹⁸ oder eine Webservice-Schnittstelle und aus einem Backend mit den drei Komponenten ICS Dämon (ISCd), der die Programmlogik enthält und auf den anderen Komponenten die Erzeugung und Verwaltung von virtuellen Maschinen organisiert, Image Pool, in dem die virtuellen Maschinen erzeugt, gespeichert und für Managementzwecke gebootet werden, und Deploy Host, der zur Übergabe der virtuellen Maschinen von der ICS in das üblicherweise geschützte und abgeschlossene Cluster-Netzwerk dient. Weitere Details sind unter <http://mage.uni-marburg.de/trac/ics> verfügbar.

Die XGE dient zur Verwaltung von Xen¹⁹-virtuellen Maschinen in Cluster-Umgebungen (verteilen, starten, beenden) und arbeitet mit einem lokalen Ressourcenmanager wie Torque zusammen, um die virtuellen Maschinen des Benutzers auf dem Cluster zum Einsatz zu bringen. Weitere Details sind unter <https://mage.uni-marburg.de/trac/xge> verfügbar.

Ein typischer Ablauf ist in Abbildung 15 dargestellt. Der Benutzer loggt sich auf der ICS ein und kann dort eine virtuelle Maschine erstellen, konfigurieren und mit der notwendigen Software versehen. Dann loggt er sich auf dem Globus-Headnode (Globus Toolkit 4 als Middleware für den Clusterzugang) ein und kann mit Hilfe des Ressourcenmanagers einen Job einreichen. Der Ressourcenmanager startet den Job auf freien Knoten, wobei die XGE vor dem Start der eigentlichen Anwendung die virtuellen Maschinen vom Benutzer auf die entsprechenden Knoten verteilt und hochfährt, so dass der Ressourcenmanager den Job in diesen virtuellen Maschinen ausführt statt, wie üblich, nativ auf den Knoten.

¹⁸RMI: remote method invocation

¹⁹<http://www.xen.org>

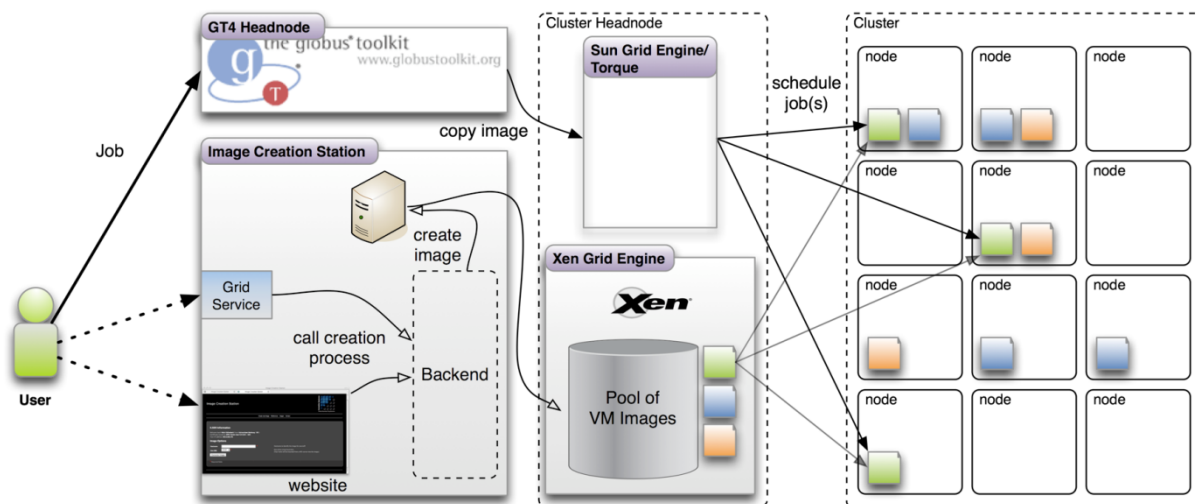


Abbildung 15: Übersicht der Virtualisierungslösung

Die Berechnungsdaten liegen üblicherweise außerhalb der virtuellen Maschine in einem gemeinsamen Verzeichnis aller Knoten, auf die die ebenfalls im PT-Grid weiterentwickelte Datenmanagementlösung (siehe Abschnitt 6.1.1) Zugriff hat.

Im Rahmen des Unterauftrags wurden folgende Optionen dieser recht ausgereiften Virtualisierungslösung für die kommerzielle Nutzung im Rahmen des PT-Grids exemplarisch für Teilprojekt 1 durch die Philipps-Universität Marburg weiterentwickelt (Arbeitspakete AP3-TP1):

- ICS Image Provider Support: Der Administrator der ICS kann virtuelle Maschinen erstellen, konfigurieren und mit der notwendigen Software versehen, die er anderen Benutzern der ICS zur Verfügung stellen kann. Für diese entfällt damit der Aufwand der Installation, so dass der typische Anwender die ICS nur noch nutzen muss, um die vordefinierte virtuelle Maschine auszuwählen, die über die zu startende Software verfügt.
- Export von virtuellen Maschinen aus der ICS: Der Benutzer kann eine in der ICS erstellte virtuelle Maschine aus der ICS exportieren, um sie auch außerhalb der ICS, z. B. für ICS an anderen Standorten, zu benutzen.
- Import von virtuellen Maschinen in die ICS: Der Nutzer kann eine eigene virtuelle Maschine direkt in die ICS importieren, um sie in Verbindung mit der XGE auf dem Cluster zu benutzen. Dabei werden site- und nutzer-spezifische Einstellungen aktualisiert.
- Multi-Site Image Support: Image Creation Stations tauschen virtuelle Maschinen untereinander aus. Dieser Punkt wurde auf eine Minimallösung reduziert. Der Aus-

tausch von virtuellen Maschinen zwischen verschiedenen ICS an unterschiedlichen Standorten erfolgt durch die Kombination der Optionen Export und Import.

- Erweiterte Statusmeldungen und Ablaufprotokoll (XGE): Der Ablauf eines Jobs, d. h. Einreichung des Jobs, Start der entsprechenden virtuellen Maschinen, Start des Jobs und Ende des Jobs, sind in einer Log-Datei zu sehen.
- Master-Slave-Problem bei MPI: Im Parallelbetrieb arbeitet ANSYS CFX mit einer Master-Slave-Architektur. Es wurde sichergestellt, dass diese Architektur im Zusammenhang mit der Virtualisierungslösung funktionieren kann.
- Support für openSUSE als Betriebssystem in den virtuellen Maschinen, da Debian von ANSYS CFX offiziell nicht unterstützt wird.
- Support für openSUSE als Betriebssystem auf der physikalischen Hardware,
- Verschlüsselung der Nutzerdaten: Die Verschlüsselung der Nutzerdaten kann mit dem Tool GJDE²⁰ erfolgen. Allerdings liegen die Daten zur Laufzeit der Anwendung unverschlüsselt vor.
- Copy-on-Write-Layer: Ein modernes Copy-on-Write-Verfahren wurde eingeführt, um Import, Export, Provider Support und Synchronisation einfach implementieren zu können. Hierbei besteht die virtuelle Maschine aus einem Basisimage, über dem Layer für cluster- und nutzerspezifische Daten und (zur Ausführung) für neue Daten angelegt sind. Soll eine virtuelle Maschine von einem neuen Nutzer verwendet werden, so muss nur der Nutzerlayer angepasst werden; soll eine virtuelle Maschine auf einem anderen Cluster starten, nur der Site-Layer. Bei kritischen Systemupdates können die Basisimages angepasst werden, und durch die Verwendung des Ausführungslayers ändern sich die anderen Layer beim Starten der virtuellen Maschine nicht, so dass die virtuelle Maschine bei späteren Benutzungen nicht erneut übertragen werden muss.

Die geplante Option der VPN-Verschlüsselung²¹ der Netzwerkverbindungen der virtuellen Maschinen untereinander wurde nach Rücksprache nicht weiterentwickelt. Die Abnahme der fertigen Virtualisierungslösung und die entsprechende Abschlussbesprechung zwischen der CFX Berlin Software GmbH und der Philipps-Universität Marburg erfolgten am 14.11.2011 in Marburg.

²⁰GJDE: grid job data encryption

²¹VPN: virtual private network

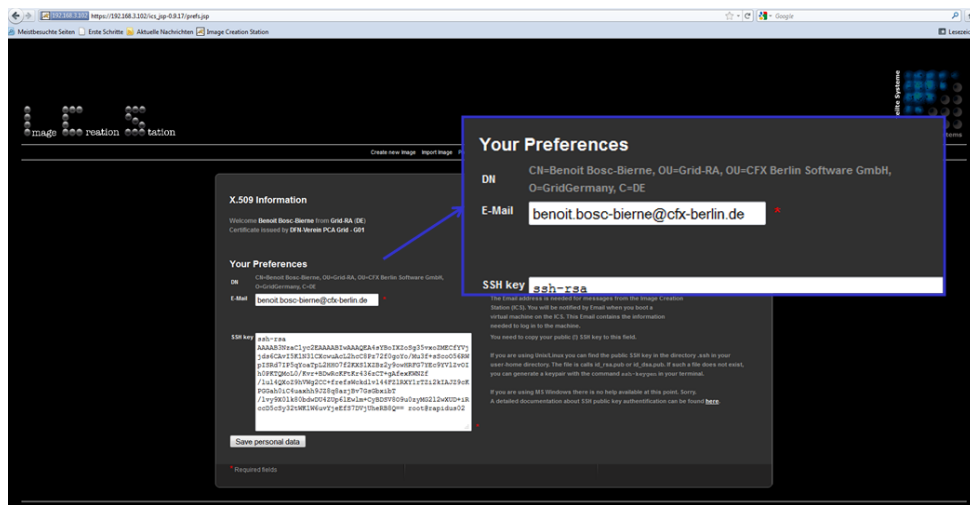


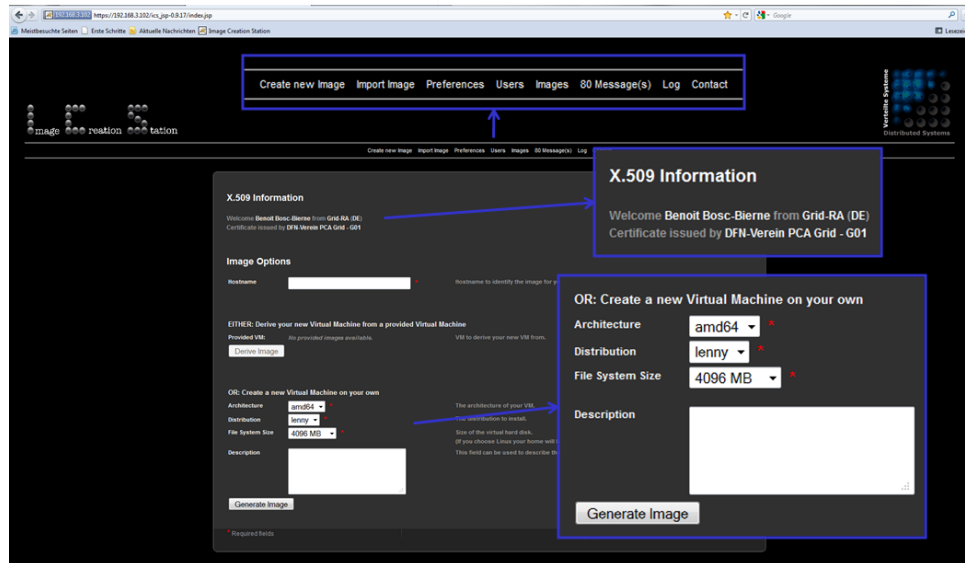
Abbildung 16: Anforderung des öffentlichen Teils eines SSH-Schlüssels

Die Benutzung der ICS über die Webservice-Schnittstelle (Arbeitspaket AP4-TP1) wurde an die Erfordernisse des PT-Grids angepasst und stellt sich wie folgt dar. Der Benutzer authentifiziert sich mit seinem persönlichen Grid-Zertifikat aus seinem Browser. Damit wird er zur Verwaltung seiner virtuellen Maschinen autorisiert, hat aber keinen Zugriff auf die virtuellen Maschinen anderer Nutzer. Durch die Angabe des öffentlichen Teils eines SSH-Schlüssels²², kann er sich später mit seinem privaten Teil des Schlüssels als Administrator in seine virtuelle Maschine einloggen und Anpassungen oder Installationen vornehmen, wie Abbildung 16 veranschaulicht.

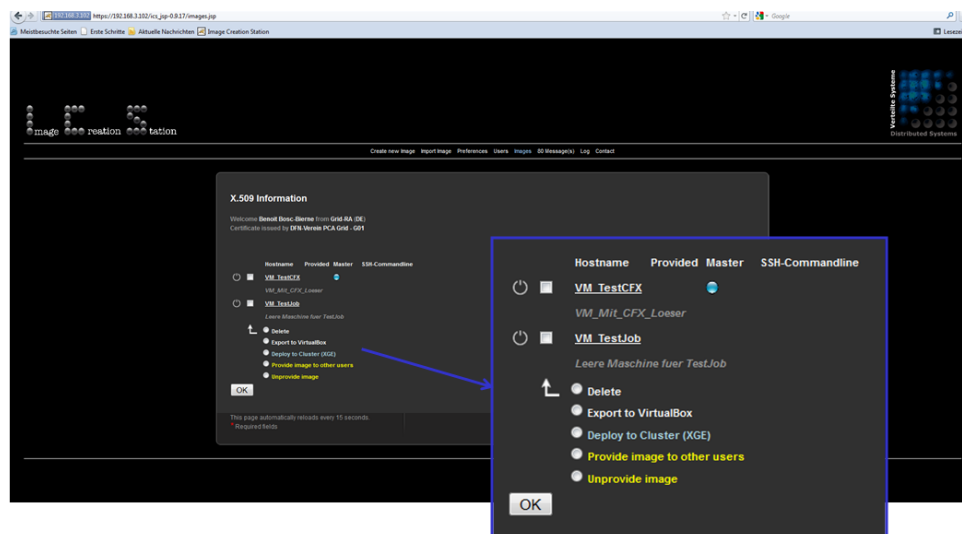
Der Benutzer ist jetzt in der Lage, unter „Create new Image“ eine eigene virtuelle Maschine zu erzeugen. Wie Abbildung 17a zeigt, hat er dazu zwei Möglichkeiten. Er kann erstens eine neue virtuelle Maschine mittels der Auswahl für den Speicherplatz, die Architektur und das Betriebssystem erzeugen oder eine vordefinierte virtuelle Maschine verwenden. Um diese zweite Option zu nutzen, muss wenigstens ein Benutzer der ICS als Image Provider definiert sein, und dieser Benutzer muss wenigstens eine virtuelle Maschine zur Verfügung gestellt haben.

Unter „Images“ kann der Benutzer seine virtuellen Maschinen sehen und verwalten. Die fünf zur Verfügung stehenden Optionen sind in Abbildung 17b dargestellt. Mit „Delete“ werden virtuelle Maschinen gelöscht. Mit der Option „Export to VirtualBox“ kann eine virtuelle Maschine im VirtualBox-Format exportiert werden. Mit „Deploy to Cluster (XGE)“ kann die ausgewählte virtuelle Maschine an den Cluster und an XGE übertragen werden. Alle virtuellen Jobs des Benutzers auf diesem Cluster werden ab jetzt mit dieser virtuellen Maschine ausgeführt. Die Option „Provide image to other users“ ermöglicht es dem Nutzer, eine virtuelle Maschine für andere Benutzer zur Verfügung zu stellen, falls

²²SSH: secure shell



(a)



(b)

Abbildung 17: Erzeugung (a) und Verwaltung (b) von virtuellen Maschinen über die Webservice-Schnittstelle der Image Creation Station

er den Status „Image Provider“ besitzt. Andererseits wird diese virtuelle Maschine mit „Unprovide image“ für andere Benutzer nicht mehr zur Verfügung gestellt.

Der Benutzer hat auch die Möglichkeit, eine virtuelle Maschine über die Webservice-Schnittstelle in die ICS zu importieren. Für alle Aktionen des Nutzers erzeugt die ICS Nachrichten, die den Status seiner Aktionen beschreiben. Die entsprechenden Ansichten sind Abbildung 18 dargestellt.

Zur Integration der ICS in ein Portal (Arbeitspaket AP7-TP1) kann die Webservice-Schnittstelle als Inlineframe eingebunden werden. Im Rahmen des PT-Grid-Projektes wurde ein Server mit Image Creation Station an der Philipps-Universität Marburg eingerichtet und in die PT-Grid-Infrastruktur (Abbildung 5) integriert. Über diesen Server konnte auf

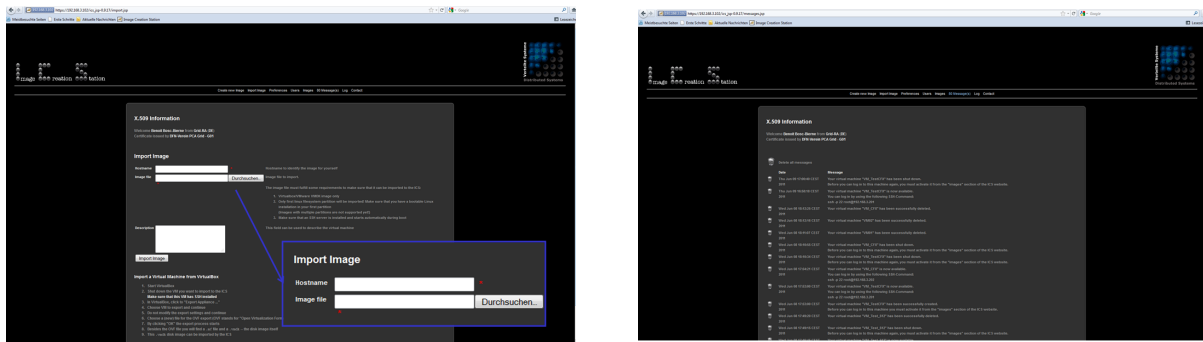


Abbildung 18: Import von virtuellen Maschinen (links) und Statusnachrichten zur ICS (rechts) über die Webservice-Schnittstelle der ICS

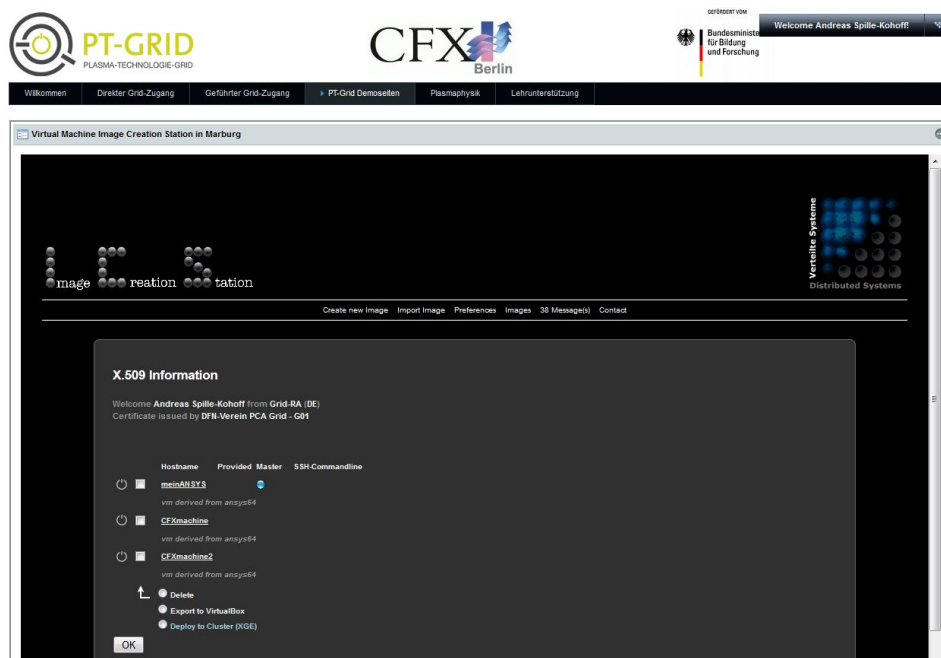


Abbildung 19: Einbindung der ICS-Weboberfläche als Inlineframe in das PT-Grid-Portal des INP Greifswald

eine voreingestellte virtuelle Maschine für die Anwendung von ANSYS CFX zugegriffen werden, wie Abbildung 19 veranschaulicht.

Anders als bei der Image Creation Station hat der Benutzer keinen Zugriff auf die Xen Grid Engine. Durch die Auswahl einer entsprechenden Queue, z. B. „virtual“, beim Einreichen des Jobs beim lokal installierten Ressourcenmanager, wie Torque, erfolgt der Start der durch die ICS bereitgestellten virtuellen Maschine des Benutzers durch die XGE automatisch. Der Scheduler startet wie im nativen Fall die Anwendung in der laufenden virtuellen Maschine, so dass keine Anpassung am Scheduler notwendig ist. Die XGE bietet als Funktionen die transparente Anbindung des Grid-Schedulers, das Verteilen der bereitgestellten virtuellen Maschine vor dem eigentlichen Start, eine reduzierte Verteilzeit

durch Multi-Layer-Root-Technologie, das Starten bzw. Stoppen der virtuellen Maschinen des jeweiligen Benutzers und das Erfassen von genauen Accounting-Daten getrennt für jede virtuelle Maschine. Durch die transparente Anbindung des Grid-Schedulers sieht der Benutzer keinen Unterschied zwischen nativer und virtualisierter Lösung. Die virtuellen Knoten müssen nur in einer bestimmten Warteschlange definiert werden, und der Benutzer muss diese Queue verwenden, um virtuelle Jobs zu starten. Vor dem eigentlichen Start werden die virtuellen Maschinen auf die Rechenknoten kopiert. Sie können mehrere Gigabytes groß und die Übertragungszeit der virtuellen Maschinen kann lang sein. Um die Übertragungszeit zu reduzieren, wird die virtuelle Maschine durch die Multi-Layer-Root-Technologie in mehrere Layer unterteilt. Nur die Layer, die sich geändert haben, werden übertragen, und Schreibvorgänge zur Laufzeit der virtuellen Maschine werden in einen weiteren Layer geschrieben und am Ende verworfen.

C: Einrichtung einer Grid-Infrastruktur bei der CFX Berlin Software GmbH

Die Einrichtung einer Grid-Infrastruktur bei der CFX Berlin Software GmbH war als Teil des Arbeitspakets AP3-TP1 geplant und erfolgte aus mehreren Gründen. Zum einen war die Nutzung von D-Grid-Ressourcen für die assoziierten Teilprojektspartner zu Testzwecken mit entsprechender Fehlerhäufigkeit nur eingeschränkt möglich. Zum anderen war die Bereitschaft der D-Grid-Ressourcenverwalter, die entwickelte Virtualisierungslösung, insbesondere die Xen Grid Engine, bei sich zu installieren, nur sehr beschränkt vorhanden. Des Weiteren erwiesen sich die Beschaffung von Lizenzen für ANSYS CFX und die Unterzeichnung der Lizenzvereinbarungen durch die Rechenzentren bzw. Universitäten als langwieriger Prozess, so dass zunächst auf lokale Lizenzen der CFX Berlin Software GmbH zugegriffen werden sollte. Darüber hinaus erlaubte der Aufbau einer eigenen Grid-Infrastruktur die Einschätzung von Aufwand, Risiken und Kosten sowie auch hinsichtlich der Möglichkeit, eigene Hardware-Ressourcen später kommerziell den Kunden anbieten zu können.

Die Testinstallation bei der CFX Berlin Software GmbH sollte in einem ersten Schritt den Mitarbeitern der CFX Berlin Software GmbH einen Einstieg in die Virtualisierungslösung ermöglichen. In einem zweiten Schritt wurde die Installation zum Testen und zur Weiterentwicklung verwendet. In einem dritten Schritt war eine Testphase mit assoziierten Partnern geplant, die gegebenenfalls für einen späteren Produktivbetrieb ausgebaut werden sollte.

Für die Testphase mit assoziierten Partnern war es notwendig, dass die entsprechenden Rechner von außen erreichbar sind. Allerdings sollte jegliche Kommunikation zwischen diesen Rechnern und dem Netzwerk der CFX Berlin Software GmbH wegen Sicherheitsbe-

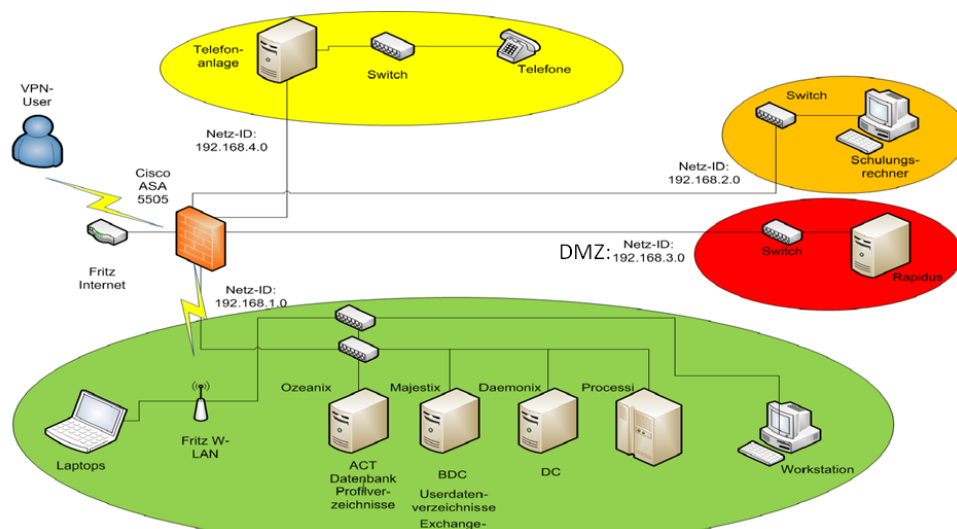


Abbildung 20: Netzwerkstruktur der CFX Berlin Software GmbH mit internem Netz und demilitarisierter Zone für die PT-Grid-Infrastruktur

denken verboten sein. Zu diesem Zwecke wurde eine demilitarisierte Zone mit der Netz-ID 192.168.3.0 hinter einer Hardware-Firewall eingerichtet. Abbildung 20 zeigt die Netzwerkstruktur der CFX Berlin Software GmbH. Zwei Rechner (Rapidus01 und Rapidus02) der CFX Berlin Software GmbH wurden in der demilitarisierten Zone etabliert, die jeweils mit 2 x Quad-Core AMD Opteron™ Processor 2356, 16 GB Arbeitsspeicher und einer Festplatte von 440 GB ausgestattet waren.

Damit die Entwicklungsarbeit bei allen Projektpartnern des PT-Grids einheitlich blieb, hatten sich die Projektpartner auf die von der Technischen Universität Dortmund vorgeschlagene PT-Grid-Referenzinstallation geeinigt, die in Abbildung 4 dargestellt ist. Die Referenzinstallation bei der CFX Berlin Software GmbH sollte die Installation und das Testen der Virtualisierungslösung ermöglichen, wofür keine Grid-Middleware notwendig war. Da der Aufwand für die Installation von Globus Toolkit sehr hoch ist und relativ wenige physikalische Ressourcen zur Verfügung standen, wurde seitens der CFX Berlin Software GmbH entschieden, auf die als Grid-Middleware geltende virtuelle Maschine zu verzichten.

Abbildung 21 zeigt die Referenzinstallation der CFX Berlin Software GmbH ohne Virtualisierungslösung. Die Installation fand auf dem Rechner Rapidus01 statt. Zur Erstellung des Referenzsystems wurde die Virtualisierungssoftware VirtualBox verwendet. Fünf virtuelle Maschinen mit dem Betriebssystem Debian GNU/Linux 5.0.3 Lenny, einem Arbeitsspeicher von 2 GB und einem Speicherplatz von 8 GB wurden erstellt:

- Die Maschine gmasterCFX mit der internen IP-Adresse 192.168.3.90 und der externen IP-Adresse 85.182.164.91 ist als „Headnode“ des Systems zu betrachten und

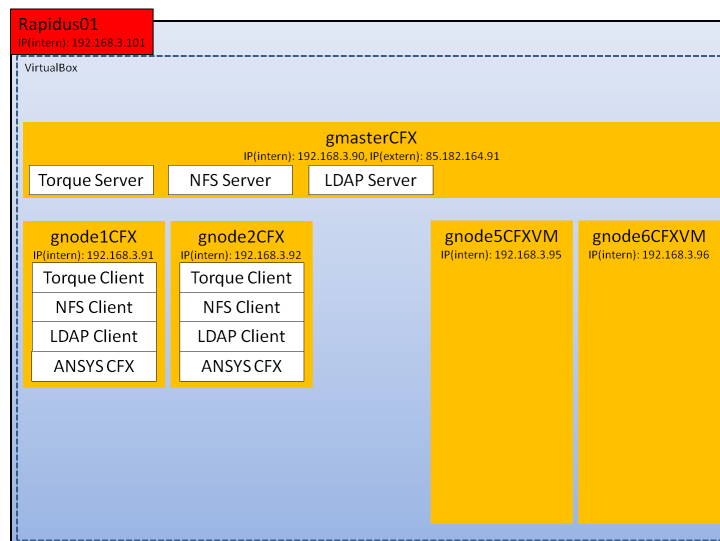


Abbildung 21: Referenzinstallation bei der CFX Berlin Software GmbH ohne Virtualisierungslösung

deswegen von außen erreichbar. Die Serverseite von Torque (Scheduler) und von LDAP²³ (zentrale Benutzerverwaltung) wurde auf gmasterCFX installiert. Die Home-Verzeichnisse der Benutzer auf gmasterCFX wurden per NFS-Sharing²⁴ im Netz zur Verfügung gestellt.

- Die Maschinen gnode1CFX und gnode2CFX mit den IP-Adressen 192.168.3.91 und 192.168.3.92 wurden als native Rechenressourcen definiert. Die Dienste Torque Client und LDAP Client sowie die Software ANSYS CFX wurden auf beiden Knoten installiert. Die Home-Verzeichnisse der Benutzer wurden per NFS von gmasterCFX gemountet.
- Die Maschinen gnode5CFXVM und gnode6CFXVM mit den IP-Adressen 192.168.3.95 und 192.168.3.96 wurden für die Installation der Virtualisierungslösung vorgesehen.

Die Installation der Virtualisierungslösung besteht aus den beiden Hauptkomponenten Image Creation Station und Xen Grid Engine, wie im Abschnitt B des Kapitels 6.2 dargelegt wurde. Die ICS zur Verwaltung von virtuellen Maschinen und ihre entsprechende Web-Oberfläche wurden auf dem Rechner Rapidus02 mit der internen IP-Adresse 192.168.3.101 und der externen IP-Adresse 85.182.164.90 installiert, wie Abbildung 22 zeigt. Die ICS ist von außen erreichbar. Zudem war die Installation des Xen-Packages notwendig.

²³LDAP: Lightweight Directory Access Protocol

²⁴NFS: network file system; Netzwerkdateisystem

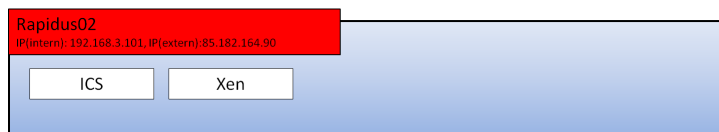


Abbildung 22: Installation der ICS auf Rapidus02 der CFX Berlin Software GmbH

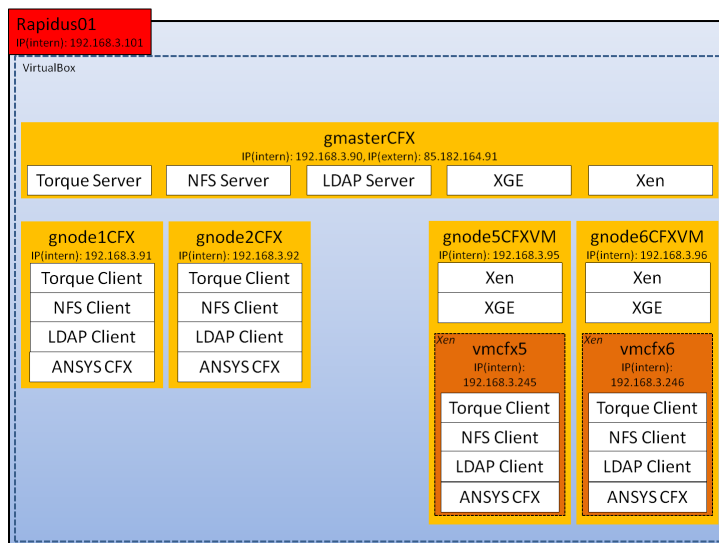


Abbildung 23: Referenzinstallation bei der CFX Berlin Software GmbH mit Virtualisierungslösung

Die Xen Grid Engine zur Ausführung von Jobs innerhalb von virtuellen Maschinen mit Kopplung an den Scheduler Torque wurde auf dem Headnode gmasterCFX installiert. Zudem wurde sie auf den zwei Knoten gnode5CFXVM und gnode6CFXVM per NFS von gmasterCFX gemountet. Um eine funktionierende XGE zu haben, musste das Xen-Package auf allen entsprechenden Rechnern installiert werden.

In der Image Creation Station wurde eine virtuelle Maschine mit dem Betriebssystem Debian GNU/Linux 5.0.3 Lenny, 1 GB Arbeitsspeicher und einer Festplatte mit variabler Größe zwischen 1 und 4 GB eingerichtet. Die Dienste Torque Client, NFS Client, LDAP Client und die Software ANSYS CFX wurden installiert. Die virtuelle Maschine wurde über die Image Provider-Funktion der ICS den Nutzern zur Verfügung gestellt, die sich hieraus ihre eigene virtuelle Maschine abgeleitet und diese über „Deploy to Cluster“ für Berechnungen zur Verfügung gestellt haben.

Über die für die virtualisierten Jobs eingerichtete Warteschlange (Queue) „virtual“ können Jobs eingereicht werden, die in dieser virtuellen Maschine laufen sollen. Die XGE kopiert die deployten virtuellen Maschinen und startet diese, hier als vmcfx5 und vmcfx6. Die fertige Infrastruktur ist in Abbildung 23 dargestellt.

Die Erstellung von zwei nativen Knoten (gnode1CFX und gnode2CFX) und zwei virtu-

ellen Knoten (gnode5CXFVM und gnode6CFXVM) sollte den Vergleich zwischen beiden Lösungen ermöglichen. Dabei wurde der Zeitaufwand für eine komplette Installation der Virtualisierungslösung bei wenig Linux-Erfahrung mit 7 bis 8 Stunden für die Image Creation Station und mit 70 bis 80 Stunden für den Headnode zuzüglich 3 bis 4 Stunden pro Rechenknoten bei der Xen Grid Engine abgeschätzt. Bei längerer Linux-Erfahrung reduziert sich dieser Zeitaufwand auf 2 bis 3 Stunden für die ICS und 10 bis 20 Stunden für den Headnode plus 2 bis 3 Stunden pro Rechenknoten bei der XGE.

D: Integration von ANSYS CFX in die virtuelle Maschine

Ziel des Arbeitspakets AP3-TP1 (Integration von ANSYS CFX in die virtuelle Maschine) war es zunächst, anhand eines kleinen Testfalls Handhabung und Leistung von nativer und virtualisierter Lösung zu vergleichen. Der Testfall bestand aus der Strömungssimulation eines statischen Mischers, der mit der ANSYS CFX-Installation als „StaticMixer“ mitgeliefert wird. Hierzu wurde ANSYS CFX in einer gegenüber der vollständigen Installation minimierten Variante auf den nativen Knoten gnode1CFX und gnode2CFX installiert. Da es sich bei den nativen Ressourcen in diesem Falle ebenfalls um virtuelle Maschinen handelte, konnte eine Maschine erstellt und dann geklont werden. Analog wurde ANSYS CFX über die Image Creation Station in einer virtuellen Maschine installiert und bereitgestellt, so dass der Nutzer eine eigene virtuelle Maschine davon ableiten konnte, bei der der nutzerspezifische Layer durch die ICS angepasst wurde.

Für den Test wurden lokale Lizenzen der CFX Berlin Software GmbH genutzt. Die Berechnungsdaten lagen im Home-Verzeichnis des Benutzers. Es fand kein Pre- oder Post-processing statt, sondern nur die Berechnung eines Ergebnisses aus der Eingangsdatei „StaticMixer.def“.

Für native Test-Jobs diente die Standardqueue des Schedulers. Vom Headnode gmasterCFX wurden die Jobs aus der Kommandozeile durch den Befehl „qsub JobAnsysSerial“ für eine serielle und „qsub JobCFXParallel“ für eine parallele Berechnung gestartet. Die entsprechenden Skripte zeigt Abbildung 24. Hierbei wurde im parallelen Falle die Anzahl der parallelen Prozesse im Skript mit 2 angegeben. Über Unix-Shell-Befehle werden aus der Torque/PBS-Variable „\$PBS_NODEFILE“ die zugeordneten Nodes gelesen und zu einem String verknüpft, der beim Aufruf von ANSYS CFX dem Master-Prozess über cfx5solve als Liste der Hosts übergeben wird. Der Master startet anschließend die entsprechenden Prozesse auf den angegebenen Slaves und nutzt hierfür die Kommunikationsschnittstelle MPI.

Für Berechnungen mit der Virtualisierungslösung wurde die Queue „virtual“ eingerichtet. Vom Headnode gmasterCFX wurden die Jobs aus der Kommandozeile mit den

(a)

```

GNU nano 2.2.4 File: JobAnsysSerial
/usr/ansys_inc/v130/CFX/bin/cfx5solve -def StaticMixer.def
  
```

(b)

```

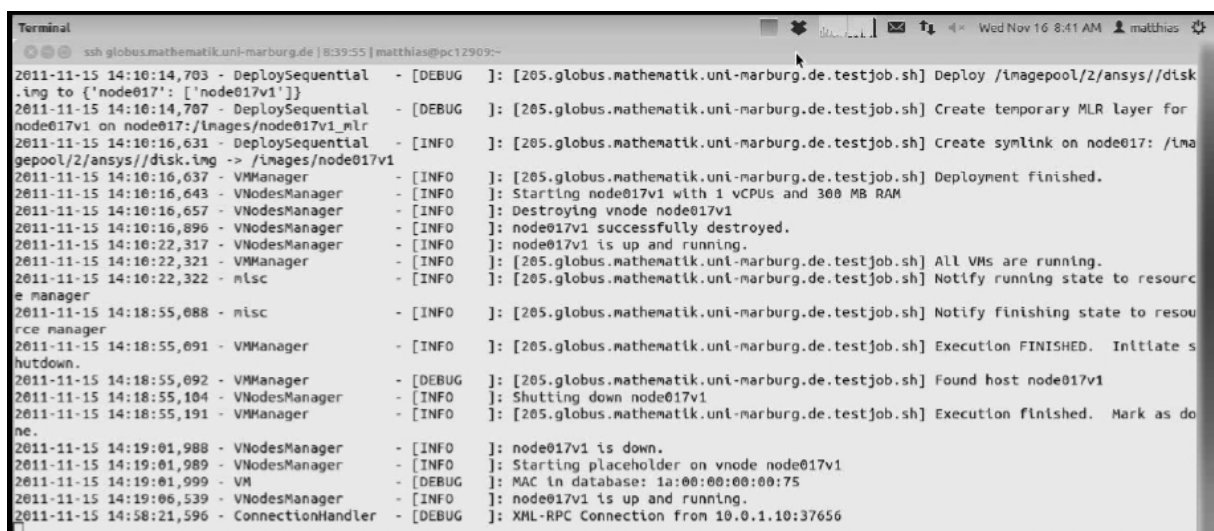
GNU nano 2.2.4 File: JobAnsysParallel
#!/bin/sh
#PBS -l nodes=2:ppn=1

hl=""
for host in `uniq $PBS_NODEFILE`
do
  if [ "$hl" = "" ]
  then hl="$host"*1
  else hl="$hl),$host*1"
  fi
done
/usr/ansys_inc/v130/CFX/bin/cfx5solve -def StaticMixer.def -start-method "HP MPI Distributed Parallel" -par-dist $hl
  
```

Abbildung 24: Starten des Testfalls für eine serielle (a) und parallele (b) Berechnung

Skripten aus Abbildung 24 gestartet durch den Befehl „qsub - q virtual JobAnsysSerial“ für eine serielle und „qsub - q virtual JobCFXParallel“ für eine parallele Berechnung.

Für den direkten Vergleich von nativen und virtuellen Lösungen ist es wesentlich, dass sowohl der Aufruf (bis auf die Auswahl einer anderen Queue) als auch die Skripte identisch sind, d. h., der Benutzer mit der Virtualisierung keinen zusätzlichen Aufwand hat (bis auf die Erstellung bzw. Ableitung der virtuellen Maschine in der ICS). Der Testfall hatte seriell eine Rechenzeit von etwa zwei Minuten, parallel waren es circa eineinhalb Minuten, wobei die virtualisierte Variante unwesentlich länger dauerte. Zum Hochfahren der virtuellen Maschinen wurden etwa acht, zum Herunterfahren circa 6 Sekunden benötigt. Die Log-Datei für die Ausführung eines seriellen Rechenjobs an der Philipps-Universität Marburg ist in Abbildung 25 dargestellt.



```

Terminal
ssh globus.mathematik.uni-marburg.de | 8:39:55 | matthias@pc12909:~
2011-11-15 14:10:14,703 - DeploySequential - [DEBUG ]: [205.globus.mathematik.uni-marburg.de.testjob.sh] Deploy /imagepool/2/ansys//disk
.ing to ['node017v1': ['node017v1']]
2011-11-15 14:10:14,707 - DeploySequential - [DEBUG ]: [205.globus.mathematik.uni-marburg.de.testjob.sh] Create temporary MLR layer for
node017v1 on node017:/images/node017v1_mlr
2011-11-15 14:10:16,631 - DeploySequential - [INFO ]: [205.globus.mathematik.uni-marburg.de.testjob.sh] Create symlink on node017: /ima
gepool/2/ansys//disk.ing -> /images/node017v1
2011-11-15 14:10:16,637 - VMManager - [INFO ]: [205.globus.mathematik.uni-marburg.de.testjob.sh] Deployment finished.
2011-11-15 14:10:16,643 - VModesManager - [INFO ]: Starting node017v1 with 1 vCPUs and 300 MB RAM
2011-11-15 14:10:16,657 - VModesManager - [INFO ]: Destroying vnode node017v1
2011-11-15 14:10:16,896 - VModesManager - [INFO ]: node017v1 successfully destroyed.
2011-11-15 14:10:22,317 - VModesManager - [INFO ]: node017v1 is up and running.
2011-11-15 14:10:22,321 - VMManager - [INFO ]: [205.globus.mathematik.uni-marburg.de.testjob.sh] All VMs are running.
2011-11-15 14:10:22,322 - misc - [INFO ]: [205.globus.mathematik.uni-marburg.de.testjob.sh] Notify running state to resourc
e manager
2011-11-15 14:18:55,088 - misc - [INFO ]: [205.globus.mathematik.uni-marburg.de.testjob.sh] Notify finishing state to resou
rce manager
2011-11-15 14:18:55,091 - VMManager - [INFO ]: [205.globus.mathematik.uni-marburg.de.testjob.sh] Execution FINISHED. Initlate s
hutdown.
2011-11-15 14:18:55,092 - VMManager - [DEBUG ]: [205.globus.mathematik.uni-marburg.de.testjob.sh] Found host node017v1
2011-11-15 14:18:55,104 - VModesManager - [INFO ]: Shutting down node017v1
2011-11-15 14:18:55,191 - VMManager - [INFO ]: [205.globus.mathematik.uni-marburg.de.testjob.sh] Execution finished. Mark as do
ne.
2011-11-15 14:19:01,988 - VModesManager - [INFO ]: node017v1 is down.
2011-11-15 14:19:01,989 - VModesManager - [INFO ]: Starting placeholder on vnode node017v1
2011-11-15 14:19:01,999 - VM - [DEBUG ]: MAC in database: 1a:00:00:00:00:75
2011-11-15 14:19:06,539 - VModesManager - [INFO ]: node017v1 is up and running.
2011-11-15 14:58:21,596 - ConnectionHandler - [DEBUG ]: XML-RPC Connection from 10.0.1.10:37656
  
```

Abbildung 25: Log-Datei der Xen Grid Engine für einen seriellen Job

Die Jobs liefen mit kleineren virtuellen Maschinen (1 bis 2 GB) erfolgreich. Bei grö-

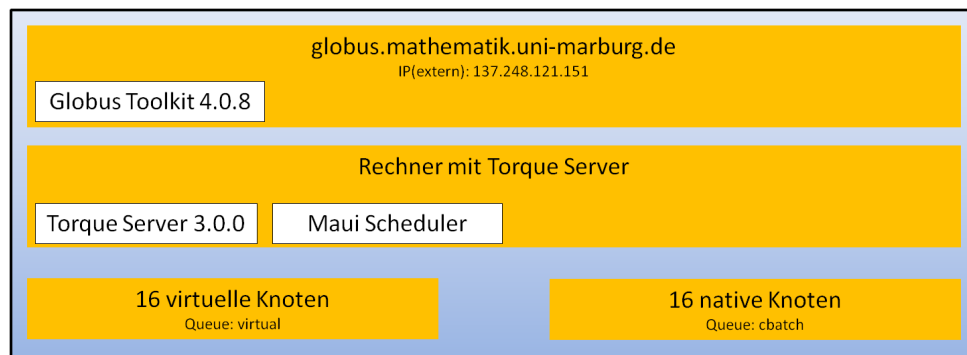


Abbildung 26: PT-Grid-Rechencluster der Philipps-Universität Marburg

ßeren virtuellen Maschinen (mit komplexerer Software) dauerte anfänglich das Kopieren der virtuellen Maschinen über das Netzwerk des virtuellen Clusters vom Headnode auf die Rechenknoten zu lange, so dass der Scheduler die virtuellen Jobs nicht innerhalb der erlaubten Zeit starten konnte. Ein physikalischer Cluster mit schnelleren Netzverbindungen und eine Modifikation des Kopiervorgangs mittels der Copy-on-Write-Layer in der XGE haben dieses Problem zu einem späteren Zeitpunkt behoben.

Nachdem das nach außen sichtbare System der CFX Berlin Software GmbH von Hackern nach andauernden Versuchen kompromittiert und die Anbindung an das Internet dadurch lahmgelegt wurde, entschied die CFX Berlin Software GmbH, dass ihre Kenntnisse und die von ihr zur Verfügung gestellte Hardware nicht ausreichen, um einen produktiven und sicheren Betrieb einer Grid-Infrastruktur zu gewährleisten. Entsprechend wurden die Rechner Rapidus01 und Rapidus02 der CFX Berlin Software GmbH der Philipps-Universität Marburg gespendet und von dieser in ihre mit der Virtualisierungslösung versehene Clusterressource integriert.

Die ICS wurde in die PT-Grid-Infrastruktur (Abbildung 5) integriert. Sie war direkt von außen unter <https://globus.mathematik.uni-marburg.de/ics> und über das PT-Grid-Portal (Abbildung 7) erreichbar. In Zusammenarbeit mit der CFX Berlin Software GmbH wurde eine virtuelle Maschine als Standard vorbereitet, die den Benutzern der ICS zur Verfügung gestellt wurde. Diese Standardmaschine hatte einen Arbeitsspeicher von 300 MB und verfügte über eine Installation von ANSYS CFX. Die Infrastruktur des Rechenclusters der Philipps-Universität Marburg wird in Abbildung 26 beschrieben. Zwei verschiedene Queues mit jeweils 16 Knoten mit je einem Kern standen zur Verfügung. In der Queue „virtual“ wurden Jobs in virtuellen Maschinen ausgeführt, und in der Queue „cbatch“ erfolgte die Ausführung der Jobs direkt auf den nativen Knoten.

Der Rechner globus.mathematik.uni-marburg.de wurde in der PT-Grid-VO registriert und war von außen erreichbar. Der Nutzer konnte sich auf diesen Rechner mittels SSH-Zugang mit privaten SSH-Schlüsseln oder mittels GSISSH-Zugang mit X509-Grid-

Zertifikat einloggen. Er konnte Daten auf den Globusrechner hochladen und von dort Jobs mit Hilfe des Schedulers Torque/Maui auf den Rechenknoten ausführen lassen. Lizenzen von der Firma ANSYS, Inc. zur Benutzung im Forschungsprojekt wurden zur Verfügung gestellt. Simulationen des allgemeinen Benchmarks auf bis zu 16 Partitionen wurden sowohl in der virtuellen als auch in der nativen Queue erfolgreich durchgeführt.

E: Erstellung einer Benutzeroberfläche und Integration ins PT-Grid

Die Erstellung einer Benutzeroberfläche und die Integration in das PT-Grid waren Gegenstand der Arbeitspakete AP4-TP1 und AP7-TP1. Die Virtualisierungslösung der Philipps-Universität Marburg wurde in die in Abbildung 5 dargestellte Gesamtinfrastruktur des PT-Grids eingebunden. Eine detaillierte Darstellung der Einbindung in den allgemeinen Arbeitsablauf (Abbildung 3) und der Kopplung der Virtualisierung mit den im Rahmen des PT-Grid-Projektes entwickelten Lösungen für das Scheduling, Datenmanagement und Portal zeigt Abbildung 27.

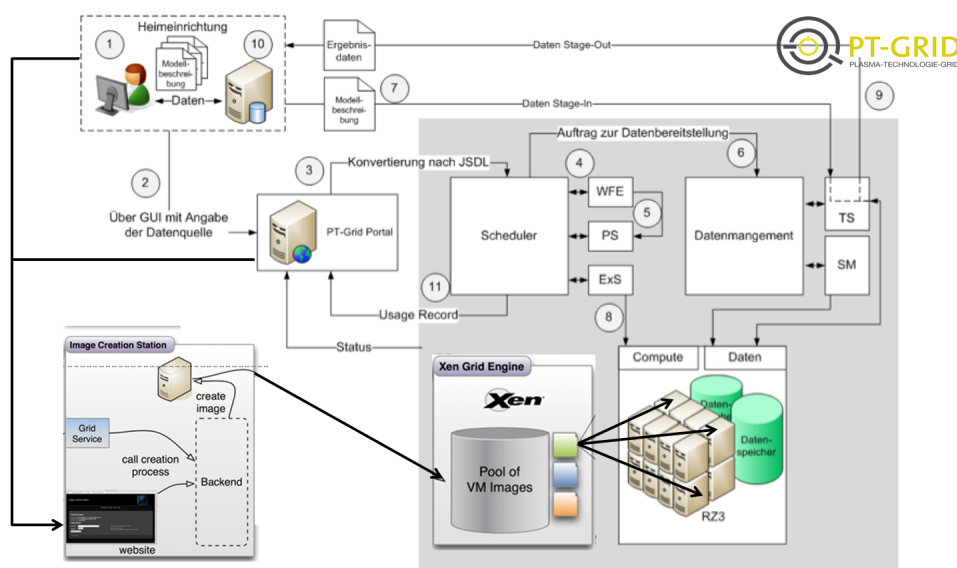


Abbildung 27: Integration der Virtualisierung in die PT-Grid-Architektur

Die Image Creation Station steht als Tool zur Erstellung und Verwaltung virtueller Maschinen bereit, um entweder direkt vom Nutzer oder über das Portal aufgerufen zu werden. Es wäre auch möglich, virtuelle Maschinen fertig konfiguriert und mit der Anwendungssoftware versehen durch den Image Provider zur Verfügung zu stellen, wovon im PT-Grid-Portal die zu verwendende Variante ausgewählt wird, so dass der Benutzer auf die ICS nicht selbst zugreifen muss. Die Xen Grid Engine verwaltet zum einen ressourcennah die Images und verteilt zum anderen automatisch, wie im Abschnitt B des Kapitels 6.2 beschrieben, bei Verwendung der jeweiligen Queue die Images auf die Res-

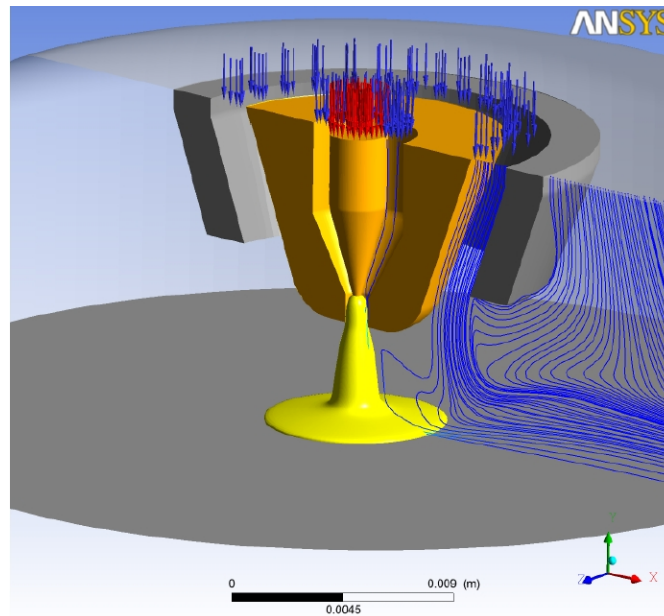


Abbildung 28: Geometrie des Plasmabrenners in Teilprojekt 1

sourcen und startet diese dort. Hiermit fügt sich die Virtualisierungslösung ohne größere Anpassungen direkt in die PT-Grid-Architektur ein.

Für die Demonstration der Projektergebnisse und die Evaluierung durch die assoziierten Teilprojektspartner war eine Benutzeroberfläche vorgesehen, die eine Simulation auf Cluster-Ressourcen ohne Nutzung von Kommandozeilen und aufwändige Logins ermöglichte. Während für die Pilotanwender eine einfache Lösung möglich gewesen wäre, bei der die Pilotanwender ihre Simulation lokal bei sich aufsetzen (Preprocessing), die Lösung im Grid berechnen lassen und die Auswertung (Postprocessing) wieder lokal bei sich durchführen, war für Demonstrationszwecke eine komplexere Lösung, die Pre- und Postprocessing beinhaltet, notwendig und sinnvoll. Hierbei sollte der Benutzer einige Parameter des zu simulierenden Problems variieren und die Ergebnisse nach der Berechnung direkt betrachten können.

Mit den Pilotanwendern wurde als Demonstrationsfall der Ausströmbereich eines Plasmabrenners mit entsprechenden Randbedingungen und Materialien vereinbart. Der rotationssymmetrische Plasmabrenner mit einer Kupferelektrode, einer Plasmadüse und einer Schutzgasdüse ist in Abbildung 28 dargestellt. Der Radius beträgt 20 mm und die Höhe ist 12 mm. Ein elektrischer Strom wird an der oberen Elektrode (rote Pfeile) vorgeschrieben, und das Arbeitsstück ist geerdert. Der Plasmabrenner verfügt über zwei Einlässe. Zwischen der Elektrode und der Plasmadüse wird eine Plasmaströmung und zwischen Plasmadüse und Schutzgasdüse wird eine Schutzgasströmung definiert (blaue Pfeile), wobei Argon als Plasma und als Schutzgas verwendet wird. In der Umgebung ist Luft bei

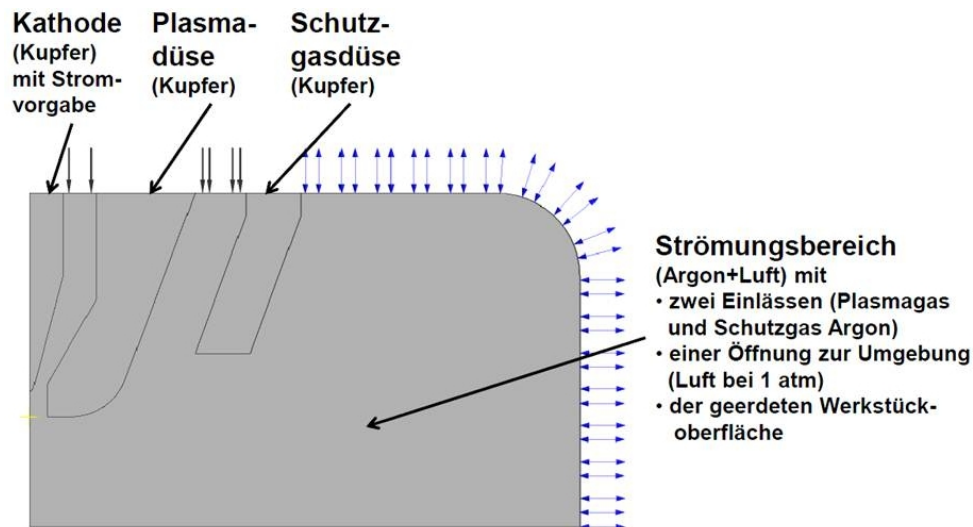


Abbildung 29: Randbedingungen und Materialien für den Plasmabrenner in Teilprojekt 1

Atmosphärendruck. Die Randbedingungen und Materialien sind in Abbildung 29 zusammengefasst.

Für die Simulation wurde ein 3°-Tortenstück des gesamten Plasmabrenners betrachtet, was zu einem kleineren Gitter und zu kürzeren Rechenzeiten führte. Für die stationäre, zweidimensionale Simulation wurde ein Gitter aus etwa 55000 Elementen (Prismen und Hexaeder) verwendet.

Sechs Parameter wurden zur Variation durch den Benutzer vorgesehen: die drei Geometrieparameter Abstand Düse zu Werkstück (DW), Innenradius der Plasmadüse (RP) und Rückstand der Kathode (DK) sowie die drei Randbedingungen elektrische Stromstärke (EC) und Volumenströme von Plasma (PG) und Schutzgas (SG). Abbildung 30 veranschaulicht diese Parameter.

Die Simulationen erfolgen mit der kommerziellen Software ANSYS CFX. Dazu werden die Standardgleichungen der Hydrodynamik, also Massen-, Impuls- und Energieerhaltung, gelöst, wobei elektromagnetische Effekte und Strahlungsphänomene im thermischen Plasma durch Ohmsche Heizung und Strahlungsverlustterme in der Energiebilanz und einen magnetischen Pinch-Term in der Impulsbilanz berücksichtigt werden. Ferner werden die Ladungserhaltung (Strombilanz) und ein Ausdruck zur Bestimmung des Magnetfeldes mit Hilfe des Vektorpotentials benötigt. Die Lösung des gekoppelten Systems von insgesamt zwölf partiellen Differentialgleichungen schließt die Mischung von Argon und Luft durch Turbulenz- und Diffusionseffekte ein, wobei die Turbulenz durch das Scherspannungs-Transport-Turbulenz-Modell (SST-RANS-Modell) modelliert wurde, und berücksichtigt temperaturabhängige Materialdaten und thermodynamische Größen, Widerstandserwärmung und Strahlungsemission. Die Fallgebiete, Wärmetransfer in den Festkörpern, Ent-

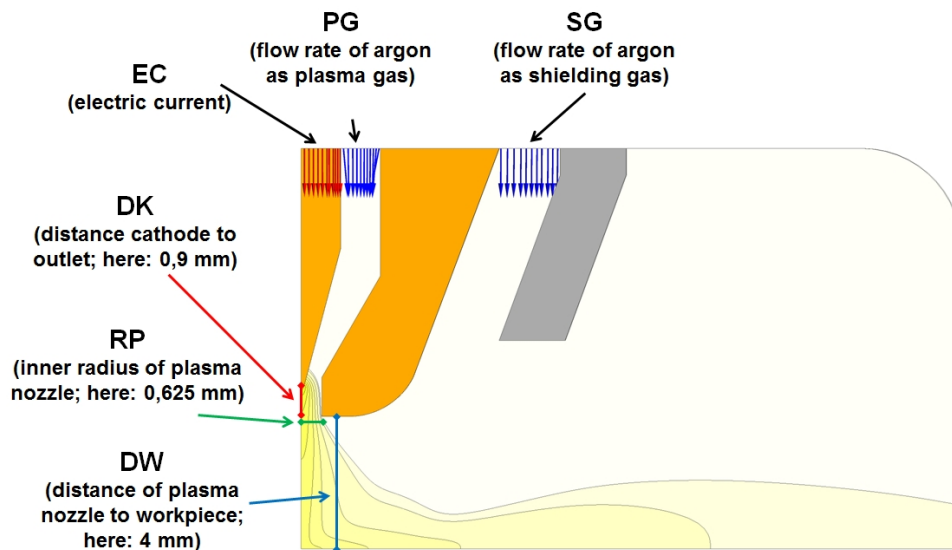


Abbildung 30: Variierbare Parameter des Plasmabrenners in Teilprojekt 1

mischung und Strahlungstransport wurden vernachlässigt. Die Rechenzeit auf einem Intel Xeon 3 GHz-Prozessor beträgt etwa 24 Minuten seriell sowie parallel 20 Minuten auf zwei und 15 Minuten auf vier Kernen. Abbildung 31 zeigt die Geschwindigkeit und die Temperatur für eine typische Lösung.

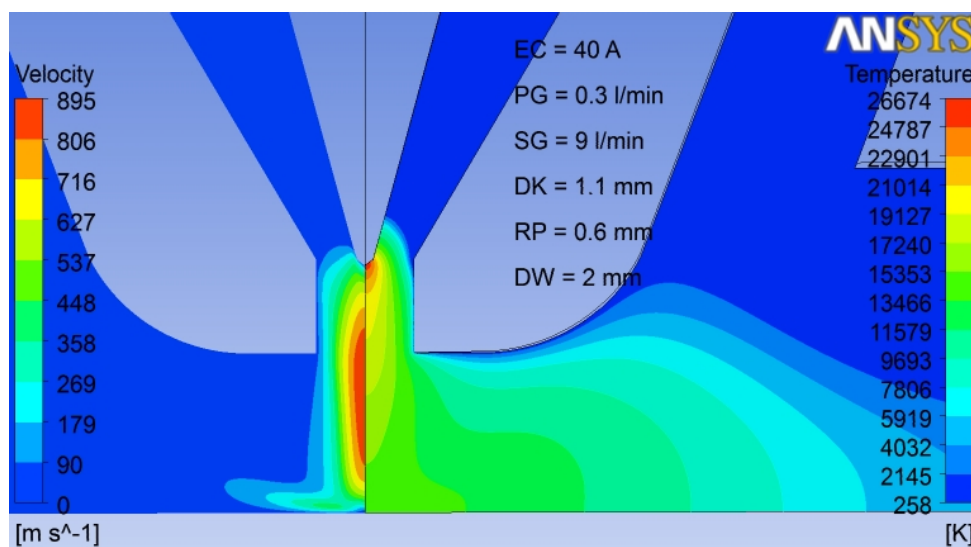
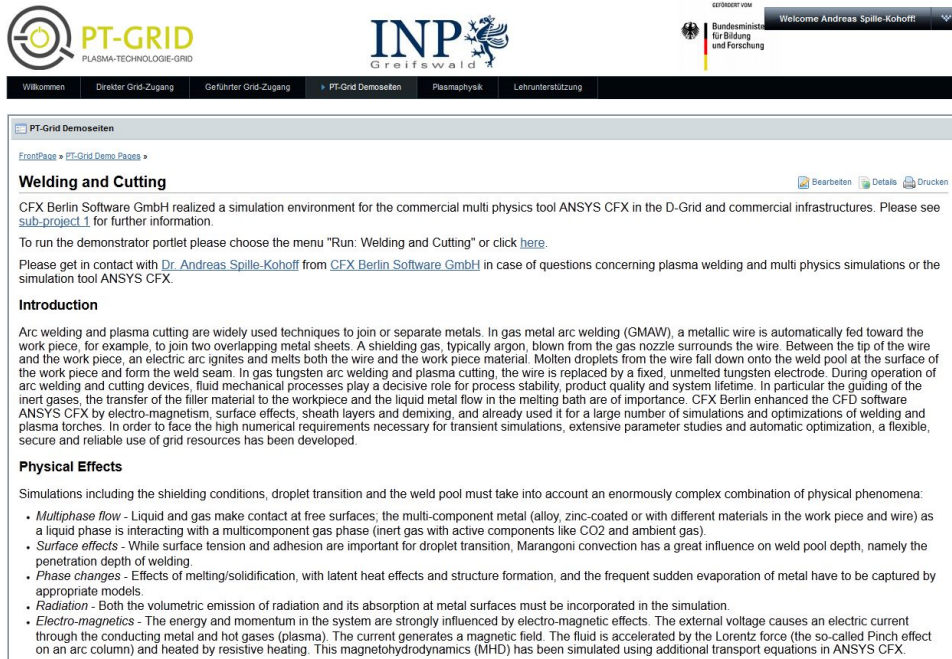


Abbildung 31: Geschwindigkeit (links) und Temperatur (rechts) für den Demonstrationsfall in Teilprojekt 1

Zusammen mit dem INP Greifswald wurde eine Benutzeroberfläche für diesen Demonstrationsfall in das Portal <https://portal.inp-greifswald.de:8443/web/guest> am INP Greifswald integriert, wie die Abbildungen 32 und 33 verdeutlichen. Um einen einheitlichen Zugang zu gewährleisten, baut die Oberfläche auf dem Portalzugang von Teilprojekt 2



Welding and Cutting

CFX Berlin Software GmbH realized a simulation environment for the commercial multi physics tool ANSYS CFX in the D-Grid and commercial infrastructures. Please see [sub-project 1](#) for further information.

To run the demonstrator portlet please choose the menu "Run: Welding and Cutting" or click [here](#).

Please get in contact with [Dr. Andreas Spille-Kohoff](#) from [CFX Berlin Software GmbH](#) in case of questions concerning plasma welding and multi physics simulations or the simulation tool ANSYS CFX.

Introduction

Arc welding and plasma cutting are widely used techniques to join or separate metals. In gas metal arc welding (GMAW), a metallic wire is automatically fed toward the work piece, for example, to join two overlapping metal sheets. A shielding gas, typically argon, blown from the gas nozzle surrounds the wire. Between the tip of the wire and the work piece, an electric arc ignites and melts both the wire and the work piece material. Molten droplets from the wire fall down onto the weld pool at the surface of the work piece and form the weld seam. In gas tungsten arc welding and plasma cutting, the wire is replaced by a fixed, unmelted tungsten electrode. During operation of arc welding and cutting devices, fluid-mechanical processes play a decisive role for process stability, product quality and system lifetime. In particular the guiding of the inert gases, the transfer of the filler material to the workpiece and the liquid metal flow in the melting bath are of importance. CFX Berlin enhanced the CFD software ANSYS CFX by electro-magnetism, surface effects, sheath layers and demixing, and already used it for a large number of simulations and optimizations of welding and plasma torches. In order to face the high numerical requirements necessary for transient simulations, extensive parameter studies and automatic optimization, a flexible, secure and reliable use of grid resources has been developed.

Physical Effects

Simulations including the shielding conditions, droplet transition and the weld pool must take into account an enormously complex combination of physical phenomena:

- *Multiphase flow* - Liquid and gas make contact at free surfaces; the multi-component metal (alloy, zinc-coated or with different materials in the work piece and wire) as a liquid phase is interacting with a multicomponent gas phase (inert gas with active components like CO₂ and ambient gas).
- *Surface effects* - While surface tension and adhesion are important for droplet transition, Marangoni convection has a great influence on weld pool depth, namely the penetration depth of welding.
- *Phase changes* - Effects of melting/solidification, with latent heat effects and structure formation, and the frequent sudden evaporation of metal have to be captured by appropriate models.
- *Radiation* - Both the volumetric emission of radiation and its absorption at metal surfaces must be incorporated in the simulation.
- *Electro-magnetics* - The energy and momentum in the system are strongly influenced by electro-magnetic effects. The external voltage causes an electric current through the conducting metal and hot gases (plasma). The current generates a magnetic field. The fluid is accelerated by the Lorentz force (the so-called Pinch effect on an arc column) and heated by resistive heating. This magnetohydrodynamics (MHD) has been simulated using additional transport equations in ANSYS CFX.

(a)



Welding And Cutting Simulation With ANSYS CFX

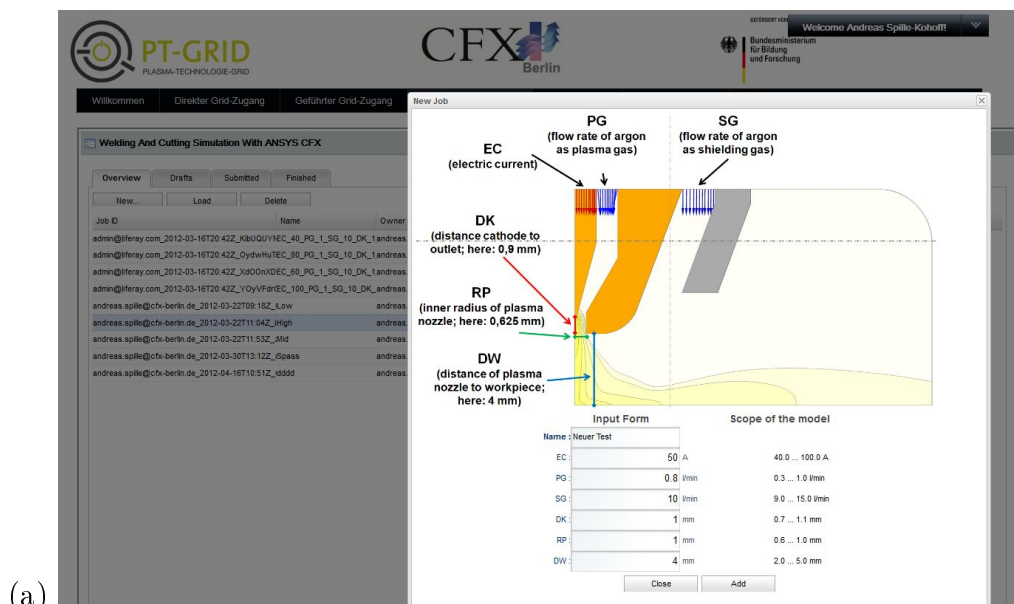
Overview | Drafts | Submitted | Finished

Job ID	Name	Owner	Resource	Status	Solver	Solver Version	Secrecy	Priority
admin@heray.com_2012-03-16T20:42Z_KBUQUVTEC_40_PO_1_SQ_10_DK_1	andreas.spille@ctf-berlin.de	andreas.spille@ctf-berlin.de	Commercial-PBS-NP	DONE	TP1-Torch	1.0	1	1
admin@heray.com_2012-03-16T20:42Z_OydwHuTEC_80_PO_1_SQ_10_DK_1	andreas.spille@ctf-berlin.de	andreas.spille@ctf-berlin.de	Commercial-PBS-NP	DONE	TP1-Torch	1.0	1	1
admin@heray.com_2012-03-16T20:42Z_Xd00xNDEC_80_PO_1_SQ_10_DK_1	andreas.spille@ctf-berlin.de	andreas.spille@ctf-berlin.de	Commercial-PBS-NP	DONE	TP1-Torch	1.0	1	1
admin@heray.com_2012-03-16T20:42Z_V0YVf4rEC_100_PO_1_SQ_10_DK_1	andreas.spille@ctf-berlin.de	andreas.spille@ctf-berlin.de	Commercial-PBS-NP	DONE	TP1-Torch	1.0	1	1
andreas.spille@ctf-berlin.de_2012-03-22T09:18Z_Low	andreas.spille@ctf-berlin.de	andreas.spille@ctf-berlin.de	Commercial-PBS-NP	DONE	TP1-Torch	1.0	1	1
andreas.spille@ctf-berlin.de_2012-03-22T11:04Z_High	andreas.spille@ctf-berlin.de	andreas.spille@ctf-berlin.de	Commercial-PBS-NP	DONE	TP1-Torch	1.0	1	1
andreas.spille@ctf-berlin.de_2012-03-22T11:53Z_Mid	andreas.spille@ctf-berlin.de	andreas.spille@ctf-berlin.de	Commercial-PBS-NP	DONE	TP1-Torch	1.0	1	1
andreas.spille@ctf-berlin.de_2012-03-30T13:12Z_Gauss	andreas.spille@ctf-berlin.de	andreas.spille@ctf-berlin.de	Commercial-PBS-NP	DONE	TP1-Torch	1.0	1	1
andreas.spille@ctf-berlin.de_2012-04-16T10:51Z_455dd	andreas.spille@ctf-berlin.de	andreas.spille@ctf-berlin.de	Commercial-PBS-NP	DONE	TP1-Torch	1.0	1	1

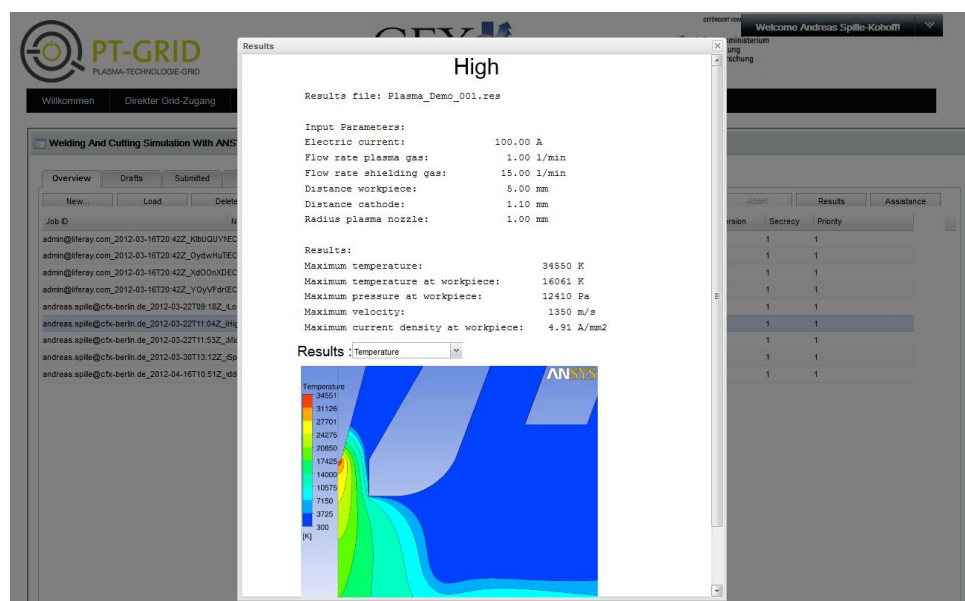
(b)

Abbildung 32: Beschreibungseite zum Teilprojekt 1 auf Wiki-Basis (a) und Überblicksseite zu den Simulationen (b)

(siehe Abschnitt 6.3) auf. Die Beschreibung des Teilprojekts 1 und der Virtualisierungslösung erfolgt in einem Wiki (Abbildung 32a), und die Simulationsfälle werden tabellarisch verwaltet (Abbildung 32b). Hier können alle Simulationsfälle angezeigt werden („Overview“), nur Entwürfe („Drafts“), nur zur Berechnung abgesendete Fälle („Submitted“) oder nur beendete Fälle („Finished“). Je nach Auswahl können neue Fälle erstellt werden („New...“), bestehende Fälle geladen und verändert („Load“) und berechnete Fälle gelöscht („Delete“) werden. Neue und bestehende Fälle können an den Cluster gesendet und das Ergebnis nach der Simulation betrachtet werden. Bei „New...“ öffnet sich das in Abbildung 33 oben gezeigte Fenster, in dem die sechs Parameter in vorgegebenen Grenzen vom Benutzer festgelegt werden können. Die Berechnung selber erfolgte ohne Virtualisierung auf dem Rechner ptgrid.inp-greifswald.de am INP Greifswald. Nach der Berechnung



(a)



(b)

Abbildung 33: Parameterfestlegung (a) und Auswertung (b) für den Demonstrationsfall des Teilprojektes 1 im Portal

kann eine Auswertung angezeigt werden, wie in Abbildung 33 unten dargestellt.

In dem von der CFX Berlin Software GmbH erstellten Pflichtenheft zur Benutzeroberfläche im Portal [P8] waren weitere Anforderungen definiert. Der Benutzer (Kunde) sollte definieren können, wann der Job starten (Priorisierung) und wie schnell die Hardware sein soll, wie sicher Daten und Jobausführung sein müssen (Verschlüsselungsmechanismen), wie viele Informationen er über die laufende Berechnung erhalten möchte (Monitoring), ob er in die laufende Berechnung eingreifen können möchte (Interaktion) und wie lange die Daten archiviert werden sollen bzw. dürfen. Dies müsste vom Portal bei der Ressourcen-

auswahl, der Queue-Auswahl und den Ausführungsoptionen berücksichtigt werden, wobei der Portalbetreiber über Service-Level-Agreements mit den Ressourcenbetreibern sicherstellen müsste, ob und zu welchem Preis die gewünschten Anforderungen erfüllt werden können. Einige Optionen sind in der Portalmaske bereits vorhanden. Zumeist ist jedoch noch keine Funktionalität hinterlegt, so dass hier Ziele nicht erreicht wurden.

F: Betreuung der Pilotanwender (AP5-TP1)

Als Pilotanwender waren die assoziierten Partner Institut für Oberflächentechnik der Technischen Universität Dresden, Kjellberg Finsterwalde Plasma und Maschinen GmbH, Linde AG in Unterschleißheim und EWM Hightec Welding GmbH, Mündersbach vorgesehen. Aufgrund von Umstrukturierungen bei den Partnern und wegen deutlicher Verzögerungen bei der Bereitstellung einer evaluierbaren Grid-Anwendung beteiligten sich nur die Partner Technische Universität Dresden, vertreten durch Dr. M. Schnick und Dipl.-Ing. M. Hertel, und Kjellberg Finsterwalde Plasma und Maschinen GmbH, vertreten durch Dr. R. Nogowski, bis zum Ende aktiv am Forschungsvorhaben. Sie nahmen an den Treffen der Pilotanwender und einigen Projekttreffen teil und wirkten an den Soll-Ist-Erfassungen (insbesondere zur Betriebswirtschaft), dem Erstellen der Pflichtenhefte zur Virtualisierung und zur Benutzeroberfläche sowie der Planung des Demonstrationsfalls mit.

Die CFX Berlin Software GmbH informierte die Pilotanwender regelmäßig per E-Mail und Telefon und bei drei Pilotanwendertreffen über die Projektfortschritte. In der Arbeitsplanung war vorgesehen, die Pilotanwender bereits im Jahre 2011 um die Evaluierung einer ersten Portallösung zur Rechnung mit ANSYS CFX auf Cluster-Grid-Ressourcen zu bitten. Leider gab es diese evaluierbare Version erst seit dem 16. März 2012.

Die CFX Berlin Software GmbH hat sich beim DFN als Grid-RA registrieren lassen, um seinen Mitarbeitern und den Pilotanwendern Grid-Zertifikate ausstellen zu können. Da das Portal am INP Greifswald jedoch keine Grid-Zertifikate benötigt und der Zugriff des Portals auf die Rechenressourcen ohne Zertifikate abläuft, waren zur abschließenden Evaluierung keine Zertifikate notwendig.

G: Evaluierung der Portierung (AP8-TP1) und Soll-Ist-Erfassung zu Projektende (AP11-TP1)

Die Evaluierung der technischen Lösung und die Soll-Ist-Erfassung zu Projektende wurden von der CFX Berlin Software GmbH und den beiden assoziierten Partnern Technische Universität Dresden und Kjellberg Finsterwalde Plasma und Maschinen GmbH durchgeführt. Von beiden Partnern liegen Evaluierungsberichte [P28, P30] vor. Die wesentlichen Erkenntnisse für die Bereiche Virtualisierung und Integration von ANSYS CFX, Benut-

zeroberfläche und Portalzugang, Integration ins PT-Grid sowie eine Gesamtbeurteilung werden im Folgenden dargelegt.

Virtualisierung und Integration von ANSYS CFX: Die Verwendung einer Virtualisierungslösung statt der im Grid bisher üblichen nativen Installation hat verschiedene Vorteile in den Bereichen Sicherheit, Bedienfreundlichkeit, Übertragbarkeit und Nachhaltigkeit. Dies zeigt sich auch daran, dass Cloud-Computing, das sich im Rahmen der Projektlaufzeit zu dem neuen IT-Trend entwickelt hat, vollständig auf Virtualisierung der Ressourcen beruht.

Mit der Virtualisierungslösung der Philipps-Universität Marburg, bestehend aus den Komponenten Image Creation Station und Xen Grid Engine II, wurde im Rahmen des Projekts ein technisch ausgereiftes und produktiv einsetzbares Werkzeug geschaffen. Mehrere Fachveröffentlichungen und Dissertationen der Philipps-Universität Marburg zeugen von dem hohen wissenschaftlichen Stand, der nicht nur theoretisch, sondern auch als frei verfügbares Softwaretool vorhanden ist. Insbesondere die Einführung des Image Provider Supports in die ICS und von Copy-on-Write-Layern in den virtuellen Maschinen erlaubt die bedienfreundliche und portierbare Nutzung.

Problematisch an der Verwendung von Virtualisierungslösungen im Grid-Kontext ist, dass die Rechenzentrenbetreiber diesen Lösungen skeptisch gegenüberstehen, da sie mit Sicherheitsproblemen und Performanceeinbußen rechnen. Dies führte sogar an der Philipps-Universität Marburg dazu, dass die Virtualisierungslösung nicht auf den eigentlichen D-Grid-Ressourcen, sondern nur auf institutseigenen Ressourcen installiert werden durfte. Einer Nutzung auf Ressourcen der CFX Berlin Software GmbH steht die Komplexität der Virtualisierungslösung entgegen, so dass Installation und Wartung mit hohem Aufwand und der Betrieb mit schwer kalkulierbaren Sicherheitsproblemen (z. B. Angriffe von außen) verbunden sind.

Da es sich um eine komplexe kommerzielle Software handelt, erfordert die Integration von ANSYS CFX eine Installation von mehreren Programmen mit entsprechenden Bibliotheken unter Administratorrechten bei nur wenigen offiziell unterstützten Betriebssystemen. Während dies bei der Virtualisierungslösung keinerlei Problem darstellt, da Administratorrechte und freie Konfigurierbarkeit gewährleistet sind, erfordert dies bei Grid-Ressourcen einen sehr kooperativen Administrator, zumal typischerweise alle sechs Monate Service Packs und etwa alle 18 Monate neue Versionen eingespielt werden müssen. Der Aufruf von ANSYS CFX sowohl nativ als auch virtualisiert und sowohl für serielle als auch für parallele Simulationen ist mit verhältnismäßig einfachen Skripten möglich. Auch die Parallelkommunikation mit MPI funktionierte nativ und virtualisiert.

Problematisch an der Verwendung von ANSYS CFX in Grid-Umgebungen ist, dass die

Firma ANSYS, Inc. als Entwickler des Programms noch kein Grid-Lizenzmodell entwickelt hat, so dass eine legale Benutzung in Grid-Umgebungen momentan kaum möglich ist. Kundenlizenzen dürfen nur beim Kunden (30 km Umkreis) genutzt werden, so dass hier höchstens ein nahegelegenes Rechenzentrum in Frage käme. Zudem sind Prepaid-Lizenzen an eine feste Rechner-IP gebunden. Die CFX Berlin Software GmbH als Vertriebspartner von ANSYS, Inc. hatte erwartet, dass durch die Mitarbeit von ANSYS Germany im EU-Projekt SmartLM (www.smartlm.eu) bis zum Ende des PT-Grid-Forschungsvorhabens ein Grid-fähiges Lizenzmodell bereitsteht, das die notwendige Flexibilität zu moderaten Preisen bietet. Andere Programme ohne Lizenzen oder mit Grid-fähigem Lizenzmodell, wie von der Firma ESI GmbH im Rahmen von Teilprojekt 2 für CFD-ACE+ entwickelt (siehe Abschnitt 6.3), könnten jedoch analog zu den Tests mit ANSYS CFX virtualisiert in Grid-Umgebungen genutzt werden.

Benutzeroberfläche und Portalzugang: Die Benutzeroberfläche der Image Creation Station wurde im Rahmen des PT-Grid-Projekts erweitert und ist einfach als Inlineframe in Portale einzubinden. Durch den implementierten Image Provider Support und bei Verwendung von Robot-Zertifikaten könnte auf die Verwendung der ICS ganz verzichtet werden, wenn entsprechend vorgefertigte virtuelle Maschinen bereitgestellt werden und im Portal ausgewählt werden können. Hieraus resultiert, dass die Virtualisierungslösung in der Benutzeroberfläche nicht mehr auftaucht und somit die Benutzung von Virtualisierung vor dem Benutzer verborgen bleibt.

Aus Sicht der CFX Berlin Software GmbH wurde leider im PT-Grid-Projekt die Möglichkeit vertan, einen PT-Grid-einheitlichen Portalzugang zu entwickeln. Statt dessen wurden drei verschiedene Portale in den Teilprojekten 2, 3 und 4 entwickelt und benutzt. Dabei bietet das im Rahmen des Teilprojektes 2 am INP Greifswald exemplarisch umgesetzte Online-Beratungswerkzeug die Möglichkeit, die Demonstratoren aller Teilprojekte über <http://portal.inp-greifswald.de> im Internet zu erreichen. Die CFX Berlin Software GmbH hat sich an der Entwicklung am INP Greifswald beteiligt, so dass hier ein einheitlicher Portalzugang für die Teilprojekte 1 und 2 gewährleistet wurde. Allerdings fehlen wesentliche Komponenten, wie z. B. Nutzerverwaltung mit Benutzergruppen, Abrechnung mit Kostenschätzung oder die Möglichkeiten von Monitoring und Interaktion. Aus Sicht der CFX Berlin Software GmbH erscheint die Implementierung problemspezifisch, so dass bei einer weiteren, insbesondere kommerziellen Nutzung mit erheblichem Anpassungs- und Erweiterungsbedarf zu rechnen ist.

Der Zugriff auf Grid-Ressourcen mit Robot-Zertifikaten statt über persönliche Grid-Zertifikate und die entsprechende Nutzerverwaltung im Portal mit persönlichem Login erscheint der CFX Berlin Software GmbH zukunftsweisender, zumal die Beantragung von

Grid-Zertifikaten vergleichsweise aufwändig ist und diese dann von allen Rechenressourcen auf lokale Logins gemappt werden müssen. Auch hier ist die Akzeptanz durch die Rechenzentrenbetreiber fraglich.

Integration ins PT-Grid: Aus Sicht der CFX Berlin Software GmbH ist für eine weitere kommerzielle Verwertung der Projektergebnisse eine vollständige Grid-Lösung notwendig, die aus den verschiedenen im Rahmen des Verbundprojekts erstellten Komponenten (siehe Abbildungen 3 und 27) und einigen weiteren Komponenten besteht. Sie muss Datenmanagement, Scheduling bzw. Workflow Engine, Virtualisierung, Portal bzw. Benutzeroberfläche, Rechenressourcen, Benutzerverwaltung inklusive Authentifizierung und Autorisierung, Abrechnung (Accounting und Billing) sowie Betreuung der Einrichtung, Schulung, Support und SLA-Abschlüsse beinhalten. Im Rahmen des Projekts wurde noch keine vollständige Lösung realisiert. Die Virtualisierungslösung wurde an der Philipps-Universität Marburg auf Nicht-Grid-Ressourcen ohne Datenmanagement, Scheduling und Portalzugriff installiert. Die Komponenten Datenmanagement, Scheduling und Portalzugriff wurden am INP Greifswald installiert, von wo auch auf Grid-Ressourcen in Dortmund zugegriffen werden konnte. Während das D-Grid auf persönliche Grid-Zertifikate zur Authentifizierung setzt, wurde im Portal eine rudimentäre Nutzerverwaltung mit Login und Passwort eingesetzt, die über Robot-Zertifikate auf die Ressourcen zugreifen soll. Für die Bereiche Abrechnung und Betreuung war jedes Teilprojekt selbst zuständig.

Hinzu kommt, dass die einzelnen Komponenten von verschiedenen Partnern entwickelt und bereitgestellt wurden. Im Rahmen des PT-Grid-Verbundprojekts wurde das Scheduling von der Technischen Universität Dortmund, das Datenmanagement von der Firma onScale solutions GmbH, die Virtualisierungslösung von der Philipps-Universität Marburg und Portal und Benutzeroberfläche jeweils von der GNS Systems GmbH, dem INP Greifswald und der Ruhr-Universität Bochum entwickelt. Ein Teil der Entwickler hatte bereits während der Projektlaufzeit die Einrichtung verlassen, so dass Pflege und Weiterentwicklung nur bei erneuter Einarbeitung möglich erscheinen.

Auch die nutzbaren Rechenressourcen sind unklar. Die D-Grid-Ressourcen dürfen nicht kommerziell genutzt werden. Ob und wie die inzwischen auch veraltete Infrastruktur nach Ende der dritten Phase des D-Grids noch angeboten wird, ist unklar. Die PT-Grid-Ressourcen sind zu wenig leistungsfähig und standen nach Projektende zum Teil nicht mehr zur Verfügung. Kommerzielle Ressourcen, auf denen diese D-Grid-spezifische Lösung einsetzbar wäre, stehen nach Ansicht der CFX Berlin Software GmbH kaum zur Verfügung.

Gesamtbewertung: Das Ziel von der CFX Berlin Software GmbH war es, im Rahmen des Teilprojekts 1 die kommerzielle CFD-Software ANSYS CFX flexibel, sicher, zu-

verlässig, bedienfreundlich, übertragbar und nachhaltig für den Endanwender auf Grid-Ressourcen nutzbar zu machen. Folgende Voraussetzungen sind nach Ansicht der CFX Berlin Software GmbH für eine kommerzielle Verwertung notwendig:

- Produkt: Ein einsetzbares Produkt mit allen technischen Komponenten sollte zumindest in einer demonstrierbaren Vorversion („0.9“) vorhanden sein.
- Produktwartung: Es muss klar sein, wer zu welchen Konditionen notwendige Anpassungen an dem Produkt vornehmen kann, d. h., Version 1.0, 1.x und 2.x erzeugt.
- Ressourcen: Es muss klar sein, welche Ressourcen zu welchen Konditionen (Preis, Verfügbarkeit, Zuverlässigkeit, Kompatibilität mit technischer Lösung) verfügbar sind.
- Preis: Es muss zumindest eine Schätzung des Preises für das Produkt und die Hardwareressourcen verfügbar sein.
- Abrechnungsmodalitäten: Es muss klar sein, wer welche Leistungen wie und wann gegenüber wem abrechnet und wie er die Nutzung belegt.

Die CFX Berlin Software GmbH sieht alle diese Voraussetzungen als nicht hinreichend erfüllt an:

- Produkt: Die CFX Berlin Software GmbH hat eine in den einzelnen Komponenten zum Teil ausgereifte technische Lösung, der aber wesentliche Komponenten, wie z. B. Accounting und Billing, Monitoring und Interaktion, fehlen und die als vollständige Lösung nicht umgesetzt und getestet wurde. Für den Einsatz von ANSYS-Software fehlt ein gridfähiges Lizenzmodell von ANSYS, Inc.
- Produktwartung: Die Wartung wird dadurch fast unmöglich, dass es nicht ein homogenes Produkt gibt, sondern mehrere Komponenten von verschiedenen meist akademischen Partnern mit hohen Personalfluktuationen. Diese Komponenten sind uneinheitlich geplant, programmiert und dokumentiert.
- Ressourcen: Es existieren kaum kommerziell nutzbare Grid-Ressourcen, insbesondere wenn die von den Administratoren der Hochschulrechenzentren wenig geschätzte Virtualisierung eingesetzt werden soll. Die Grid-Lösung mit der Middleware Globus Toolkit 4 erscheint für kommerzielle Anwendungen veraltet, komplex und unsicher. Cloud-Computing ist stetig im Kommen und wird bald nicht nur für Webapplikationen, sondern auch für rechenintensive Anwendungen genutzt werden.

- Preis: Aufgrund fehlender kommerzieller Ressourcen, Wartungsmöglichkeiten und Grid-fähiger Lizenzen für ANSYS CFX kann kein Mindestpreis für die Nutzung von ANSYS CFX auf Grid-Ressourcen bestimmt werden. Zum Maximalpreis, den die Kunden zu zahlen bereit wären, konnte der Projektpartner Fachhochschule Stralsund keine Aussage machen.
- Abrechnungsmodalitäten sind ebenfalls sowohl technisch als auch verwaltungsmäßig ungeklärt. Aufgrund der im Vergleich zu den Ressourcen teuren Softwarelizenzen können in kurzer Zeit beträchtliche Summen anfallen, die eine für den Benutzer zuverlässige und für den Lizenzgeber nachweisbare Softwarenutzung erfordern.

Hinzu kommt, dass die Kundenakzeptanz deutlich geringer ist als zu Beginn des Projekts von der CFX Berlin Software GmbH erwartet. Obwohl Cloud-Computing in aller Munde ist, zeigten sich unerwartet große Vorbehalte möglicher Kunden gegenüber Daten auf externen Servern. Wie der PT-Grid-interne Evaluierungsbericht der Kjellberg Finsterwalde Plasma und Maschinen GmbH [P30] verdeutlicht, stellt die noch ungeklärte Lage hinsichtlich Haftung und Sicherheiten bzw. Verbindlichkeiten zur Ausfallsicherheit und dem Support der Ressourcen ein großes Problem dar, das sowohl die technische Seite mit der Hardware, wie z. B. Rechencluster, Datenspeicher und Portalserver, als auch die Software, die teils zugehörig zum Betrieb und Zusammenspiel der Hardwareressourcen ist, beinhaltet und den Support der Simulationssoftware inklusive der implementierten Modelle mit einschließt. Der Mangel im Hinblick auf Datensicherheit wird als besonders kritisch gesehen. Das betrifft nicht nur das Fehlen einer Möglichkeit zur aktiven Verschlüsselung sensibler Nutzerdaten während der gesamten Zeit, in der sich diese außerhalb firmeneigener Ressourcen befinden, im Demonstrator des Teilprojekts, sondern schließt grundsätzlich große Vorbehalte hinsichtlich Datensicherheit, Haftung und Ausfallsicherheit gegenüber etablierten Anbietern kommerzieller Ressourcen, wie Cloud-Dienstleistern, die international agieren, mit ein. Diese Einschränkungen verhindern gegenwärtig eine nachhaltige kommerzielle Nutzung eines Online-Beratungswerkzeuges durch die Kjellberg Finsterwalde Plasma und Maschinen GmbH [P30].

Nach Ansicht der CFX Berlin Software GmbH wäre ein Grid-Dienstleister als zentraler Infrastrukturanbieter, der die „Gridifizierung“ des Anbieters der Inhalte, d. h. des Plasmaperaters, und des Kunden des Plasmaperaters durchführt, notwendig. Das Angebot des Grid-Dienstleisters wäre eine „schlüsselfertige“ Grid-Infrastruktur als Dienstleistung bestehend aus eigener oder vermittelter Hardware, die auch Clouds beinhalten kann, abgeschlossenen Service-Level-Agreements, aller notwendigen Middle- und Software, unter anderem für Scheduling, Datenmanagement, Virtualisierung und Portalzugang mit Benutzeroberfläche, sowie Grid-fähigen Lizenzen. Der Grid-Dienstleister übernimmt die Verwal-

tungsaufgaben, wie Nutzerverwaltung, Speicherverwaltung, Archivierung, Lizenzverwaltung, Rechnungsstellung und Portalanpassung, führt die Pflege notwendiger Middle- und Software zentral durch und bindet neue Anwendersoftware ein (Installation). Zudem ist er für Schulung und Support von Kunden und Inhalteanbietern verantwortlich. Nach Maßgabe des Anbieters der Inhalte würde der Grid-Dienstleister Software installieren, Lizenzen bereithalten und Oberflächen (im Portal) gestalten, so dass der Plasmaberater über die Grid-Infrastruktur seine Kunden betreuen kann. Bezahlt würde der Grid-Dienstleister für diese Bereitstellung und Anpassung vom Anbieter der Inhalte und für genutzte Ressourcen und Lizenzen vom Kunden. Dieses Konzept hatte CFX Berlin beim projektinternen Workshop „Verwertung“ am 16.12.2010 in Stralsund zur Diskussion gestellt, stieß damit jedoch im eher akademisch geprägten Projektumfeld auf wenig Resonanz.

Die CFX Berlin Software GmbH hat nach eigener Ansicht nicht die Kompetenz und die Mitarbeiter, um selbst als ein derartiger Grid-Dienstleister aufzutreten, und verfügt auch nicht über die freien Mittel, um entsprechendes Personal anzustellen. Deswegen sieht die CFX Berlin Software GmbH ihrerseits keine Verwertungsmöglichkeit für die Ergebnisse des PT-Grid-Forschungsvorhabens und kommt zu dem Schluss, dass eine vermarktbar und zukunftsfähige Lösung für die kommerzielle Nutzung von ANSYS CFX auf Grid-Ressourcen, insbesondere D-Grid-Ressourcen, für die CFX Berlin Software GmbH derzeit nicht absehbar ist. Sollte sich in Zukunft ein solcher Grid-Dienstleister etablieren, könnte sich die CFX Berlin Software GmbH gut vorstellen, als Inhalteanbieter aufzutreten.

6.3 Teilprojekt 2: Magnetohydrodynamische 3d Simulation

F. Sigeneger¹, M. M. Becker¹, H.-W. Mindt² und D. Loffhagen¹

¹ Leibniz-Institut für Plasmaforschung und Technologie e.V. (INP), Greifswald

² Engineering Systems International (ESI) GmbH, Essen

Ziel des Teilprojektes 2 war die Realisierung eines Online-Beratungswerkzeuges, das die Kundenbindung erhöht, Kosten für Modellrechnungen senkt und Anwendungspotential insbesondere für kleinere und mittlere Unternehmen besitzt, am Beispiel der magnetohydrodynamischen Simulation von Plasmabrenneranwendungen. Das vorab erstellte Plasmamodell, das die kommerzielle Software CFD-ACE+ der ESI GmbH zur Berechnung der Ergebnisse verwendet, sollte für die Nutzung im Plasma-Technologie-Grid tauglich gemacht, auf den Servern des PT-Grids installiert und Pilotanwendern zur Unterstützung ihrer Entwicklungstätigkeit zur Verfügung gestellt werden. Dazu war das Online-Beratungswerkzeug einschließlich einer Schnittstelle zwischen der einheitlichen PT-Grid-Bedienoberfläche und der Software CFD-ACE+ umzusetzen, CFD-ACE+ an das PT-Grid-Portal zu adaptieren, ein Lizenzmodell zu erarbeiten und ein D-Grid-fähiger Lizenzserver für die Software CFD-ACE+ aufzubauen und zu integrieren. Ein weiteres Ziel bestand in der Unterstützung bei der Erarbeitung eines nachhaltigen und tragfähigen Geschäftsmodells des PT-Grid-Projektes (siehe Abschnitt 6.1.2).

Das Teilprojekt wurde arbeitsteilig von den Partnern INP Greifswald und ESI GmbH auf der Grundlage der von den informationstechnischen Partnern realisierten Infrastruktur umgesetzt. Die Teilprojektleitung lag beim INP Greifswald. Die Arbeitsplanung umfasste die folgenden Arbeitspakete:

1. Soll-Ist-Erfassung (AP1-TP2) zu Projektbeginn,
2. Grundinstallation von CFD-ACE+ (AP2-TP2),
3. Aufbau der PT-Grid-Server für Teilprojekt 2 (AP3-TP2),
4. Produktion: Lizenzmodell und Abrechnungssoftware (AP4-TP2) für das PT-Grid,
5. Produktion (AP5-TP2) von Online-Hilfefunktion und PT-Grid-spezifischer Endnutzeroberfläche,
6. Pilotanwendung (AP6-TP2),
7. Soll-Ist-Abschlussanalyse (AP7-TP2) sowie
8. Lektorat, Dokumentation und Schulungsunterlagen (AP8-TP2).

Sie ist im Anhang A.3 in Abbildung 98 mit den entsprechenden Zuordnungen zu den Projektpartnern dargestellt.

AP1-TP2: Soll-Ist-Erfassung

Ausgangspunkt für das Teilprojekt 2 war das Modell eines induktiv gekoppelten Plasma-brenners, der zur Herstellung von Formteilen für die Produktion von optischen Fasern Verwendung findet. Das Plasmamodell umfasst das vollständige System der magneto-hydrodynamischen Gleichungen einschließlich der Navier-Stokes-Gleichungen, die die Erhaltung von Masse, Impuls und Enthalpie beschreiben, und der Maxwell-Gleichungen, die vermittelt des magnetischen Vektorpotentials gelöst werden. Die Gleichungen werden vervollständigt durch thermodynamische Eigenschaften und Transporteigenschaften, wie Wärmekapazität, Viskosität, thermische und elektrische Leitfähigkeit und Strahlungsverluste. Diese Größen wurden vorab als Funktion der Temperatur berechnet und in Wertetabellen bereitgestellt. Das Programm zur Modellierung des Plasmabrenners basiert auf der kommerziellen Simulationssoftware CFD-ACE+ unter Einbeziehung INP-eigener Fortran-Routinen, die als dynamische Bibliothek in CFD-ACE+ eingebunden werden. Es beschreibt das durch die Spulen angeregte thermische Argonplasma bei Normaldruck unter dem Einfluss einer axialen Strömung. Für Demonstrationszwecke wurde ein axial-symmetrisches zweidimensionales Modell eines Plasmabrenners verwendet.

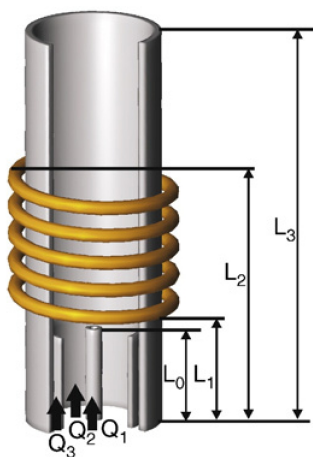


Abbildung 34: Konfiguration des Plasmabrenners

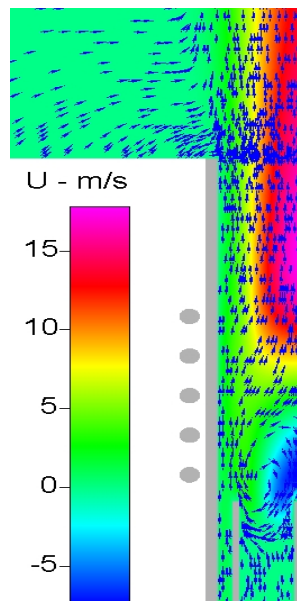


Abbildung 35: Axiale Geschwindigkeit

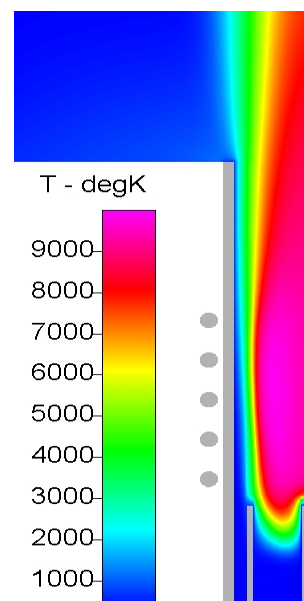


Abbildung 36: Temperatur

Abbildung 34 zeigt eine vereinfachte Darstellung des induktiv gekoppelten Plasma-

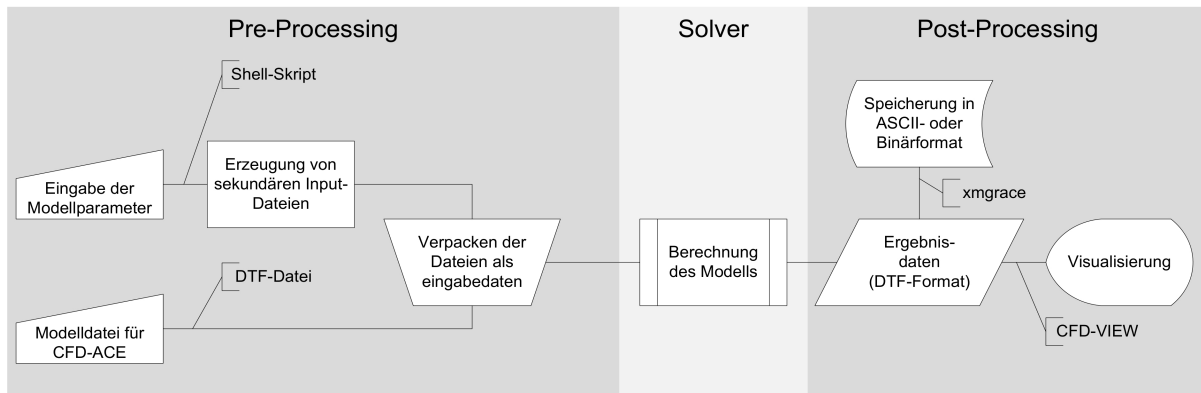


Abbildung 37: Programmablauf für CFD-ACE+ mit entsprechender Erweiterung im Pre-processing im Teilprojekt 2

brenners und verdeutlicht die Eingabeparameter des Modells. Die Strömung wird durch Vorgabe der Gasströme Q_1 , Q_2 und Q_3 durch die verschiedenen Querschnitte am Einlass des Plasmabrenners vorgegeben. Die drei Gasströme, die „Präkursor“ (Q_1), „Plasma“ (Q_2) und „Abschirmung“ (Q_3) genannt werden, ermöglichen die Kontrolle der Strömungsdynamik im aktiven Volumen des Plasmabrenners und stehen in Verbindung mit den entsprechenden Gasströmen, die außerhalb des Plasmabrenners zur Gasphasenabscheidung verwendet werden. Weitere Parameter sind die Frequenz und die Stromstärke des Stromes durch die Spule. Im Ergebnis der Rechnungen stehen verschiedene Größen zur Verfügung, die die Strömung, den Zustand des Plasmas sowie des Magnetfeldes erfassen. Als Beispiele sind in Abbildung 35 die Axialkomponente U der Geschwindigkeit und ihre Richtung sowie in Abbildung 36 die Temperatur T dargestellt für eine Frequenz von 3 MHz, eine Stromstärke von 95 A und die Gasströme $Q_1 = 1 \text{ slm}^{25}$, $Q_2 = 3 \text{ slm}$ und $Q_3 = 21 \text{ slm}$.

Informationstechnik: Der Programmablauf ist ähnlich dem Ablauf des zugrundeliegenden kommerziellen Simulationsprogramms CFD-ACE+ und lässt sich in die drei Phasen Datenvorbereitung (Preprocessing), Lösung des Modells (Solver) und Aufbereitung der Ergebnisse (Postprocessing) untergliedern. Dabei wurde die Datenvorbereitungsphase durch die zusätzliche Integration der INP-eigenen Routinen und Modellparameter mittels geeigneter Skripte bereits angepasst.

Der Ablauf bei der Ausführung einer Simulation ist in Abbildung 37 dargestellt. Ausgangspunkt ist die Eingabe der genannten Parameter und die Formulierung einer Begrenzung auf sinnvolle Werte. Anschließend wird durch den Aufruf eines Shell-Skripts, mit den Parametern als Argumente, die Erzeugung von verschiedenen sekundären Input-Dateien gestartet. Die modifizierte Eingabedateien werden gemeinsam mit der eigentlichen Mo-

²⁵slm: Standard-Liter pro Minute; $1 \text{ slm} = 1.68875 \text{ Pa m}^3/\text{s}$

delldatei (base.DTF) für CFD-ACE+ sowie weiteren Datendateien zu einer Job-Datei gepackt und zum Zielrechner geschickt. Auf diesem Rechner ist die dynamische Bibliothek der INP-eigenen Fortran-Routinen zu kompilieren, oder es werden vorkompilierte Bibliotheken der möglichen Architekturen bereitgestellt. Das Programm wird gestartet und eine Datei (base.RUN) mit der Programm-Identifikationsnummer wird angelegt. Im Falle eines Fehlers wird eine Datei (base.ERR) mit einer Fehlermeldung erzeugt. Bei erfolgreicher Rechnung werden als Ausgaben die Ergebnisdatei (base.DTF) mit allen Ergebnisdaten, eine Protokolldatei (base.out) mit Angaben zum Programmablauf und eine Textdatei (base.RSL) mit der Entwicklung der Residuen erzeugt. Die Ausgabedaten (Grafiken, ASCII-Tabellen) werden skriptgesteuert mit CFD-VIEW generiert.

Das Programm wurde ohne Parallelisierung verwendet. Bei Parallelisierung fallen weitere Lizenzkosten an. Der Arbeitsablauf im Teilprojekt 2 fand Eingang in den in Abbildung 2 dargestellten allgemeinen Arbeitsablauf im Plasma-Technologie-Grid und wurde im PT-Grid-internen Bericht „Soll-Ist-Erfassung der Informationstechnik-Infrastruktur im PT-Grid“ [P4] dokumentiert.

Betriebswirtschaft: Die Zuarbeit zu betriebswirtschaftlichen Aspekten durch das INP Greifswald und die ESI GmbH an die Fachhochschule Stralsund erfolgte im Rahmen von Gesprächen auf der Grundlage eines entsprechenden Fragebogens, der die Bereiche Grid-bezogene Aktivitäten (mit den Aspekten Projektgeschäft, Lizenzgeschäft, Wettbewerb, Markt, Umgang mit Geheimhaltung, Personal, Kontakte, Kunden und Internationalität) und geschäftsorientierte Zielvorstellungen betraf. Die Ergebnisse der Befragungen, die zum Teil vertrauliche Informationen enthalten, wurden im PT-Grid-internen Ergebnisbericht „Erhebung der derzeitigen Gridaktivitäten und der geschäftsorientierten Zielvorstellungen (Meilenstein 1) der plasmatechnischen Berater des Plasma-Technologie-Grid-Projektes“ [P2] der Fachhochschule Stralsund dokumentiert und sind im Abschnitt 6.1.2 zusammenfassend für die befragten Institutionen dargestellt.

Online-Beratungswerkzeug: Das Online-Beratungswerkzeug hatte in den verschiedenen Teilprojekten unterschiedliches Gewicht und sollte im Teilprojekt 2 exemplarisch detaillierter untersucht werden. Typische Beratungsleistungen im Bereich der Plasmamodellierung bestehen derzeit aus wissenschaftlich-technischen Ergebnissen, die mit hauseigenen oder kommerziellen Softwarepaketen unter Nutzung eigener und/oder externer Daten bestimmt werden. Sie umfassen unter anderem die Klärung von Plasmaphänomenen und die verfahrenstechnische Optimierung von Prozessen oder Anlagen. Die Modellrechnungen sind kundenspezifisch. Der Forschungsauftrag endet mit der Abgabe der Ergebnisse in einem Forschungsbericht. Je nach Vertragsvereinbarung werden auch die Modelle an den Kunden übergeben. Dieses Beratungsmodell für wissenschaftlich-technische Modellrech-

Wissenschaftlich-technische Modellrechnung

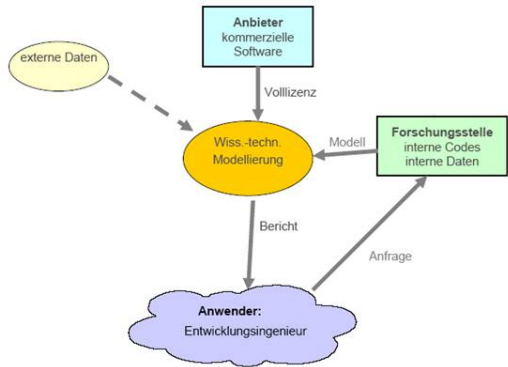


Abbildung 38: Beratungsmodell für wissenschaftlich-technische Modellrechnungen

Dauerhafte Nachnutzung des Modells

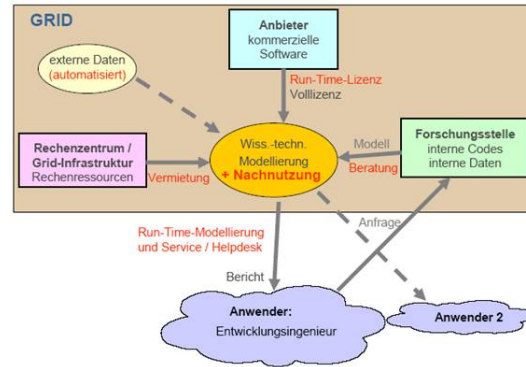


Abbildung 39: Online-Beratungswerkzeug für Grid-basierte Entwicklungsunterstützung

nungen ohne Grid-Nutzung ist in Abbildung 38 skizziert. Es beinhaltet die Arbeitsschritte Akquisition, Angebotsphase, Umsetzung sowie gegebenenfalls Neuakquisition für dasselbe Modell oder weitergehende Simulationen.

Ein Online-Beratungswerkzeug stellt ein Dienstleistungspaket dar, das von einem wissenschaftlich-technischen Berater angeboten wird und mehr als die fachliche Komponente beinhaltet. Es umfasst

- die Erfassung der plasmatechnischen Aufgabenstellung sowie des geplanten betrieblichen Einsatzbereiches eines online verfügbaren Modells,
- die Erstellung eines Grid-fähigen Plasmamodells und die Installation der notwendigen Softwarewerkzeuge im Grid und beim Endnutzer,
- die Bereitstellung der notwendigen Programme, Lizenzen und Daten,
- eine transparente Kostenkontrolle,
- den Schutz vertraulicher Daten,
- die Gewährleistung des Zugriffs auf ausreichende Grid-Ressourcen,
- die Produktion und Installation einer endnutzerfreundlichen Steuerungsoberfläche für das Simulationsmodell und der für das Grid notwendigen Parameter, Pre- und Postprocessing sowie Datenexportfunktion,
- gegebenenfalls die Entwicklung von Optimierungsalgorithmen für das Simulationsmodell,

- die Schulung der Endnutzer in der Modellbedienung,
- die Integration einer interaktiven Online-Hilfefunktion,
- die Dokumentation,
- eine Beratungshotline sowie
- Wartung.

Ziel war es, ein Service-Paket zur Verfügung zu stellen, das einen wissenschaftlich-technischen Berater in die Lage versetzt, alle Leistungen aus einer Hand anzubieten, die zum Einsatz einer Grid-basierten Plasmamodellierung beim Endnutzer notwendig sind, so dass dem Anwender ein Produkt zur Verfügung steht, das er aus einer Hand bezieht. Dabei sind fachliche Fragen z. B. zur Informationstechnik und Plasmamodellierung sowie rechtliche Fragen hinsichtlich Gewährleistung, Haftung, Lizenzen, Sicherheit usw. vorab geklärt. Die Einbindung in die D-Grid-Infrastruktur sollte dabei die längerfristige Online-Nutzung der plasmatechnischen Modelle in einem vom Endnutzer festzulegenden Betriebsteil, z. B. der Entwicklungsabteilung, ermöglichen.

Abbildung 39 illustriert dieses Beratungsmodell für wissenschaftlich-technische Modellrechnungen im Grid. Es beinhaltet neben der Akquisition und der Angebotsphase auch die Umsetzung des Modells in der Grid-Infrastruktur, die Einführung des Nutzers in die Bedienoberfläche und dessen Anwendung für den vereinbarten Servicezeitraum als Arbeitsschritte. Dadurch entsteht ein höherer Planungsaufwand für den Berater, und es resultiert eine bedeutend komplexere Vorgehensweise mit einer größeren Anzahl an Beteiligten, wie im PT-Grid-internen Bericht „Klassifikationsschema für das „Online-Beratungswerkzeug“-Pflichtenheft in Teilprojekt 2 des Plasma-Technologie-Grid-Projektes“ [P3] dargelegt wird. In diesem Bericht wird auch ausgeführt, in welchen Bereichen einer Beratungsinstitution (Geschäftsführung, Forschung und Entwicklung, Konstruktion und Arbeitsvorbereitung, Produktion, Informationstechnik, Rechtsabteilung, Marketing und Vertrieb, Einkauf, Buchhaltung, Rechnungswesen und Controlling sowie Qualitätsmanagement) die Aufgabenstellung Grid-basiertes Online-Beratungswerkzeug beachtet werden muss. Es wurde aufgezeigt, dass das Online-Beratungswerkzeug mit fast allen Bereichen eines Produktionsbetriebes verzahnt ist. Dabei wurde empfohlen, dass die Einführung des Online-Beratungswerkzeugs von der Geschäftsführung durchzuführen ist. Zudem wurde unter anderem auch deutlich, dass viele rechtliche Fragen offen sind und dass die bisherigen allgemeinen Geschäftsbedingungen und üblichen Beraterverträge als Vertragsgrundlage für das Online-Beratungswerkzeug nicht ausreichen. Der verhandelte Beratervertrag muss durch Grid-spezifische Regelungen, die nicht Gegenstand des Projektes waren, ergänzt werden.

AP2-TP2: Grundinstallation von CFD-ACE+

Das Softwarepaket CFD-ACE+ der ESI GmbH kann auf einer breiten Anzahl von Hardware-Plattformen eingesetzt werden. Diese Software ist verfügbar auf Datenträgern wie DVDs und kann alternativ über die Webseite der ESI GmbH heruntergeladen werden. Ein FlexNet[®] basiertes Lizenzierungsverfahren wird zur Programmfreigabe der benötigten Module verwendet. Hierfür wird üblicherweise ein Lizenzmanager eingesetzt, der von den Programmen abgefragt wird. Lizenzmanager, Software und selbstverständlich entsprechende Benutzerkonten müssen auf einer Arbeitsumgebung eingerichtet werden. Dem Benutzerkonto sind Umgebungsvariablen zuzuordnen, die den Abruf der Lizenz und damit die Softwarenutzung ermöglichen.

Zur Durchführung der Modellrechnungen wurde dem INP Greifswald vereinbarungsgemäß eine Lizenz der Software CFD-ACE+ für die Projektlaufzeit von der ESI GmbH zur Verfügung gestellt. Zur Installation von CFD-ACE+, die zuerst auf den lokalen Ressourcen des INP Greifswald erfolgte, waren selbstextrahierende Archive zu entpacken und die entsprechenden Pfade anzupassen. Die Anwendung lief unter Linux. Zum Übersetzen der dynamischen Bibliotheken wurde der Compiler g95 benötigt. Um eine Softwarenutzung vor Bereitstellung des Lizenzservers durch die ESI GmbH zu ermöglichen, wurde eine temporäre Lizenzdatei an das INP Greifswald geliefert. Diese Datei wurde am INP Greifswald über das übliche Lizenzmanagersystem (floating Lizenz) installiert. Hierdurch wurde ermöglicht, dass das INP Greifswald seinen Projektaufgaben nachkommen konnte.

Zudem erhielt die Technische Universität Dortmund als Projektpartner ebenfalls eine zeitlich begrenzte Lizenz von CFD-ACE+, um die Referenzinstallation, die für die Verwendung der Middleware Globus-Toolkit erforderlich war, im Zusammenspiel mit der Software CFD-ACE+ zu testen.

AP3-TP2: Aufbau der PT-Grid-Server für Teilprojekt 2

In die in Abbildung 5 dargestellte Gesamtinfrastruktur des PT-Grids wurden im Rahmen des Projektes ein Globus-Compute-Server (ptgrid.inp-greifswald.de) und der PT-Grid-Portalserver (<http://portal.inp-greifswald.de>) des INP Greifswald sowie der Lizenzserver (ptgrid.esigmbh.de) der ESI GmbH integriert.

Der Aufbau des Globus-Compute-Server am INP Greifswald erfolgte auf der Basis des von der Technischen Universität Dortmund vorgeschlagenen PT-Grid-Referenzsystems, das in Abbildung 4 veranschaulicht ist. Das Zusammenwirken der beteiligten Komponenten ist in Abbildung 40 dargestellt.

Sowohl der Globus-Server und die Cluster-Knoten als auch der PT-Grid-Portalserver wurden als virtuelle Maschinen auf einem Server mit 4 Prozessoren (AMD Opteron 3 GHz)

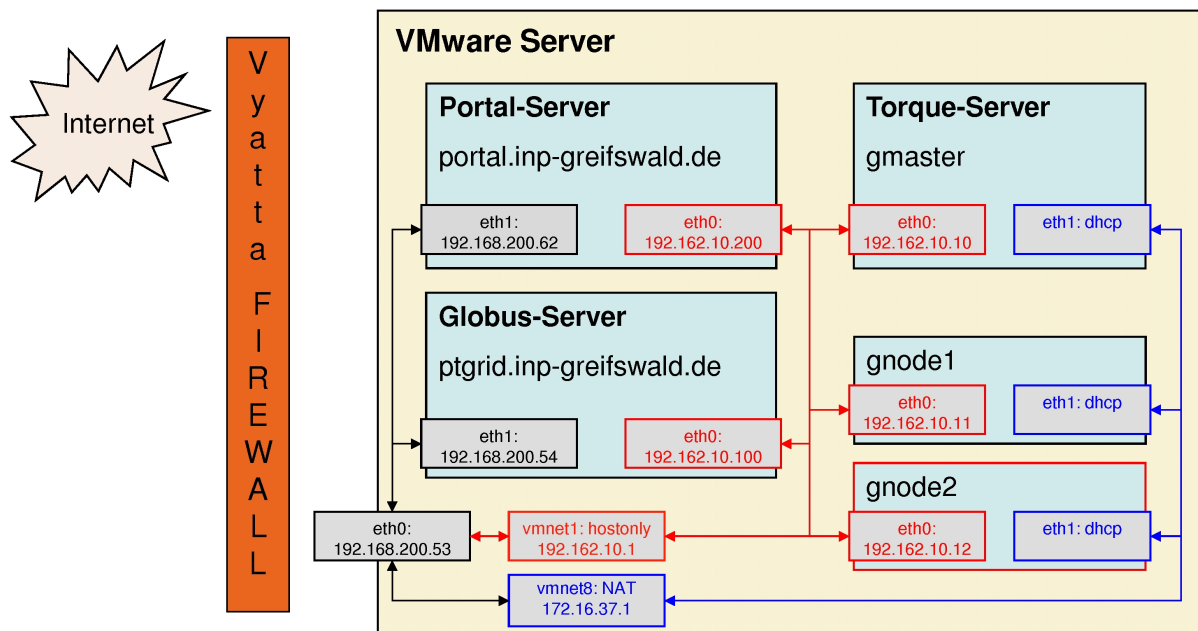


Abbildung 40: Realisierung des PT-Grid-Servers und -Clusters am INP Greifswald

betrieben, der sich zum Projektbeginn in der demilitarisierten Zone des INP Greifswald befand und später in ein separates, INP-unabhängiges Netz verlegt wurde. Die Virtualisierung erfolgte mittels VMware[®]-Server v2.0. Auf den Systemen wurde das Betriebssystem Debian GNU/Linux 5.0 verwendet. Der Rechencluster besteht aus einem Torque-Server (gmaster) auf der Basis von OpenPBS Version 2.3.12 zur Verteilung der Rechenjobs an die lokalen Ressourcen sowie den beiden Rechenknoten gnode1 und gnode2.

Auf dem Globus-Server wurde Globus-Toolkit in der Version 4.0.8 eingesetzt. Auf diese Version hatten sich alle Projektpartner verständigt, um eine optimale Kompatibilität der Middleware-Komponenten sicherzustellen. Die Verbindung zwischen den Rechnern wurde durch ein lokales Netz hergestellt, über das auch die Home-Verzeichnisse der Globus-Nutzer (per NFS) sowie die Lizenz von CFD-ACE+ bereitgestellt wurde. Die Einbindung in das PT-Grid erfolgte, indem die Root-Zertifikate der GridKa-CA²⁶ und der DFN-PKI-CA²⁷ installiert wurden. Ferner wurden Mitglieder des Projektes in das Gridmap-File eingetragen. Das Zusammenwirken mit der NAT-Firewall²⁸ Vyatta erforderte entsprechend koordinierte Einstellungen in der Firewall sowie in den Konfigurationsdateien des Globus-Servers, da die Firewall eine Adressenübersetzung vom Internet (WAN²⁹) zum internen (lokalen) Netz (LAN³⁰) vornimmt.

²⁶http://grid.fzk.de/cgi-bin/welcome_ca.pl

²⁷<https://www.pki.dfn.de/root/gridroot/>

²⁸NAT: network address translation; Netzwerkadressenübersetzung

²⁹WAN: Wide Area Network; überregionales Netz

³⁰LAN: Local Area Network; lokales Netz

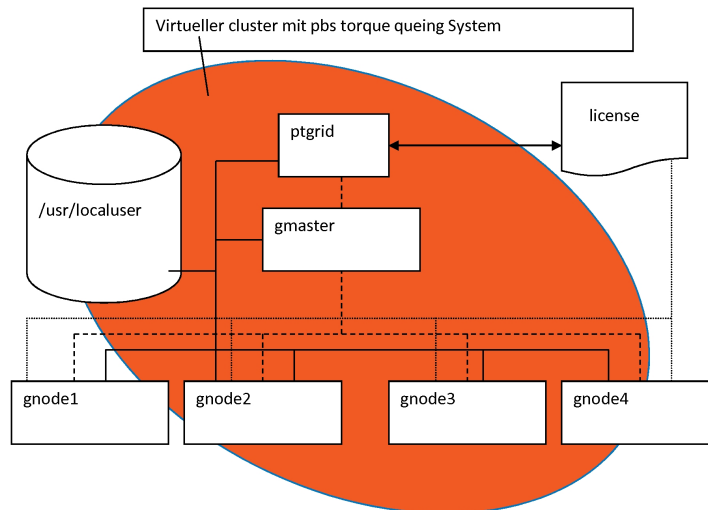


Abbildung 41: Referenzinstallation bei der ESI GmbH [P26]

Die administrativen Schritte wurden ausführlich dokumentiert und den Projektpartnern in einer Referenzanleitung zur Verfügung gestellt. Diese am INP Greifswald erstellte Dokumentation [P10] wurde in das PT-Grid-Wiki (<http://forge.it.irf.uni-dortmund.de/trac/ptgrid/wiki>) eingepflegt. Zudem wurden vom INP Greifswald VMware-Templates bereitgestellt, die eine vollständige Installation des Referenzsystems einschließlich Globus-Server, Torque-Headnode und Rechenknoten, enthielten. Die Templates konnten unmittelbar in eine bestehende VMware-Infrastruktur eingebunden und mit wenigen Anpassungen in Betrieb genommen werden. Die Verteilung der Globus-Server-Templates an die Projektpartner fand über den FTP-Server des INP Greifswald statt. Die Installation der Templates an den Instituten anderer Projektpartner wurde durch das INP Greifswald unterstützt.

Für den PT-Grid-Portalserver (<http://portal.inp-greifswald.de>) wurde ein Robot-Zertifikat der PT-Grid-VO eingerichtet. Als Portalsoftware kam Liferay 5.2.3 in Kombination mit dem quelltextoffenen (open source) Webserver Tomcat 5.5 zum Einsatz. Als quelltextoffenes Datenbanksystem für die Portalsoftware wurde MySQL 5.0.51 installiert. Weitere Spezifika des Portal-Servers werden im Rahmen der Darstellungen zum Arbeitspaket AP5-TP2 gegeben.

Bei der ESI GmbH wurde 2010 mit der Installation des Lizenzservers `ptgrid.esigmbh.de` begonnen. Die von der Technischen Universität Dortmund vorgeschlagene Referenzinstallation (siehe Abbildung 4) wurde im Hause ESI mit sechs virtuellen Maschinen umgesetzt. Sie ist in Abbildung 41 dargestellt [P26].

Dazu wurde eine Workstation angeschafft, die mit einer Vierprozessoreinheit (Intel Xeon 2.4 GHz) und 12 GB Arbeitsspeicher ausgestattet war. Auf diesem Computer wurde

ein virtueller Rechen-Cluster bestehend aus vier virtuellen Knoten mit je zwei Prozessoren und je 3 GB Arbeitsspeicher eingerichtet. Nachdem vergeblich versucht wurde, das üblicherweise im Hause ESI verwendete CentOS Linux System zu verwenden, wurde auf Debian ausgewichen. Auf den Rechenknoten wurde die Software CFD-ACE+ der ESI GmbH installiert. Zusätzlich wurden zwei weitere virtuelle Knoten angelegt, auf denen zum einen Torque-Server, Torque-Scheduler und Ganglia und zum anderen die Middleware Globus Toolkit liefen. Nach Fertigstellung des virtuellen Clusters erfolgten verschiedene, aufeinander aufbauende Tests von CFD-ACE+ im Alleinbetrieb, Torque/PBS und Globus Toolkit, die erfolgreich abgeschlossen wurden. Dabei zeigte sich auch, das CFD-ACE+ in Verbindung mit der Referenzinstallation parallel Rechenjobs auf mehreren Knoten ausführen kann, womit ein wesentlicher Bestandteil einer Grid-Fähigkeit des Softwaresystems CFD-ACE+ nachgewiesen wurde.

Die ESI GmbH hatte sich als Grid-RA beim DFN-Verein eintragen lassen und Nutzerzertifikate für Mitarbeiter der ESI GmbH erstellt. Externe Nutzerzertifikate des INP Greifswald und der Technische Universität Dortmund wurden ebenfalls der ESI-Referenz-Installation hinzugefügt. Damit wurde ermöglicht, die Globus-Toolkit-Anbindung sowohl innerhalb des Referenzservers der ESI GmbH als auch extern zu testen. Nachdem anfänglich die ESI-Referenz-Installation über den bei der ESI GmbH installierten Lizenzserver betrieben wurde, erfolgte anschließend die Bereitstellung des Lizenzservers in der PT-Grid-Infrastruktur für die Projektpartner, wie Abbildung 42 illustriert. Hier konnte die Nutzerverwaltung (Accounting) erfolgen, ein Abrechnungsverfahren (Billing) installiert werden und ein Zugriff-Sicherheitskonzept erstellt werden. Dazu wurden der Lizenzserver und die Referenzinstallation in die demilitarisierte Zone, also außerhalb des ESI-Netzwerkes, gestellt. Somit stand der Lizenzserver der ESI GmbH für den Lizenzerhalt im D-Grid zur Verfügung.

Die Konzeption des Lizenzservers im Rahmen des Teilprojektes 2 war wie folgt [P26]. Ein Server (zentrales System) liefert gültige Lizenzen. Einmal-Passwörter (TAN³¹) ermöglichen die Freigabe eines Jobs für einen angemeldeten Nutzer. Sie werden auf dem zentralen System verwaltet, das die Freigabe von CFD-ACE+-Programmen über FlexNet[®] ermöglicht. Die originalen Lizenzroutinen von CFD-ACE+ bleiben dabei gemäß einer Auflage der ESI Group unverändert. Andere Software des PT-Grids, wie z. B. der Randschichtsimulator im Teilprojekt 4, kann ebenfalls freigeschaltet werden.

Die Einbindung der Servers ptgrid.esigmbh.de als Rechenressource im D-Grid wurde bei ESI GmbH diskutiert und testweise umgesetzt. Somit konnten Projektpartner über das PT-Grid-Portal diese Rechenressource nutzen, wie in verschiedenen Tests mit dem INP

³¹TAN: Transaction authentication number; Transaktionsnummer

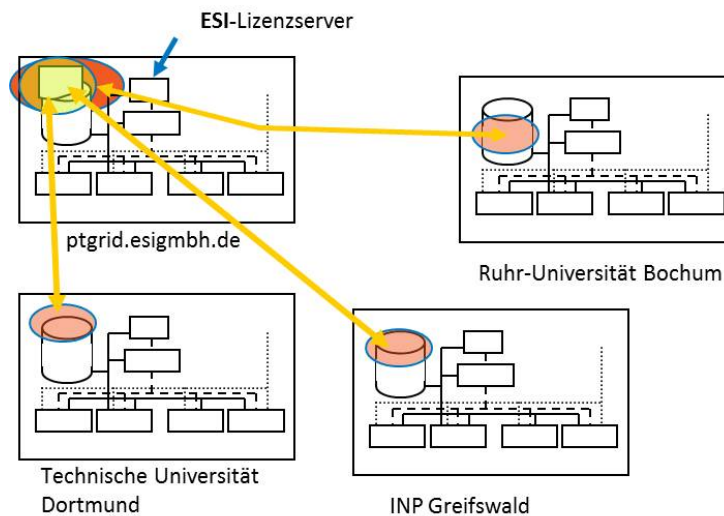


Abbildung 42: PT-Grid-Lizenzserver

Greifswald bestätigt wurde. Es wurde von ESI GmbH jedoch entschieden, die Nutzung des PT-Grid-Servers der ESI GmbH als Rechenressource aufgrund des damit verbundenen, hohen Aufwands und dem niedrigen Nutzen nicht weiter zu verfolgen.

AP4-TP2: Produktion: Lizenzmodell und Abrechnungssoftware

Die exemplarische Lösungserarbeitung zum Lizenzmodell und zur Abrechnungssoftware erfolgte federführend durch die ESI GmbH. Der Begriff Lizenzmodell beinhaltet dabei die Aspekte Lizenzmanagement, Lizenzvertrag (Lizenzform, Vertragspartner, Nutzungsrechte usw.) sowie Berechnungsmodell zu Lizenzgebühren.

Bezüglich des Lizenzmanagements sind in der Vergangenheit die Optionen BEinGRID, GenLM und SmartLM mit öffentlichen Mitteln gefördert worden. Um Aufwand und Kosten für das PT-Grid-Projekt gering zu halten, wurde zunächst der Ansatz verfolgt, eines dieser Lizenzmodelle zu integrieren. Die Evaluierung ihrer Verwendbarkeit zeigte jedoch, dass keines der Modelle übernommen werden konnte, wie im PT-Grid-internen Bericht [P26] dargelegt wird. Sowohl das vom Fraunhofer-Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik in Kaiserslautern stammende System GenLM³² als auch das vom Konsortium SmartLM³³ erarbeitete Lizenzierungstool (und weitere Produkte wie elasticLM) hätten Änderungen bzw. Anpassungen der bestehenden Lizenzroutinen bei ESI erfordert, was die ESI Group als Lizenzgeber für CFD-ACE+ nicht zulässt. Das Lizenzmanagementsystem BEinGRID³⁴, das von einem Konsortium aus 98 verschiedenen industriellen und

³²<http://www.epg.fraunhofer.de/solutions/software/genlm.jsp>

³³<http://www.smartlm.eu/>

³⁴BEinGRID: Business Experiments in GRID; <http://www.it-tude.com/projects/beingrid>

akademischen Partnern unter Beteiligung des Fraunhofer-Instituts für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI in Sankt Augustin und T-Systems entwickelt wurde, wurde ursprünglich favorisiert. Da trotz umfangreicher Bemühungen das System BEinGRID nicht erfolgreich installiert werden konnte, die beiliegende Dokumentation nicht ausreichend war und die in BEinGRID zugrundeliegenden Systemroutinen überholt waren, wurde von der ESI GmbH entschieden, eine eigene Software unter dem Namen ESI-Control zu entwickeln.

Bei der Neuentwicklung wurden an das Lizenzmodell und den Lizenzserver unter anderem die Anforderungen gestellt [P26], dass auf dem Lizenzserver für jeden Kunden TAN-Listen erstellt werden, ein Nutzer ein Benutzerkonto (Account) und ein Passwort (PIN) und damit Zugriff auf den Lizenzserver erhält und der Lizenzserver eine Prüfung der Gültigkeit von PIN und TAN bei der Absendung des Rechenjobs durchführt. Dazu müssen PIN und TAN im Portal einzugeben sein. Die Lizenzmanagement-Software erkennt die verwendeten Module von CFD-ACE+ und gibt Informationen über die geleistete Rechenzeit je Benutzerkonto aus. Zudem sollte die Lizenzierungssoftware auch für andere Produkte verwendbar sein.

Die Anforderungen wurden auf die Umsetzbarkeit in einem Grid-fähigen System geprüft, erfolgreich getestet und in der PT-Grid-Infrastruktur umgesetzt. Der resultierende Arbeitsablauf des ESI-Control-Lizenzsystems ist in Abbildung 43 dargestellt. Der Anwender im PT-Grid gibt bei der Job-Anfrage im Portal seinen zertifizierten Nutzernamen (z. B. DFN-Zertifikat), einen Projektnamen, um auch mehrere Projekte bearbeiten zu können, und die Transaktionsnummer (TAN) ein, die als Einmal- oder Mehrfachpasswort genutzt werden kann. Die Lizenzierungssoftware prüft diese Nummer und entwertet sie bei der Job-Freigabe. Die Freigabe eines Jobs erfolgt über eine Portnummer, die im Netz jedoch versteckt (durch die Firewall geblockt) wird, um einen nichtautorisierten Zugriff zu unterbinden. Stattdessen wird ein zweiter Port freigegeben, der von einem Kunden einsehbar ist. Über diesen Port ist der Lizenzserver ansprechbar, der zusätzlich die TAN und den Nutzernamen (PIN-TAN-Konzept) abfragt. Wurden diese Informationen korrekt übermittelt, gibt die Lizenzsoftware den Zugriff auf den Lizenzport frei.

Die Einrichtung dieses Systems im Grid erforderte kundenseitig ein Front-End-System und auf dem Server die entsprechende Software zum Freigeben der Lizenz. Auf dem Rechenknoten, den der Kunde nutzt, (ESI-Control-Client-System) schaut ein transparenter SOCKS Proxy (tsocks) nach dem Lizenzserversystem, wozu eine Bibliotheks- und eine Konfigurationsdatei bei ihm einzuspielen sind. Zusätzlich sind Umgebungsvariablen zu definieren, um den ESI-Control-Lizenzserver ansteuern zu können. Dieses Serversystem bei der ESI GmbH enthält ein Programm, um TAN-Listen zu generieren. Hier wird nach

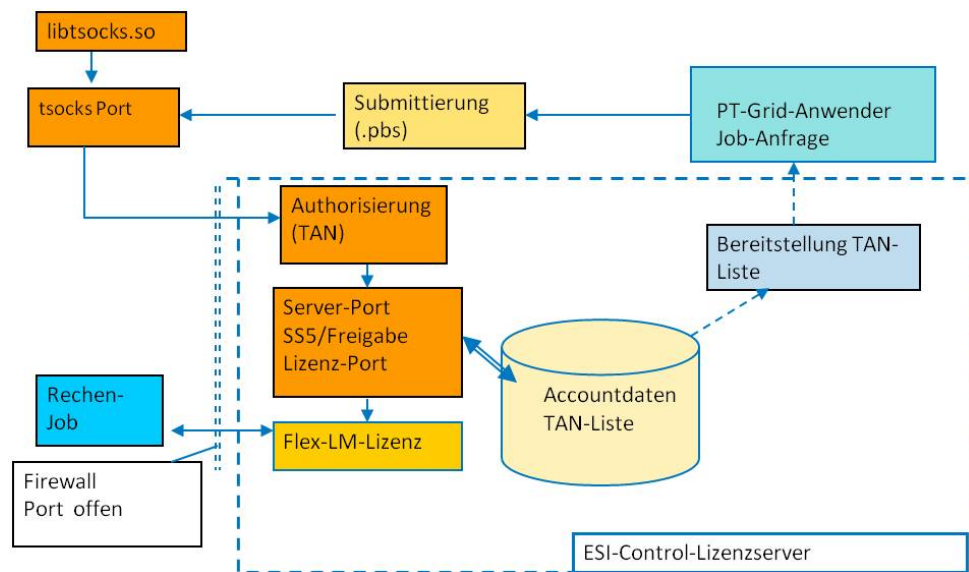


Abbildung 43: Workflow des ESI-Control-Lizenzsystems

einem Zufallszahlengenerator eine siebenstellige Ziffernkombination erstellt. Die Authentifizierungssoftware prüft den ankommenden Nutzer und die überlieferten Informationen, wie z. B. TAN. Ein Standard-SS5-Proxy mit einer externen Autorisierungssoftware findet hierbei Verwendung. Die SS5-Software ist frei verfügbar und unterliegt keinen Lizenzbedingungen. Diese Software wurde gepflegt und aktualisiert. Damit war die Realisierung des kompletten Lizenzserversystems auf wenige vollständig selbst und neu entwickelte Routinen beschränkt, und eine Modifizierung und Anpassung bestehender unbekannter Routinen wurde überflüssig. Die externe Routine prüft die TAN und gibt bei Gültigkeit den Zugriff frei (Rechenport). Die Randbedingung, dass die Lizenzroutine FlexNet[®] der CFD-ACE+-Suite unverändert bleiben musste, konnte so erfüllt werden. Eine Freigabe von Systemen, die nicht auf FlexNet[®] basieren, ist ebenfalls möglich.

Der Lizenzabruf wird in mehreren Protokolldateien (log files) auf der Serverinstallation dokumentiert. Die SS5-Proxy-Software schreibt eine Datei, in der Fehler und erfolgreiche Zugriffe bezüglich Autorisierung und Authentifizierung vermerkt werden. Die externe Routine schreibt eine eigene Protokolldatei, bei der die TAN vermerkt wird. Bei der FlexNet-Software werden in einer Datei Nutzernamen, IP-Adresse und abgerufene Lizenz protokolliert. Eine zusätzliche Datei (REPORTLOG-File) mit umfangreicher Auswertesoftware ermöglicht exakte zeitgenaue und modulabhängige Auswertungen zur Abrechnung. Der Ablauf dieses Berichtswesens wird in Abbildung 44 veranschaulicht.

Herkömmliche Lizenzverträge für kommerzielle Softwareprodukte basieren auf einem Festpreis für einen Zeitraum (typischerweise ein Jahr), einer Anzahl von Modulen und einer Anzahl an ausführbaren Prozessen aus. Die Lizenzierung der Produkte von ESI

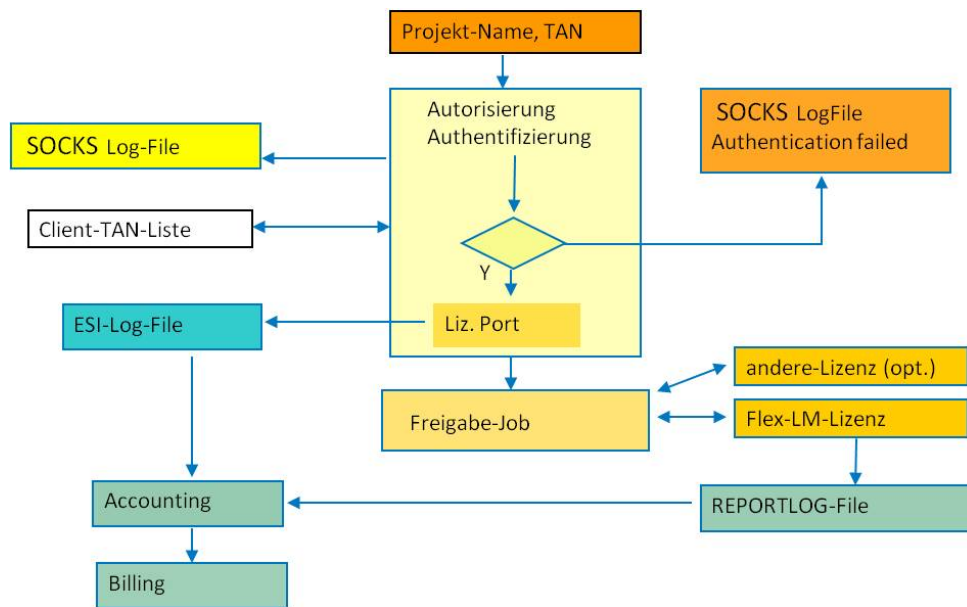


Abbildung 44: Flowchart des ESI-Control-Lizenzsystems

GmbH und anderer kommerzieller Softwareanbieter erfolgt mit der kommerziellen Software FlexNet[®] der Firma Flexera Software. Hierbei überwacht FlexNet die Nutzung der lizenzierten Software und beschränkt die Anzahl der ausführbaren Prozesse auf die Anzahl der tatsächlich freigegebenen bzw. lizenzierten Prozesse. Mit der Erweiterung „FlexNet Manager for Engineering Applications“ (FNMEA) von Flexera Software ist es zusätzlich möglich, abrechnungssichere Protokolldateien über die Nutzung der lizenzierten Software zu erstellen und auszuwerten.

Für die Nutzung kommerzieller Software im Rahmen einer zweistufigen Geschäftsorganisation, die aus einem plasmatechnischen Berater und einer zentralen Grid-Organisation besteht (Abbildung 8), war ein wesentlich flexiblerer an die Kundenbedürfnisse angepasster Lizenzvertrag umzusetzen. Die Analyse verschiedener Preismodelle, die die Gebühr nach

1. Bereitstellung von Hardware (Grundgebühr für die Einrichtung der Arbeitsumgebung und Leistungsfähigkeit der zur Verfügung gestellten Computer),
2. leistungsabhängigem Aufwand (Erfassung der Computerressourcen, Lizenznutzungszeit und Anzahl der Prozesse) und
3. weiteren Dienstleistungen (Schulung z. B. der Programmanwendung und Aufbau einer Infrastruktur)

bestimmen, führte zu einem allgemeinen Pay-by-Use-Bezahlsystem, das eine Abrechnung der Lizenzkosten nach genutzten CPU-Stunden vorsieht. Es wird auch Kunden der ESI

GmbH im Rahmen des offiziellen Buchungssystems der ESI Group angeboten, die nicht im PT-Grid rechnen möchten. Eine Grundgebühr für Dienstleistungen des plasmatechnischen Beraters sowie Kosten für die Hardware-Nutzung werden dabei separat abgerechnet. Im Folgenden werden die drei Varianten des Pay-by-Use-Systems kurz dargestellt.

Pay-by-Use für Standardkunden (kein Grid-Computing): Für Standardkunden der ESI GmbH, die kein Grid-Computing durchführen, hängt die Lizenzgebühr beim Pay-by-Use-System von einer Grundgebühr, den CPU-Stunden und den Softwaremodulen ab. Die pauschale Grundgebühr ist für die Nutzung eines Pre- und Postprocessing-Pakets je regelmäßigem Anwender zu Beginn der Lizenzierung zu entrichten. Die Anzahl genutzter CPU-Stunden für dieses Paket ist nicht relevant für die Kostenberechnung. Standardmäßig ist die Ausführung von zwei Prozessen gestattet. Anwender, die nur selten auf das Pre- und Postprocessor-Paket zugreifen, können stundenweise abgerechnet werden und müssen keine Grundgebühr entrichten.

Die zu entrichtenden Gesamtgebühren sind abhängig von der Anzahl der genutzten CPU-Stunden. Da ein Standardanwender seine Lizenz nicht rund um die Uhr verwendet, ist es nicht sinnvoll, einfach die Jahreslizenzgebühr durch 365 Tage mal 24 Stunden zu teilen, um den Preis einer CPU-Stunde zu ermitteln. Bei einer Teststudie mit einem Referenzkunden der ESI GmbH zeigte sich, dass eine durchschnittliche Auslastung einer Standardjahreslizenz von etwa 30% realistisch ist. Über diesen Faktor können mit weiteren Erfahrungen einfach Anpassungen des Stundenpreises durchgeführt werden. Der Preis je Stunde sollte zudem ausgehend von einem Maximalwert exponentiell auf einen Minimalwert abfallen und für unterschiedliche Softwaremodule, wie z. B. Grundmodule, Chemie-Modul und Monte-Carlo-Strahlungsmodul, unterschiedliche Gebühren erlauben. Der Preis je Stunde als Funktion der CPU-Zeit für verschiedene Module ist in Abbildung 45 veranschaulicht. Wird sehr viel gerechnet, wird zudem der Preis nicht höher, als wenn eine Preisgestaltung gemäß Standardpreisabrechnung (Jahreslizenz) erfolgt wäre.

Pay-by-Use-System plus TAN-Konzept für Kunden des PT-Grids: Da es beim Grid-Computing im PT-Grid im Wesentlichen um sehr viele Rechenläufe (Solver) geht und weniger um Pre- und Postprocessing-Aufgaben (Definition und Auswertung eines Modells) werden die Kosten hauptsächlich durch die Anzahl an CPU-Stunden für den Solver bestimmt. Das Preiskonzept sieht Rabatte vor, wenn der Kunde eines Plasmaberaters für ein bestimmtes, beauftragtes Simulationsmodell Massiv-Parallel- bzw. Massiv-Parameter-Berechnungen durchführen möchten. Diese Rabatte kann der Plasmaberater, der die technischen Details einer Simulation kennt und den Bedarf an CPU-Stunden für eine Berechnung abschätzen kann, mit dem Softwareanbieter verhandeln. Voraussetzung für die Rabattgewährung ist, dass der Kunde dem Plasmaberater ein bestimmtes Simulations-

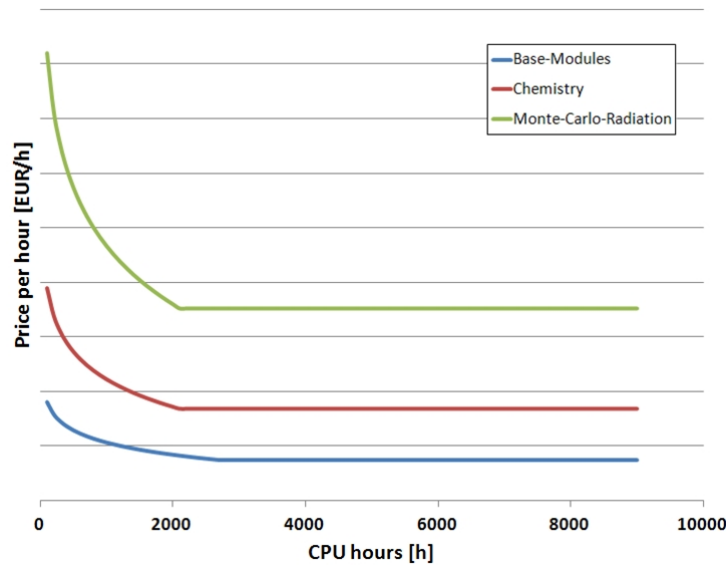


Abbildung 45: Preis je Stunde als Funktion der CPU-Zeit verschiedener Module

modell zur Vorbereitung in Auftrag gibt. Für dieses eine Modell kann er dann Rabatte so verhandeln, dass die Lizenzgebühren für ihn wirtschaftlich bleiben. Zusammen mit dem TAN-Konzept könnte z. B. so eine Studie mit 50 zu berechnenden Parametern zu einem Festpreis angeboten werden. Das ist möglich, weil die insgesamt notwendige Anzahl an CPU-Stunden vorher bekannt ist. Die Vergabe von Transaktionsnummern gewährleistet, dass die Anzahl ausführbarer Berechnungen beschränkt wird.

TAN-Konzept für die Verwendung von nicht-FlexNet-lizenzierte Software: Im PT-Grid wird neben FlexNet-lizenzierte Software auch Software angeboten, für die es bisher keine Lizenzmanagementsystem gab. Hier kann mit dem TAN-Konzept eine Kontrolle der Anzahl ausführbarer Prozesse erfolgen. Mit ESI-Control wird für jeden ausführbaren Prozess eine TAN abgefragt und von einer dem Kunden zur Verfügung stehenden Liste abgestrichen. Der Anwender bezahlt hierbei pro verbrauchter TAN. Die Berechnung der Lizenzgebühren ergibt sich aus der Grundgebühr nach Gültigkeitsdauer (50% einer Standard-Lizenzgebühr), der leistungsabhängigen Gebühr nach Rechenressourcenbedarf (Größe und Dauer des Plattenspeicherbedarfs) und dem Preis nach Anzahl der Prozesse, die der Kunde durch Erwerb einer Liste mit Transaktionsnummern zu einem vereinbarten Preis erhält. Ab einer gewissen Anzahl an Prozessen wird hierbei der Basispreis (Jahreslizenzpreis) erreicht, so dass es sinnvoll ist, weitere TAN kostenfrei abzugeben.

Da es für den Softwareanbieter wirtschaftlich deutlich sicherer ist, mit langfristigen Kundenbindungen zu arbeiten, und zudem ein großes wirtschaftliches Risiko bedeutet, ein neues Abrechnungskonzept einzuführen, welches eine stundenweise Abrechnung vorsieht, werden stundenweise Abrechnungskonzepte ohne Vertragsbindung im Durchschnitt immer

Pay by Use - Billing			PT-GRID			
Period of License usage: Supplied licenses			Customer: PT-Grid Customer			
From: 01.05.2012	Serial: 20	Bus.-Ref.: 1.234.567				
To: 31.07.2012	Parallel: 256					
Days: 31						
Months: 3						
Pre-/Postprocessor Pack						
<small>This pack includes pre- and post-processor licenses for all ACE, CFD-GEOM, CFD-View and CFD-View. It is available to purchase as license per processor. The license will allow the execution of pre-processor in one workstation. Acquisition will be purchased for the CPU time. To be paid at the invoice. Processor license will require and license serials for Pre- and Post-processor software.</small>						
fee (incl. Support) per power user, lump sum	Annual license [EUR*]	Monthly license* [EUR/month]				
	9999,00	833,25				
Solver usage fees						
<small>Billing is based on CPU hours. Price for CPU hour depends on amount of requested CPU time.</small>						
Ref.	Feature	CPU time	CPU time	Per h.	Discount	To be paid
ACE-S-01	Basic Module	43600	1800	0,00	0	2,298,00
ACE-S-02	User-Scalar Module	43600	0	0,00	0	-
ACE-S-03	Monte-Carlo Radiation Module	43600	0	0,00	0	-
ACE-S-04	CFD-ACE_SRAD	43600	900	0,00	0	2,298,00
ACE-S-05	Combustion Module	43600	0	0,00	0	-
ACE-S-06	Electric Module	43600	1800	0,00	0	2,298,00
ACE-S-07	CFD-ACE_FEMSTRESS	43600	0	0,00	0	-
ACE-S-08	Miscellaneous Module	43600	1800	0,00	0	2,298,00
ACE-S-09	CFD-ACE_CHEMISTRY	43600	1800	0,00	0	2,298,00
ACE-S-10	Miscellaneous Module	43600	0	0,00	0	-
ACE-S-11	Spray Module	43600	0	0,00	0	-
ACE-S-12	Micro-Particle	43600	0	0,00	0	-
ACE-S-13	Free Surface Flow Module (VOF)	43600	0	0,00	0	-
ACE-S-14	Two-Fluid Module	43600	0	0,00	0	-
ACE-S-15	Plasma Module	43600	1800	0,00	0	2,298,00
ACE-S-16	Chamber Translator	43600	0	0,00	0	-
ACE-S-17	CFD-Tape	43600	0	0,00	0	-
ACE-S-18	CFD-PARALLEL	559194	0	0,00	0	-
ACE-E-01	CFD-GEOM	43600	0	0,00	0	-
ACE-E-02	CFD-View	43600	0	0,00	0	-
ACE-E-03	CFD-ViewCrt	43600	0	0,00	0	-
				Subtotal:		4,596,00
				Discount:		-
				Total:		4,596,00

Abbildung 46: Beispiel eines Abrechnungsblatts

teurer für einen Kunden sein müssen.

Accounting: Grundlage für eine Abrechnung nach dem Pay-By-Use-System ist die abrechnungssichere Erfassung der verbrauchten CPU-Stunden. Auf dem lizenzgebenden Server bei der ESI-GmbH wird unter Einsatz von FlexNet[®] eine sogenanntes (binäres) REPORTLOG-File erzeugt (siehe Abbildung 44). Diese Datei ist nicht von Hand editierbar oder manipulierbar und kann mit FNMEA umfangreich ausgewertet werden. Es bietet damit eine abrechnungssichere Möglichkeit, nach tatsächlich genutzter Rechenzeit, den verwendeten Softwaremodulen und nach Nutzern abzurechnen. Je nach Vereinbarung kann auf Basis dieser Daten eine verbrauchsabhängige Rechnungserstellung monats- oder quartalsweise erfolgen.

Billing: Die Abrechnung der Lizenzkosten erfolgt nach Abrechnungsblättern basierend auf den Auswertungen des REPORTLOG-Files. Ein solches Blatt ist nach Modulen, CPU-Zeit, einem vereinbarten Rabatt (discount) und dem zu zahlenden Preis aufgebaut und ist in Abbildung 46 dargestellt.

Ein Vergleich der entstehenden Lizenzgebühren beim Grid-Computing oder beim Pay-By-Use-System mit den Standardlizenzgebühren (Jahreslizenz) ist kaum möglich. Während die Jahreslizenz festgelegt ist auf Module und Anzahl der Prozesse, ermöglicht das „Pay-by-Use“-Verfahren eine äußerst flexible Benutzung der Software-Komponente und der Computer-Ressourcen. Je nach Projektanforderung können benötigte, ggf. teure Module

verwendet und beliebig viele Prozessoren eingesetzt werden. Es entfällt daher eine oft teure Bereithaltung umfangreicher Software, und Kosten treten erst auf, wenn ein wirklicher Bedarf anfällt, die Software zu nutzen.

AP5-TP2: Produktion

Grundlage der Anwendung des Online-Beratungswerkzeugs im PT-Grid ist die Steuerung innerhalb des PT-Grid-Portals. Für das im Rahmen des Teilprojekts 2 behandelte Modell des induktiv gekoppelten Plasmabrenners (Abbildung 34) waren somit Skripte zu erstellen, die es erlauben, das Modell gemäß dem in Abbildung 3 dargestellten allgemeinen Arbeitsablauf automatisiert in einem Batchbetrieb aufzubauen, zu berechnen und auszuwerten. Hierfür wurden Python- und Shell-Skripte miteinander kombiniert. Batchfähige Skripte zum Definieren der Randbedingungen und Modelleigenschaften (Preprocessing) und zum Starten der Lösung des Modells (Solver) wurden durch das INP Greifswald erstellt. Die batchfähigen Skripte für die Aufbereitung der Ergebnisse (Postprocessing) wurden das das INP Greifswald mit Unterstützung durch die ESI GmbH entwickelt. Beim Postprocessing wurden die Ergebnisdateien in die ESI-Software CFD-VIEW eingelesen, und exemplarische Ergebnisse wurden in Form von Bildern, Diagrammen und Datentabellen ausgegeben. Die verschiedenen Skripte standen den Teilprojektpartnern zur Verfügung und wurden an ihre lokalen Rechnergegebenheiten angepasst. Weiterhin hatte die ESI GmbH Skripte entwickelt, die es ermöglichten, Modelldateien für eine Parameterstudie vorzubereiten. Die Idee war hierbei, die vom Anwender gewünschte Anzahl von Modellen verschiedener Parameterwerte lokal auf einem zentral arbeitenden Rechner über das Skript zu erstellen und anschließend diese Modelle für ihre Lösung in eine Grid-Umgebung zu übergeben.

Da die Software CFD-ACE+ im Rahmen der Projektlaufzeit ein Upgrade erfuhr und die etablierten Skripte mit dieser Version nicht mehr lauffähig waren, wurden sie durch das INP Greifswald mit Unterstützung der ESI GmbH erfolgreich umgearbeitet.

Die PT-Grid-spezifische Endnutzeroberfläche (Portal) sollte auf der Grundlage der im Teilprojekt 3 (Abschnitt 6.4) realisierten webbasierten Steuerung vom Projektpartner GNS Systems GmbH erstellt werden. Da die seitens GNS Systems GmbH entwickelte Portalumgebung jedoch nur den Zielen des Teilprojektes 3 entsprachen und sich der Transfer des Know-hows zu den Projektpartnern schwierig gestaltete, wurde die Portalerstellung in Eigenregie am INP Greifswald durchgeführt. Dazu wurde ergänzend zu den geplanten Aktivitäten der notwendige Portalentwicklungsarbeitsplatz zur Mitte der Projektlaufzeit am INP Greifswald eingerichtet, der allen Projektpartnern während der Projektlaufzeit kostenlos zur Verfügung stand.

Der Portalentwicklungsarbeitsplatz liegt in Form einer virtuellen Maschine

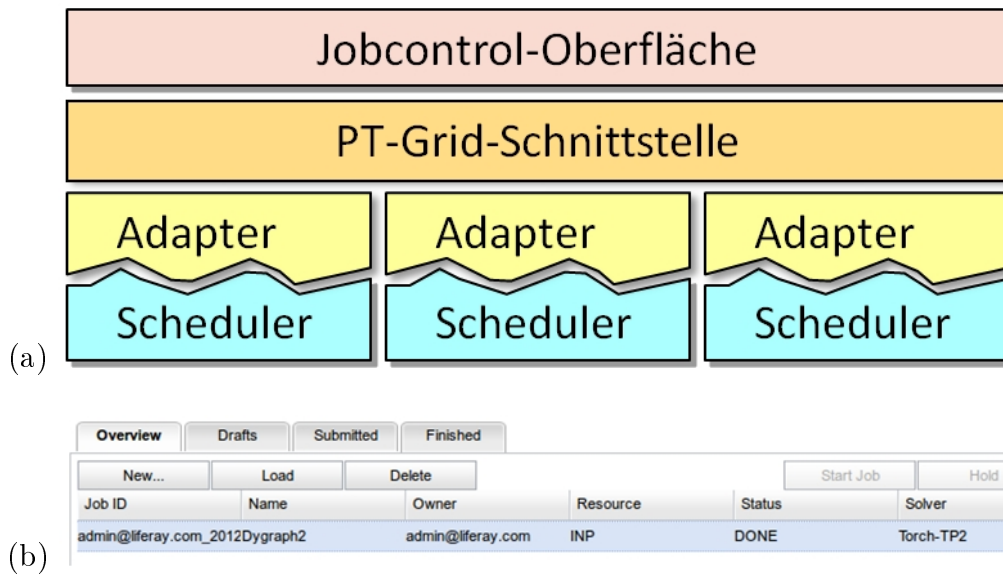


Abbildung 47: Infrastruktur des PT-Grid-Portals (a) und PT-Grid-Portlet zur Jobsteuerung (b)

(VMware[®]) vor mit Debian Linux als Betriebssystem. Als Programmiersprache wird Java verwendet. Die integrierte Entwicklungsumgebung Eclipse 3.6 for Java EE Developers beinhaltet unter anderem die Module Subversive Plugin zur SVN-Unterstützung³⁵, Google Web Toolkit (GWT) als webbasierte Oberfläche und Web Tools Platform (WTP). Zur effizienten Umsetzung des Portals wurde zudem ein Portal-Server in den Portalentwicklungsarbeitsplatz integriert, der dieselbe Spezifikation hatte wie der unter <http://portal.inp-greifswald.de> erreichbare Server des PT-Grid-Portals. Weiterhin wurde ein Beispiel-Portletprojekt für Eclipse erstellt, das die Integration der verschiedenen Frameworks unter Eclipse demonstriert und die Verwendung der wichtigsten Techniken zur Erstellung von Portlets zeigt. Dieses Portletprojekt diente als Ausgangsbasis für weitere Portletentwicklungen. Eine detaillierte Installationsbeschreibung der notwendigen Schritte zur Installation und Konfiguration des Entwicklungsarbeitsplatzes und des Beispiel-Portletprojekts wurde durch das INP Greifswald erstellt und in die PT-Grid-Dokumentation unter <http://forge.it.irf.uni-dortmund.de/trac/ptgrid/wiki> eingepflegt.

Als Software für das Portal kommt Liferay 5.2.3 in Kombination mit dem quelloffenen Webserver Tomcat 5.5 zum Einsatz. Als Datenbanksystem für die Portalsoftware wurde MySQL installiert. Der Portalserver beinhaltet eine umfangreiche Nutzerwaltung, bietet viele Standard-Portlets³⁶, wie Wiki und Terminkalender, und ermöglicht eine LDAP-Anbindung.

³⁵SVN: Subversion; Subversion ist ein Verwaltungssystem mit zentralem Projektarchiv.

³⁶Portlets sind Softwarekomponenten der Benutzeroberfläche, die im Webportal verwaltet und dargestellt werden.

Das Portal besitzt eine modulare Infrastruktur, die in Abbildung 47a gezeigt wird. Die oberste Schicht ist die Benutzeroberfläche für das Management der Rechenjobs. Die Steuerung der Rechenjobs erfolgt über die in Abbildung 47b dargestellte Bedienoberfläche (GWT-Modul). Die Jobkontrollfunktionen haben ein einheitliches Erscheinungsbild in allen Portlets der Teilprojekte des PT-Grids. Demgegenüber sind die Dateneingabe inklusive Preprocessing und die Datenausgabe einschließlich Postprocessing abhängig vom jeweiligen Modell, vom Programm und vom Anwender. Die PT-Grid-Schnittstelle, die durch Modifizierung der Konfigurationsdateien anzupassen ist, dient zur Ansteuerung des Schedulers. Hierbei handelt es sich um ein HTTP-Servlet³⁷, das Anfragen des Clients über HTTP-Requests versendet und Antworten des Servers im XML-Format³⁸ erhält. Die Adapter repräsentieren die Schnittstelle zwischen dem Scheduler-Client und der PT-Grid-Schnittstelle. Hierbei handelt es sich um Shell-Skripte, die nur bei Verwendung eines neuen Schedulers zu bearbeiten sind. Die unterste Ebene ist der Client zur Verwendung des PT-Grid-Schedulers. In diesem Java-Programm, das durch Kompilierung eingebunden wird, sind die Netzwerk- und Globus-Konfigurationen zu adaptieren.

Das PT-Grid-Portal verschafft den Zugang zu den Demonstratoren der Projektpartner. Der Nutzer verwendet zum Zugriff auf das Portal einen Webbrowser, wie Firefox, Internet Explorer und Opera, an den keine zusätzlichen Anforderungen, z. B. Plugins (Zusatzmodule), gestellt werden. Aufgrund der Internationalität der Plasmatechnologie wurde das Demonstrator-Portal am INP Greifswald in englischer Sprache umgesetzt. Das Hilfe-Wiki ist unter <http://portal.inp-greifswald.de/web/pt-grid-infrastructure/welcome> erreichbar.

Vier Servicekategorien wurden vorgesehen (siehe Abbildung 7):

- Für Nutzer mit Grid-Erfahrung und Beherrschung der Simulationsprogramme wurde der direkte Grid-Zugang über das Terminal-Portlet „direct D-grid access via the terminal portlet of GSI-SSHTerm“ realisiert.
- Für Nutzer, die keine Grid-Erfahrung, aber Programmierer eigener Programme sind bzw. gute Kenntnisse über die eingesetzten Simulationsprogramme besitzen, wurde unter „guided access to D-Grid and commercial resources“ ein automatisierter Zugang eingerichtet. Er sollte als Einzelaufgaben das Packen, Hochladen, Entpacken von Software und Daten, das Starten eines Jobs, das anschließende Packen, Herunterladen und Entpacken von Software und Simulationsergebnis sowie das abschließende Löschen von Software und Daten auf dem Host-Rechner übernehmen.
- Für Nutzer ohne Grid-Erfahrung und Kenntnisse der zur Simulation einzusetzenden Software, also die eigentliche Zielgruppe des Online-Beratungswerkzeugs, wurden

³⁷HTTP: Hypertext Transfer Protocol

³⁸XML: Extensible Markup Language; erweiterbare Auszeichnungssprache

Demonstratoren der vier Teilprojekte des PT-Grids unter „PT-Grid demonstrators of the PT-Grid’s sub-projects“ eingebunden.

- Für eine erweiterte Nutzung des Portal durch wissenschaftliche Anwender im Rahmen eines wissenschaftlichen Dienstleistungsnetzes wurde die Option „service examples of the intended “Science Service Network” (SSN)“ vorgesehen.

Wie auch in der PT-Grid-Infrastruktur (Abbildung 5) dargestellt, kann über das Portal die Nutzerverwaltung erfolgen und - vorbehaltlich einer Nutzungserlaubnis - auf die (nicht-kommerziellen) Ressourcen des D-Grids, die kommerziellen Ressourcen, beispielsweise von GWDG GmbH oder T-Systems SfR GmbH, und interne Ressourcen der Verwender des PT-Grids zugegriffen werden. Damit wurde exemplarisch das Online-Beratungswerkzeug für die Plasmatechnologie realisiert. Diese wissenschaftliche Serviceplattform für kommerzielle und nichtkommerzielle Anwendungen in Industrie und Wissenschaft kann auch auf andere Fachbereiche übertragen werden. Details zu dem im Rahmen des Teilprojektes 2 etablierten Demonstrator zur magnetohydrodynamischen Simulation von Plasmabrenneranwendungen werden im folgenden Abschnitt dargestellt.

AP6-TP2: Pilotanwendung

Zur Realisierung des Online-Beratungswerkzeuges waren zahlreiche Rechenläufe notwendig. Diese Pilotanwendungen betrafen unter anderem Tests hinsichtlich der Festlegung der Parameterbereiche des Plasmamodells, der Skripte für das Pre- und Postprocessing, der Installation der Middleware, der Adapter für Scheduling und Datenmanagement, der Firewall-Einstellungen auf den Servern beim INP Greifswald und der ESI GmbH, der Lizenzbereitstellung für die kommerzielle Software CFD-ACE+ der ESI GmbH über das Portal sowie der Funktionsfähigkeit der entwickelten Portlets.

Der Arbeitsablauf Grid-basierter Modellrechnungen im Teilprojekt 2 ist in Abbildung 48 veranschaulicht. Der Plasmaberater (hier: INP Greifswald) hatte in einem Vorlaufprojekt für einen Kunden gegen Bezahlung das Modell für den in Abbildung 34 dargestellten Plasmabrenner erstellt. Zur Berechnung wurde dabei die beim INP Greifswald installierte und lizenzierte kommerzielle Software CFD-ACE+ der ESI GmbH verwendet. Für die Nachnutzung durch einen Kunden wurde das Modell im Rahmen des Projektes durch den Plasmaberater in das Portal des PT-Grids gestellt. Etwaige Wartungsarbeiten am Modell können hier durch den Plasmaberater durchgeführt werden. Der Nutzer gibt die notwendigen Parameter für seine Studien über das Portal ein und erhält über das Portal die Ergebnisse. Die kostenpflichtige Lizenz für CFD-ACE+ wird dabei vom Lizenzserver der ESI GmbH gegen eine entsprechende Gebühr bereitgestellt. Weitere Kosten können

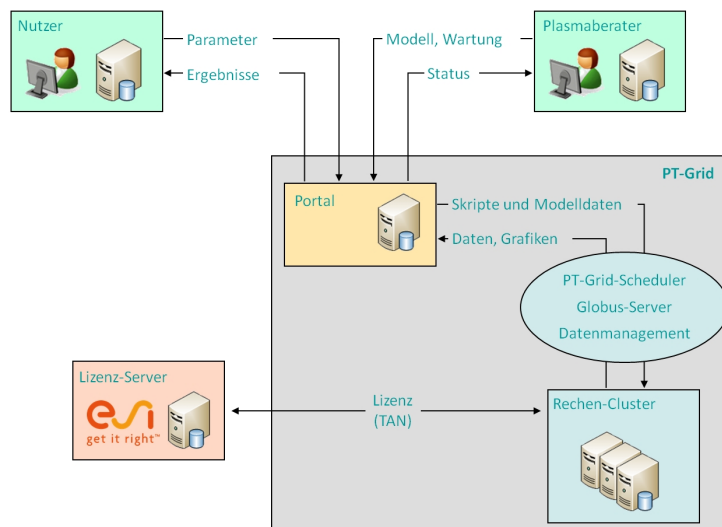


Abbildung 48: Arbeitsablauf Grid-basierter Modellrechnungen im Teilprojekt 2

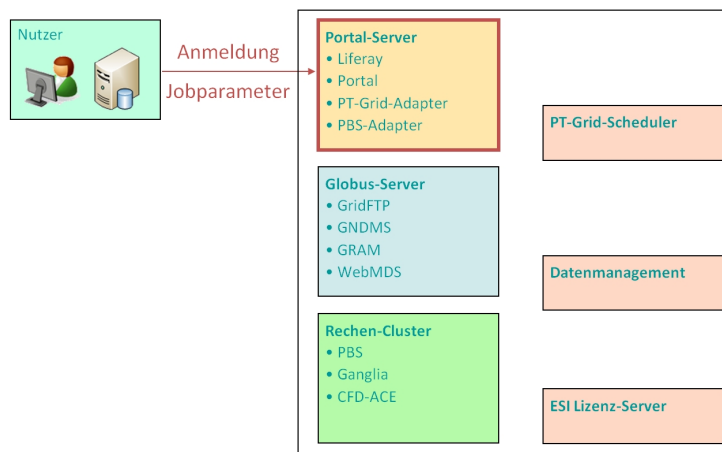


Abbildung 49: Grid-basierte Modellrechnungen im Teilprojekt 2 aus Nutzersicht

für Dienstleistungen des Plasmaberaters, wie z. B. Modellerweiterung und -bereitstellung oder Service-Hotline, und die Nutzung der Hardware im PT-Grid entstehen.

Zur Nutzung des Online-Beratungswerkzeuges muss sich der Kunde anmelden. Nach der Anmeldung im Portal über die Startseite (Abbildung 6) gelangt der Nutzer über die Startseite des Demonstrator-Portals des PT-Grids (Abbildung 7) unter dem Punkt „Magnetohydrodynamics“ (Online-Hilfe des Teilprojektes 2) bzw. direkt über „Run: Magnetohydrodynamics“ auf die Eingabemaske zur Durchführung der Simulationen, wo er die Parameter seines Rechenjobs eingibt. Über die in Abbildung 49 dargestellten Server, Komponenten und Adaptern benötigt er keine Informationen.

Die Eingabemaske zur magnetohydrodynamischen Simulation von Plasmabrenneranlagen ist in Abbildung 50 illustriert. Nach Betätigung des Schalters „New“ im Portlet zur Jobsteuerung öffnet sich das Portlet zur Eingabe der verschiedenen Parameter. Im An-

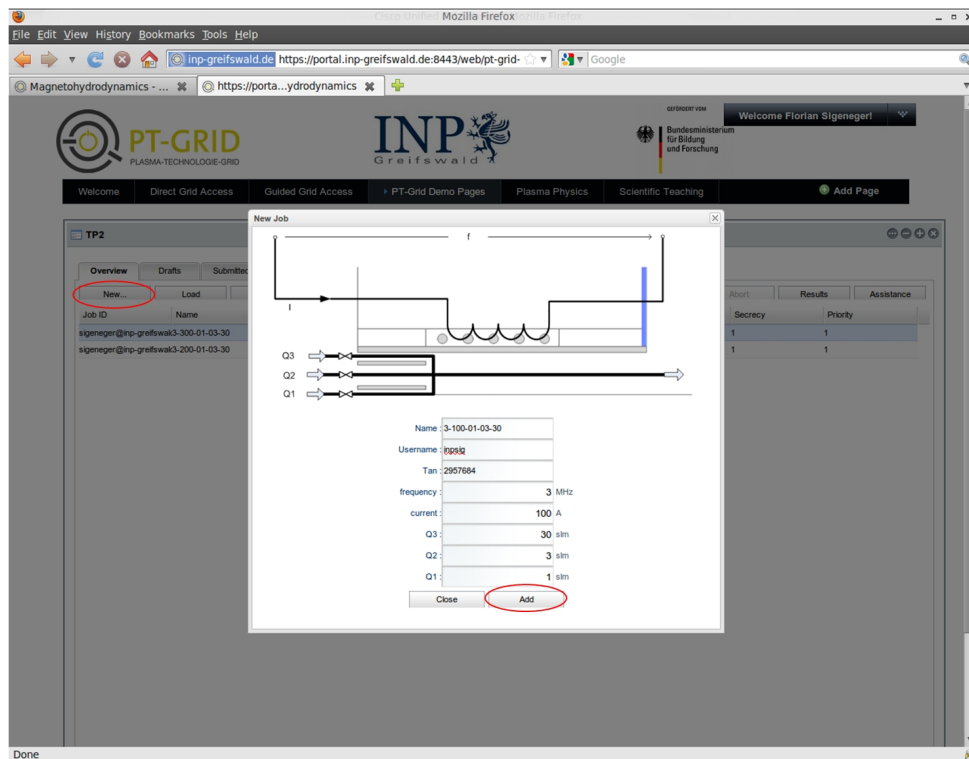


Abbildung 50: Eingabemaske zur magnetohydrodynamischen Simulation

schluss an den Namen des Rechenjobs sind der Nutzernamen und die Transaktionsnummer einzugeben. Diese beiden Parameter werden zur Bereitstellung der Lizenz von CFD-ACE+ durch den Lizenzserver (ptgrid.esigmbh.de) der ESI GmbH benötigt. Dabei setzt sich der Nutzernamen aus dem Projektnamen und der Kennung des Nutzers zusammen. Es folgt die Eingabe der Parameter für das Plasmamodell, also Frequenz, Stromstärke und die Gasströme Q_1 , Q_2 und Q_3 des Präkursors, des Plasmas bzw. der Abschirmung. Bei einer fehlerhaften Eingabe erscheint eine Warnmeldung, die den minimalen oder maximalen Wert des Parameters für eine erfolgreiche Simulation angibt. Nach Eingabe aller Größen wird der Rechenjob über den Schalter „Add“ im Portlet hinzugefügt. Durch Auswahl dieses Jobs kann man über „Load“ die Daten erneut laden und gegebenenfalls bearbeiten. Zum Löschen von Rechenjobs verwendet man „Delete“.

Der Start des neu generierten Jobs erfolgt nach dessen Auswahl über „Start Job“. Dabei wird der Nutzer vor dem Abschicken des (kostenpflichtigen) Jobs noch einmal gefragt, ob er die Simulation wirklich durchführen möchte, wie Abbildung 51 verdeutlicht.

Das Portal gibt den Auftrag an den Scheduler, den Job zu starten. Dadurch ändert sich der Status von „New“ auf „Queued“. Der PT-Grid-Scheduler fordert nun das Datenmanagementsystem auf, die Daten des Jobs zu einer Rechenressource zu schicken, woraufhin das Datenmanagementsystem per GridFTP den Transfer vom Portal-Server zum Rechen-Cluster durchführt. Anschließend wendet sich der PT-Grid-Scheduler an den

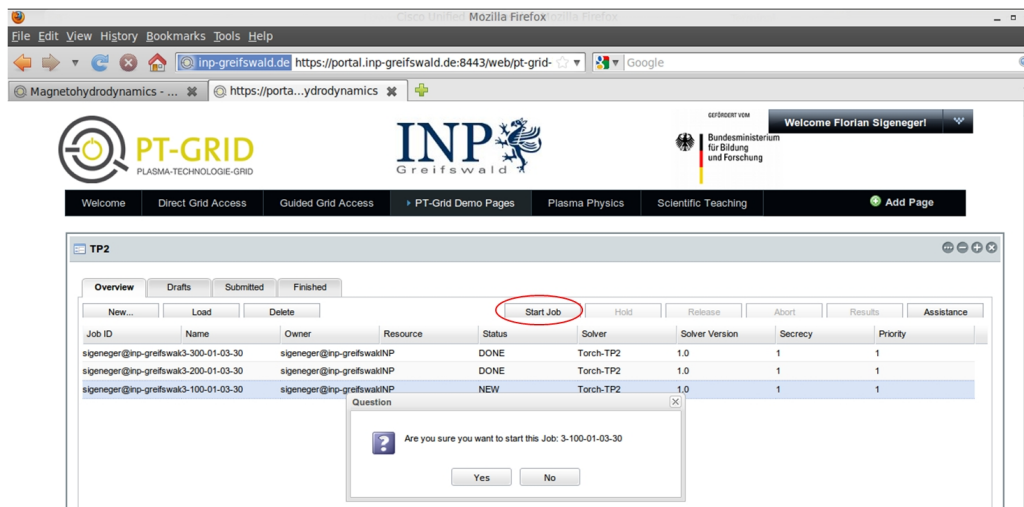


Abbildung 51: Start einer magnetohydrodynamischen Simulation

Globus-Server mit der Aufforderung den Job zu starten. Der Globus-Server leitet diese Anfrage weiter an den Rechen-Cluster. Dieser interagiert mit dem Lizenzserver der ESI GmbH, um die TAN abzufragen und von der dem Kunden zur Verfügung stehenden Liste abzustreichen. Nach erfolgreicher TAN-Abfrage wird die Berechnung gemäß dem in Abbildung 52 dargestellten Skriptablauf durchgeführt. Im PT-Grid-Portlet zur Jobsteuerung wird beim Überblick der Status „Running“ angezeigt, und die laufenden Berechnungen können auch in der Rubrik „Submitted“ abgefragt werden.

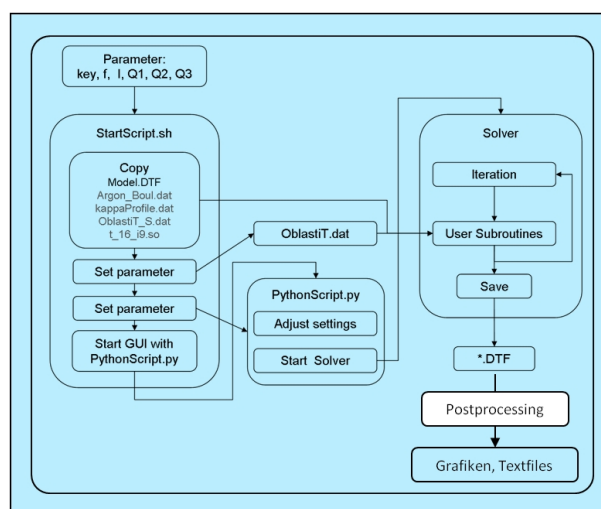


Abbildung 52: Skriptablauf einer magnetohydrodynamischen Simulation

Nach Beendigung der Berechnungen ändert sich der Job-Status im Überblick auf „Done“. Der Globus-Server meldet an den PT-Grid-Scheduler, dass die Ergebnisse vorliegen, woraufhin der Scheduler das Datenmanagement beauftragt, die Daten von der Rechenressource zu holen. Das Datenmanagement transferiert per GridFTP die Ergebnis-

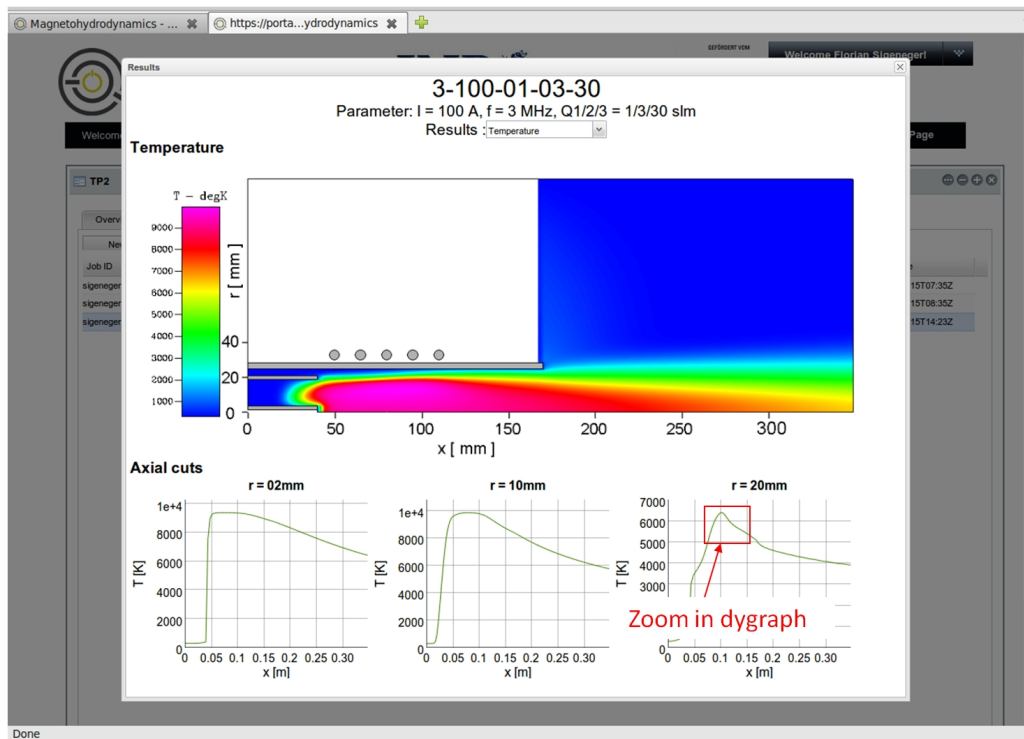


Abbildung 53: Räumliche Variation der Temperatur in einem Plasmabrenner

daten vom Rechen-Cluster zurück zum Portal-Server, wo sie für den Nutzer zur Verfügung stehen.

Grafische Darstellungen der Ergebnisse bekommt der Nutzer über die Rubrik „Finished“ (siehe Abbildung 51). Dort werden die Resultate aller beendete Rechenjobs gespeichert und können ausgewertet werden. Als Beispiel für die Ergebnisaufbereitung zeigt Abbildung 53 grafische Darstellungen für die Temperatur für einen Rechenlauf mit einer Frequenz von 3 MHz, eine Stromstärke von 100 A und die Gasströme $Q_1 = 1 \text{ slm}$, $Q_2 = 3 \text{ slm}$ und $Q_3 = 30 \text{ slm}$. Die Ergebnisse werden sowohl als räumlich zweidimensionale Konturdiagramme als auch als axiale Schnitte für vorgegebene radiale Positionen dargestellt. Dabei besteht die Möglichkeit, mit Dygraph sich Ausschnitte zu vergrößern. Neben der Temperatur werden aktuell die axiale Geschwindigkeit und die Verlustleistung als Größen dargestellt.

Zusätzlich zum Modell eines induktive gekoppelten Plasmabrenners wurde die Etablierung wissenschaftlicher Programm im PT-Grid ins Arbeitsprogramm des INP Greifswald mit aufgenommen. Diese Option wurde notwendig, nachdem sich abzeichnete, dass die öffentlich geförderten Rechenressourcen des D-Grids nicht für kommerzielle Zwecke verwendet werden dürfen. Darüber hinaus bot die Realisierung eigener wissenschaftlicher Programme in der PT-Grid-Umgebung den Vorteil, Modellrechnungen ohne externe Lizenzierung durchzuführen. Somit unterstützten diese rein wissenschaftliche Modellierung

im Grid die Umsetzung der PT-Grid-Infrastruktur.

Von den verschiedenen geplanten plasmaphysikalischen Problemstellungen konnte die Modellierung zur Reduktion der plasmachemischen Reaktionskinetik auf der Grundlage der Annahme eines quasistationären Zustandes umgesetzt werden. Sie ist unter dem Punkt „Reducing Plasma-Chemical Reaction Kinetics“ über die Titelseite des Hilfe-Wikis des PT-Grid-Portals (Abbildung 7) erreichbar. Unter Verwendung mathematischer Methoden, die auf einem Algorithmus von D. Lebiez [6] basieren, sollen komplexe plasmachemische Reaktionsmodelle mit einem Minimum an Informationsverlust über die Reaktionskinetik reduziert werden, um die Rechenzeit bei den Simulationen von zwei- und dreidimensionalen Plasmareaktoren zu verkürzen. Die Idee besteht dabei darin, das System der Differentialgleichungen durch eine Reduktion der Anzahl der Spezies im Plasma zu verkleinern, wobei die Teilchendichten der (durch die Reduktion) fehlenden Spezies aus vordefinierten Matrizen berechnet werden. Unter der Annahme eines quasistationären Zustandes werden die Aussagen für die sich zeitlich langsam verändernden Spezies gemacht. Die Aktivitäten waren Gegenstand der Masterarbeit von P. Ziemann an der Ernst-Moritz-Arndt-Universität Greifswald 2012 zum Thema „Modellreduktion der Reaktionskinetik bei der Wasserstoffverbrennung und in thermischen Luftplasmen“ [7], die in Kooperation mit dem INP Greifswald erfolgte.

Als exemplarisches Ergebnis zeigt Abbildung 54 die zeitliche Entwicklung von atomarem und molekularem Stickstoff und Sauerstoff sowie der Elektronen für ein Atmosphärendruckplasma mit einer Anfangszusammensetzung von 77% N_2 und 23% O_2 bei konstanter Gastemperatur von 4500 K und einer Elektronentemperatur von 1 eV (= 11605 K). Es zeigt sich, dass der molekulare Sauerstoff (O_2) schnell zu atomarem Sauerstoff (O) dissoziiert wird, dass langsamer auch der molekulare Stickstoff (N_2) dissoziiert wird und sich dabei die im stationären Zustand dominante Spezies des atomaren Stickstoffs (N) bildet. Der Ionisationsgrad³⁹ beträgt im stationären Zustand etwa 2%. Das Plasma ist quasineutral, wobei die Teilchendichte der atomaren Sauerstoffionen (O^+) etwa 75% und die der atomaren Stickstoffionen (N^+) etwa 25% der Elektronendichte beträgt.

AP7-TP2: Soll-Ist-Abschlussanalyse

Wie die vorangehenden Abschnitte zum Teilprojekt 2 verdeutlichen, konnten die geplanten Ziele erreicht werden. Mit Unterstützung durch die informationstechnischen Berater wurde die innovative Gesamtinfrastruktur des PT-Grids (Abbildung 5) am und durch das INP Greifswald erfolgreich umgesetzt. Wesentliche Bestandteile dieser Infrastruktur aus Teilprojekt 2 sind der Globus-Compute-Server (ptgrid.inp-greifswald.de) für Rechnungen

³⁹Verhältnis von Elektronendichte zu Neutralgasdichte

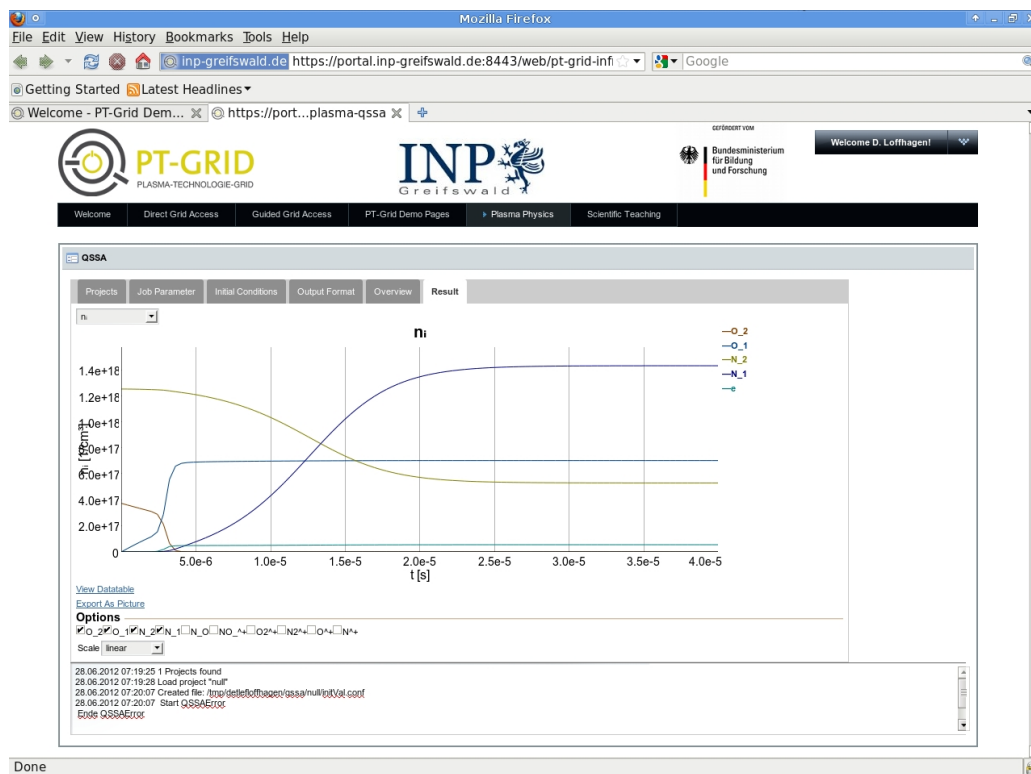


Abbildung 54: Zeitliche Entwicklung verschiedener Teilchendichten in einem Luftplasma am INP Greifswald inklusive des Multi-Physics-Werkzeugs CFD-ACE+, der Lizenzserver (ptgrid.esigmbh.de) der ESI GmbH für das Lizenzmanagement und Abrechnungsverfahren und der PT-Grid-Portalserver (<http://portal.inp-greifswald.de>), der als Benutzerschnittstelle dient und die Demonstratormodelle der Teilprojekte zur Verfügung stellt.

Das Modell zur Simulation von Plasmabrenneranlagen mit Hilfe der kommerziellen Software CFD-ACE+ wurde im Rahmen des Teilprojektes 2 für die Nutzung im Grid aufbereitet, auf den Servern des PT-Grids installiert und in die PT-Grid-Infrastruktur integriert. Es steht zur Pilotanwendung zur Verfügung. Für die (kostenpflichtige) Nutzung der Software CFD-ACE+ wurde durch die ESI GmbH ein Grid-geeignetes Lizenzmodell und Abrechnungsverfahren entwickelt und technisch umgesetzt. Dieses Pay-by-Use-Bezahlsystem, das eine Abrechnung der Lizenzkosten nach genutzten CPU-Stunden vorsieht und für Kunden des PT-Grids mit dem TAN-Konzept verknüpft wurde, wird auch für Standardkunden der ESI GmbH (kein Grid-Computing) im Rahmen des offiziellen Buchungssystems der ESI GmbH angeboten.

Für Anwender plasmatechnischer Modelle aus Industrie und Wissenschaft steht somit ein Online-Beratungswerkzeug exemplarisch bereit, das umfangreiche Parameterstudien direkt vom Arbeitsplatz aus ermöglicht. Dabei können über das Portal sowohl Ressourcen des D-Grids als auch interne und externe Rechenressourcen angesteuert werden. Jedoch ist

aktuell nicht die Voraussetzung gegeben, dass D-Grid-Ressourcen auch für kommerzielle Zwecke verwendet werden dürfen.

Mit dem vom INP Greifswald aufgebauten Portalentwicklungsarbeitsplatz und dem erstellten Portlet-Template für die Dateneingabe sowie den von der Ruhr-Universität Bochum entwickelten Portlets zur Steuerung der Simulationen steht zudem eine Entwicklungsinfrastruktur zur Verfügung, die den Zeitaufwand zur Anpassung weiterer Softwarepakete aus Wissenschaft und Industrie (auch außerhalb der Plasmatechnologie) minimiert.

AP8-TP2: Lektorat, Dokumentation und Schulungsunterlagen

Das Arbeitspaket 8 des Teilprojektes 2 (AP8-TP2) beinhaltet die Erstellung und zentrale Ablage von Berichten, Schulungsunterlagen und anderen Materialien. Gemäß dem Zuwendungsbescheid erstellten die ESI GmbH und das INP Greifswald halbjährlich zu Mitte Februar und August eines Jahres jeweils einen Zwischenbericht und leiteten diesen dem Projektträger zu. Diese Zwischenberichte sowie die PT-Grid-internen Berichte [P1, P3, P10–P12, P16, P19, P26] und die Präsentationen der Teilprojektpartner wurden auf dem BSCW-Server <http://bscw.uni-duisburg-essen.de/bscw/bscw.cgi/> abgelegt.

Durch das INP Greifswald wurden den Projektpartnern eine Referenzanleitung [P10] der administrativen Schritte zum Aufbau der PT-Grid-Server und eine detaillierte Beschreibung [P12] der Schritte zur Installation und Konfiguration eines Portalentwicklungsarbeitsplatzes und eines Beispiel-Portletprojektes bereitgestellt. Beide Dokumente wurden in die PT-Grid-Dokumentation unter <http://forge.it.irf.uni-dortmund.de/trac/ptgrid/wiki> eingefügt. Ferner erfolgte die Dokumentation des PT-Grid-Portals am INP Greifswald.

6.4 Teilprojekt 3: PIC-MC-Simulation von Niederdruck-Plasmaentladungen

A. Pflug¹ und J. Niemann²

¹ Fraunhofer-Institut für Schicht- und Oberflächentechnik (IST), Braunschweig

² GNS Systems GmbH, Braunschweig

Die Arbeiten des Teilprojektes 3 zielten zum einen auf eine standardisierte Erschließung von im D-Grid verfügbarer, paralleler High-Performance-Computing-Hardware für Plasmasimulationen ab. Zum andern sollte die Bedienbarkeit plasmaphysikalischer Simulationstools verbessert sowie der Vernetzung mit interessierten Industriepartnern und anderen Forschungseinrichtungen aus dem Bereich Beschichtungstechnik und Plasmaphysik Vorschub geleistet werden.

Das Teilprojekt wurde in einer Kooperation der Projektpartner Fraunhofer-Institut für Schicht- und Oberflächentechnik (IST), Arbeitsgruppe „Simulation“ und GNS Systems GmbH in Braunschweig bearbeitet. Die Leitung des Teilprojektes lag beim Fraunhofer IST. Die Aktivitäten im Teilprojekt 3 wurden durch die assoziierten Partner Euroglas GmbH in Haldensleben, Leybold Optics GmbH, Alzenau und VON ARDENNE Anlagentechnik GmbH in Dresden begleitet.

Die Arbeitsgruppe „Simulation“ am Fraunhofer-Institut für Schicht- und Oberflächentechnik befasst sich vorrangig mit partikel-basierter Simulation von Niederdruck-Gasströmungen und -Gasentladungen. Der Niederdruckbereich ist aufgrund der großen mittleren freien Weglänge der Gasteilchen und den damit verbundenen nichtlokalen Effekten nicht mittels Methoden aus der Kontinuumsdynamik darstellbar. Demgegenüber bieten sich partikelbasierte Verfahren wie die Direct Simulation Monte Carlo (DSMC)- und die Particle-in-Cell-Monte-Carlo (PIC-MC)-Methode [8,9] an, die auf eine statistische Lösung der Boltzmannschen Transportgleichung abzielen. Problematisch an den partikelbasierten Verfahren ist jedoch zum einen, dass sie sehr rechenaufwändig sind und daher eine Parallelisierung zwingend erforderlich ist, und zum andern, dass bis vor kurzem kaum kommerzielle oder universitäre Codes verfügbar waren, die auf industriell relevante Aufgabenstellungen hin angewandt werden konnten. Aus diesem Grunde wurde am Fraunhofer IST eine eigene parallelisierte Implementation des DSMC- bzw. PIC-MC-Verfahrens erstellt. Diese Software, die im Rahmen des Teilprojektes für die Nutzung im Grid tauglich gemacht werden sollte, weist eine inzwischen mehr als zehnjährige Entwicklungsgeschichte auf und wurde im Rahmen mehrerer vom BMBF und der Volkswagen-Stiftung geförderter Projekte entwickelt sowie im Rahmen von Industrieprojekten getestet und erweitert. Dokumentationen zu dieser Software finden sich in der Literatur [10–12].

Die Ziele des Teilprojektes wurden im Rahmen der fünf Arbeitspakete

1. Soll-Ist-Erfassung (AP1-TP3) zu Projektbeginn,
2. D-Grid-Integration (AP2-TP3) der PIC-MC-Software,
3. Benutzeroberfläche (AP3-TP3),
4. Pilottests (AP4-TP4) und
5. abschließende Soll-Ist-Erfassung (AP5-TP3)

umgesetzt. Die Arbeitsplanung für das Teilprojekt 3 inklusive Zuordnung der Projektpartner ist in Abbildung 99 im Anhang A.4 illustriert. Es sei darauf hingewiesen, dass die Mitwirkung der GNS Systems GmbH sich im Wesentlichen auf die Erstellung einer Web-Schnittstelle zur webbasierten Ansteuerung von Berechnungsdiensten konzentrierte (AP3-TP3). Die Erstellung des Pflichtenhefts in Arbeitspaket AP1-TP3 erfolgte im Wesentlichen in Kooperation von Fraunhofer IST und GNS Systems GmbH in Rücksprache mit den assoziierten Industriepartnern. Weiterhin unterstützte die GNS Systems GmbH die Arbeiten in Arbeitspaket AP2-TP3 in beratender Weise. Die nachfolgend dargestellten Ergebnisse und Erkenntnisse sind größtenteils auch im PT-Grid-internen Bericht „Abschlussbericht zum Teilprojekt 3 – PIC-MC-Simulation von Niederdruck-Plasmaentladungen – im Projekt Plasma-Technologie-Grid“ [P34] zusammengefasst.

AP1-TP3: Soll-Ist-Erfassung

Ziel der Soll-Ist-Erfassung zu Projektbeginn war die Feststellung der Ausgangssituation und die Festlegung der zum Erreichen der Zielsetzungen im Rahmen der Arbeitspakete AP2-TP3 und AP3-TP3 benötigten Schritte. Die Ergebnisse sollten in einem Pflichtenheft dokumentiert werden.

Pflichtenheft zur Integration in die D-Grid-Infrastruktur: Der Programmablauf für PIC-MC-Simulationen ist in Abbildung 55 und kann grob in folgende Abschnitte unterteilt werden. Bei der Datenvorbereitung (Proprocessing) erfolgt die Erzeugung einer flächigen, triangulierten Geometriedarstellung in Form eines sogenannten Meshfiles mit physikalischen Oberflächenmarkierungen, die Einbettung der Geometrieflächendarstellung in ein Simulationsvolumen und die Eingabe der Parameter für die jeweiligen Oberflächentypen. Daraufhin wird der Simulationslauf durchgeführt (Solver), wobei zwischendurch gegebenenfalls eine Unterbrechung und Reorganisation der Parallelisierungsaufteilung (Load-Balance) durchgeführt wird. Abschließend werden im Rahmen der Aufbereitung der Ergebnisse (Postprocessing) die Ausgabendateien gesichtet und Querschnittsgrafiken oder

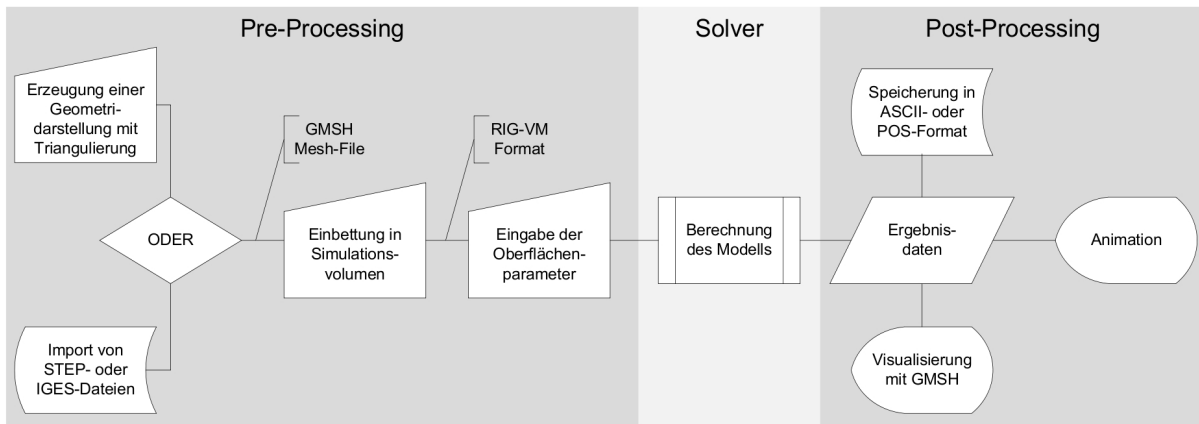


Abbildung 55: Workflow für PIC-MC-Simulationen im Teilprojekt 3

Animationen erzeugt. Bei nichtzufriedenstellenden Ergebnissen wird der Workflow wiederholt. Der Workflow wurde in den allgemeinen Arbeitsablauf im Plasma-Technologie-Grid, der in Abbildung 2 dargestellt ist, integriert und im PT-Grid-internen Bericht „Soll-Ist-Erfassung der Informationstechnik-Infrastruktur im PT-Grid“ [P4] dokumentiert.

Wie der Abbildung 56 entnehmbar ist, basierte die am Fraunhofer IST bei Projektbeginn bestehende Software-Architektur auf der Verwendung der Programmbibliothek (library) „Parallel Virtual Machine“ (PVM) zur Parallelisierung. PVM ist ein inzwischen recht alter Standard [13] zur Realisierung einer Parallelisierung mit verteiltem Speicher via Message-Passing, der seit etwa 2005 nicht mehr wesentlich weiterentwickelt wurde⁴⁰.

Der Programmablauf für DSMC/PIC-MC-Rechnungen gestaltete sich ursprünglich derart, dass zunächst ein Master-Prozess gestartet wird, der eine Parameterdatei sowie eine vernetzte Geometrie einliest und anhand der in der Parameterdatei enthaltenen Informationen eine Anzahl an N Slave-Prozessen dynamisch nachstartet. Hierzu müssen auf dem Rechencluster zunächst sogenannte PVM daemons⁴¹ gestartet werden, denen entweder manuell oder mittels eines Host-Files die IP-Adressen zugelassener Rechenknoten nebst verfügbarer CPU-Cores mitgeteilt werden müssen.

Dieser Ansatz ist in einer kleinen Arbeitsgruppe mit eigenem Linux-Cluster mittels gegenseitiger Absprache durchführbar, scheitert aber auf einem großen Rechencluster, auf dem ein Batch-Scheduler mehreren Arbeitsgruppen unabhängig voneinander Job-Ausführung ermöglicht. In Absprache mit GNS Systems GmbH und dem Institut für Roboterforschung der Universität Dortmund (IRF) wurden daher für die D-Grid-Integration die folgenden Zielsetzungen festgelegt:

⁴⁰Das letzte Release auf der offiziellen PVM-Website, http://www.csm.ornl.gov/pvm/pvm_home.html, stammt von 2006.

⁴¹daemon: Hintergrundprogramm

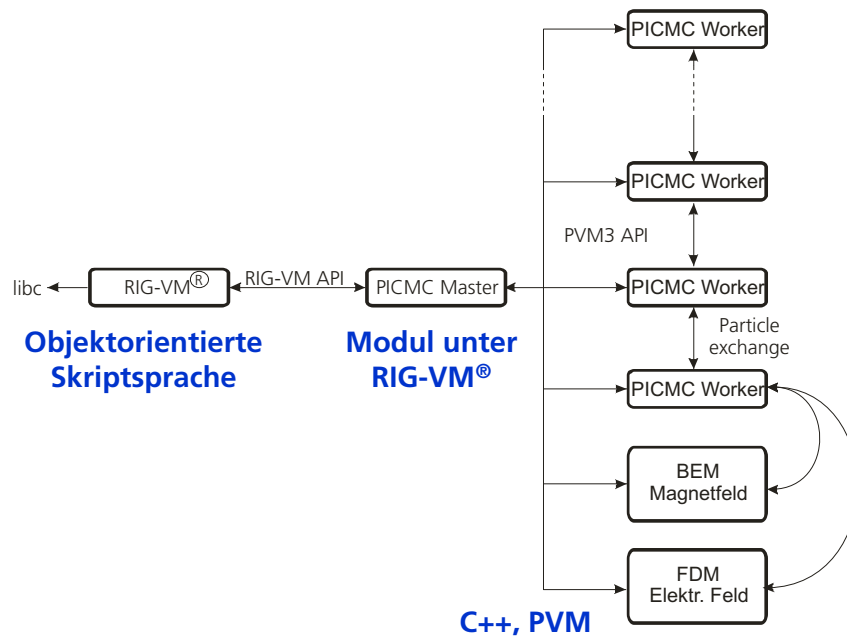


Abbildung 56: PIC-MC-Programmarchitektur zu Beginn des Projekts PT-Grid

- Anstelle von PVM sollte MPI [14] als Parallelisierungsbibliothek verwendet werden, da diese sich inzwischen als De-facto-Standard für Parallelanwendungen basierend auf dem Message-Passing-Ansatz gegenüber PVM durchgesetzt hatte. Auf den für paralleles Rechnen vorgesehenen D-Grid-Ressourcen konnte die Installation mindestens einer MPI-Version praktisch vorausgesetzt werden.
- Die parallele Anwendung sollte nicht auf manuell festgelegten Rechnerknoten, sondern mittels eines Job-Schedulers gestartet werden, wobei in den Tests zumindest die Job-Scheduler PBS/Torque und Sun Grid Engine (SGE) zum Einsatz kommen sollten. Hierzu war die Angabe der Anzahl benötigter Prozesse und der Rechnerknoten vollständig aus den Modell-Parameterdatensätzen zu verbannen. Da diese Angaben bereits bei der Job-Einreichung via Job-Scheduler gemacht werden müssen, resultieren ansonsten unerwünschte Redundanzen und Fehlerquellen. Im Umkehrschluss muss die Simulationssoftware nun selbst zum Startzeitpunkt herausfinden, wieviele Prozesse auf welchen Rechnerknoten gestartet wurden, um die Kommunikation und Lastverteilung entsprechend der vorgefundenen Situation anzupassen.
- Als nächster Schritt war die Job-Einreichung über die D-Grid-Middleware Globus Toolkit in der Version 4.0.8, die ihrerseits wiederum mit einem auf dem Zielrechner laufenden Job-Scheduler kommuniziert, zu testen.
- Im Projekt PT-Grid wurde vereinbart, einen am IRF entwickelten Meta-Scheduler zu verwenden, der auf die Globus-Schnittstellen aufsetzt, dem Benutzer aber die

explizite Auswahl der Zielressourcen und der benötigten Datentransfers mit Hilfe spezieller Algorithmen abnehmen sollte. Dementsprechend beinhaltet die D-Grid-Integration auch einen Test der portierten DSMC/PIC-MC-Software mit dem IRF-Scheduler.

Die hier genannten Punkte umfassten die Minimalvoraussetzungen für den störungsfreien Betrieb paralleler Anwendungen im D-Grid und im Rahmen des Projekts PT-Grid. Bezüglich der im Arbeitspaket AP3-TP3 geplanten Errichtung eines Web-Portals waren weitere Vorüberlegungen erforderlich, die im Folgenden aufgeführt sind.

Pflichtenheft zur Erstellung einer auf Grid-Services basierten Benutzeroberfläche: Die im Arbeitspaket AP3-TP3 vorgesehene Einrichtung eines Web-Portals umfasste zum einen die Erstellung einer webbasierten Benutzeroberfläche, zum andern waren Webservices⁴² vorzusehen, die eine via http-Aufrufe ferngesteuerte Ausführung von Prozessen via standardisierter D-Grid-Schnittstellen ermöglichen.

Die geplante Option, alle im PT-Grid entwickelten Programme in die Web-Schnittstelle potenziell einbeziehen zu können, gestaltete die Aufgabe der Portalentwicklung aufgrund der Verschiedenartigkeit der Berechnungsabläufe bei den unterschiedlichen Projektpartnern äußerst komplex. Das endgültige Konzept wurde daher nicht vollständig vorab festgelegt, sondern musste teilweise während der Projektdurchführung entsprechend den aktuellen Erkenntnissen angepasst werden.

In einem Arbeitstreffen von Fraunhofer IST und GNS Systems GmbH zu Projektbeginn wurde zunächst ein Konzept zur Realisierung der webbasierten Benutzerinteraktion bei der Gasfluss- und Plasmasimulation mittels DSMC/PIC-MC entwickelt, das in Grundzügen in der Abbildung 57 dargestellt ist. Der generelle Ablauf gestaltet sich demnach wie folgt.

Zu Beginn erstellt der Benutzer auf seinem lokalen Rechner mit Hilfe eines CAD-Systems sowie eines Vernetzers ein Netzmodell aller für den Beschichtungsprozess relevanten Oberflächen im Beschichtungsreaktor. Die Erstellung und Verarbeitung von 3D-Geometrien soll demnach nicht durch ein Webinterface erfolgen, da die hierzu erforderlichen Programmierarbeiten den Projektumfang sprengen und am Kern vorbeigehen würden. Zur Modell- und Netzerstellung kann dazu das Open-Source-Programm GMSH [15] verwendet werden. Als Alternativoption wurde der Einsatz des seitens der GNS Systems GmbH entwickelten Modellierungssystems Generator3 diskutiert. Die Flächen des Geometriemodells werden dabei entsprechend ihrer Funktion, z. B. Elektrode mit definiertem

⁴²Webservices sind Programme, die auf einem entfernten Server laufen und mittels http-Anfragen gesteuert werden können. Der hierzu erforderliche Transfer von Parametern und Befehlscodes erfolgt in der Regel mit Hilfe von Datenpaketen im XML-Format.

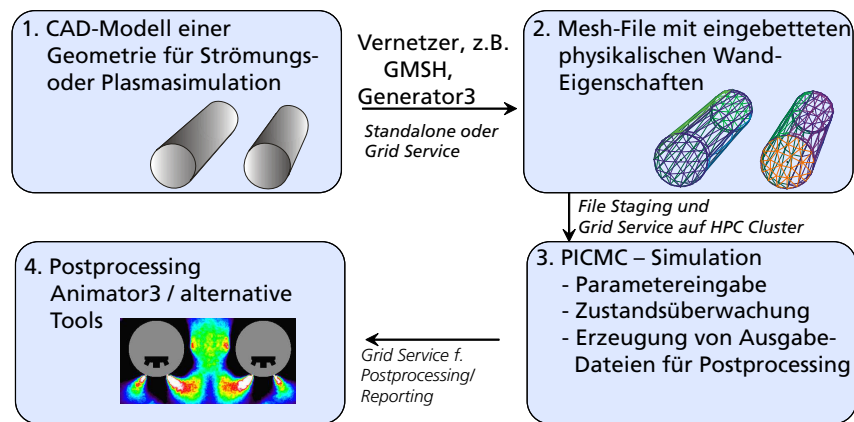


Abbildung 57: Konzept zur webbasierten Benutzerinteraktion mit der DSMC/PIC-MC-Gasfluss- und Plasmasimulation

Potential, Teilchenquelle, Wand mit Absorptionsvermögen, in sogenannte physikalische Gruppen eingeteilt, wobei jede physikalische Gruppe einen Namen erhält.

Das Netz-Modell der Geometrie wird anschließend an den Portalserver hochgeladen. Dort wird anhand der Modelldimension sowie der Anzahl der physikalischen Gruppen ein angepasster Modell-Parametersatz erzeugt, und die Eingabevariablen werden mit sinnvollen Default-Werten belegt. Dieser Modellparametersatz kann nun mit Hilfe dynamisch generierter Webformulare vom Benutzer editiert werden. Die Webschnittstelle sollte Mehrbenutzer-fähig sein, d. h., mehrere Benutzer sollten sich über getrennte Accounts gleichzeitig einloggen können. Pro Benutzer sind mehrere Modellfälle vorgesehen, die im Webformular ausgewählt werden können. Jeder Benutzer soll jedoch nur seine eigenen Modellfälle sehen und bearbeiten können.

Nach erfolgter Anpassung der relevanten Modellparameter soll das Webinterface das Einreichen und Überwachen der zugehörigen Berechnungsjobs ermöglichen. Für die Job-Schnittstelle wurde anfangs zu Testzwecken auf die lokal am Fraunhofer IST vorliegenden Hardware-Ressourcen zurückgegriffen. In einer späteren Projektphase sollte der Job-Submit via standardisierter D-Grid-Schnittstellen bzw. dem seitens des IRF entwickelten Grid-Schedulers erfolgen.

Während der Berechnung soll der aktuelle Status, z. B. der aktuelle Iterationsschritt, in sinnvollen Zeitintervallen abrufbar sein. Ergebnisdaten, die während der Berechnung anfallen, sollen über das Webinterface zum Download angeboten werden. Für den Benutzer entfällt somit die Notwendigkeit, sich vor Durchführung von Berechnungen in technische Details der D-Grid-Infrastruktur einarbeiten zu müssen.

Das Postprocessing der Berechnungsdaten, etwa die 3D-Darstellung derselben im Zusammenhang mit der Modellgeometrie, erfolgt wiederum auf dem lokalen Rechner des Benutzers mit beschleunigter 3D-Grafikkarte. Hierzu kann wiederum das Open-Source-

Programm GMSH oder optional auch das seitens der GNS Systems GmbH entwickelte Postprocessing-Tool Animator3 zum Einsatz kommen.

AP2-TP3: D-Grid-Integration

Die Integration der PIC-MC-Software in die D-Grid-Infrastruktur erfolgte in mehreren Teilschritten. Zunächst wurde die Software von PVM nach MPI portiert. Anschließend wurden Skripte erstellt, mit denen Simulationsjobs auf einem Job-Scheduler einer Grid-Ressource eingereicht werden können.

Portierung der PIC-MC-Software von PVM nach MPI: In diesem Teilschritt wurde die Parallelisierung der Software, die zuvor auf PVM basierte, auf MPI-2 umgestellt. Zum Einsatz kam dafür die MPI-2-Implementation OpenMPI [16]. Zur Strukturierung der Portierungsarbeiten wurde zunächst eine C++-Klasse `MPIWrapper` erstellt, in der die bisher genutzte PVM-Funktionalität mit Mitteln von OpenMPI nachgebildet wird. Im zweiten Schritt mussten lediglich alle bisherigen PVM-Aufrufe durch Methodenaufrufe der Wrapper-Klasse ersetzt werden. Zusätzlich mussten einige spezifische Unterschiede zwischen PVM und OpenMPI berücksichtigt werden:

- **Nachrichten-Buffer:** Unter PVM wird im Hintergrund automatisch genügend Zwischenspeicher angelegt, um einen Nachrichten-Puffer zu versenden. Der Sendeprozess ist nichtblockierend, d. h., das sendende Programm kann mit der Programmausführung fortfahren, bevor die Nachricht vollständig beim Empfänger angekommen ist. Bei OpenMPI ist der Zwischenspeicher zum Senden statisch begrenzt, d. h., sobald die versandte Nachricht größer als der Zwischenspeicher ist, wird der Sendeprozess solange blockierend, bis die Nachricht vollständig empfangen wurde.
- **Deadlocks:** In der DSMC/PIC-MC-Software erfolgt die Parallelisierung anhand einer Gebietsaufteilung des Rechenvolumens. Daher müssen sich benachbarte Prozesse fortlaufend Informationen über Teilchen zusenden, die innerhalb einer Iteration die Gebietsgrenzen überschritten haben. In einigen Fällen erfolgt der Teilchenaustausch zwischen beiden Prozessen gleichzeitig. Sobald in beiden Fällen die Größe der Teilcheninformationen die Zwischenspeichergröße überschreitet, werden die Sendeprozesse in beiden benachbarten Prozessen blockierend, und beide Prozesse warten darauf, dass der jeweils andere Prozess die gesendete Nachricht empfängt. Derartige Probleme kommen in der Parallelprogrammierung häufig vor und werden als Deadlocks bezeichnet. Um diese Problematik zu umgehen, wurde in der Klasse `MPIWrapper` eine dynamische Speicherverwaltung für Sende- und Empfangspuffer implementiert. Somit wird die Zwischenspeichergröße bei Bedarf dynamisch an die Nachrichtengröße angepasst.

- Master-Slave-Architektur: Wie in Abbildung 56 gezeigt, besteht die Simulationssoftware aus mehreren Teilprogrammen, die von einem Master-Prozess gestartet und kontrolliert werden. In der bisherigen Version wurde anfangs nur der Master-Prozess gestartet. Nach Einlesen der Parameterdateien startete dieser die restlichen benötigten Prozesse mittels `pvm_spawn`. Prinzipiell ist diese Vorgehensweise im MPI-2-Standard ebenfalls möglich. Der entsprechende Befehl heißt hier `MPI_Comm_Spawn`. Hierdurch haben jedoch die mittels `MPI_Comm_Spawn` erzeugten Prozesse untereinander einen anderen Nachrichtenkanal als zum Master, wodurch sich die Programmierung komplizierter gestaltet. Des Weiteren ist das dynamische Nachstarten von Prozessen während des Programmablaufs schlecht mit einem Betrieb innerhalb eines Job-Schedulers vereinbar: Dem Job-Scheduler muss von vornherein mitgeteilt werden, wieviele CPU-Kerne insgesamt angefordert werden, und zugleich muss dem Master-Prozess noch einmal die Anzahl nachzustartender Prozesse mitgeteilt werden. Damit entstehen unerwünschte Redundanzen.
- Paralleler Aufruf verschiedener Prozesse: Das MPI-Frontend `mpirun` bzw. neuerdings `mpiexec` erlaubt es, verschiedene Prozesse parallel zu starten. Alle Prozesse teilen sich anschließend einen gemeinsamen MPI-Kommunikator. Ein Beispielaufruf hat die folgende Syntax: `mpiexec -np 1 $PICMCPATH/bin/rvm -i $PICMCPATH -l scr/master.r model.par : -np 70 $PICMCPATH/bin/picmc`. Hiermit werden einmal der Master-Prozess `rvm` und 70-mal die Slave-Prozesse `picmc` gestartet.

Im Zuge der Portierungsarbeiten wurden beide Ansätze, d. h. Aufruf des Masters und dynamisches Nachstarten der Slaves bzw. gleichzeitiges Starten aller Prozesse, getestet. Dabei stellte sich die zweite Vorgehensweise als performanter und praktikabler im Zusammenhang mit Job-Schedulern heraus und wurde daher beibehalten. Die Klasse `MPIWrapper` hängt nur von MPI ab. Sie ist somit als eigenständiges Modul nutzbar und kann gegebenenfalls interessierten Partnern zwecks Portierung anderer PVM-basierter Parallelanwendungen zur Verfügung gestellt werden.

Benchmarktests mit der portierten Programmversion: Um zunächst die Performance des Nachrichtentransfers unter OpenMPI und PVM direkt vergleichen zu können, wurden einfache Testprogramme implementiert. Hier wurden zum einen Nachrichtenpakete bidirektional (Master \Leftrightarrow Slave) ausgetauscht, und zum andern wurde ein Token-Ring-Verfahren getestet, in dem ein Nachrichtenpaket reihum zwischen allen Prozessen herumgeschickt wird. Die Tests erfolgten auf dem damaligen Linux-Cluster des Fraunhofer IST bestehend aus sieben Rechnerknoten mit je Dual-Quadcore Intel Xeon CPUs, d. h. acht CPU-Kerne pro Rechner. Die Vernetzung der Rechner untereinander wurde mittels GBit-Ethernet über einen zentralen Switch realisiert.

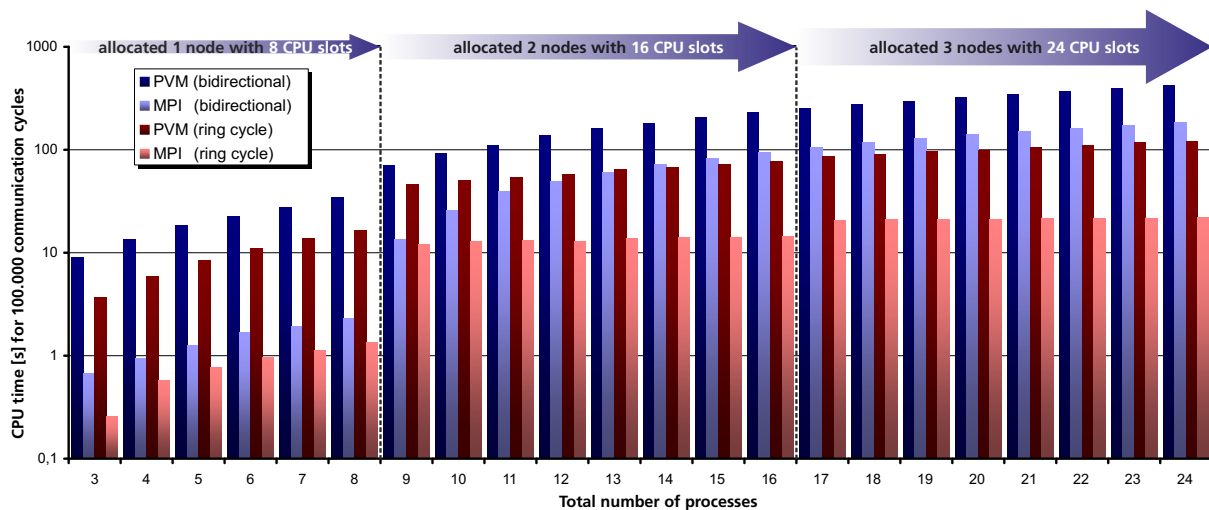


Abbildung 58: Messung der Latenzzeiten beim Austausch einfacher Nachrichtenpakete für PVM und MPI in unterschiedlichen Aufrufszenarios

Wie in Abbildung 58 erkennbar ist, nimmt die unter MPI erreichbare Bandbreite um etwa eine Größenordnung zu, solange die Gesamtanzahl der Prozesse kleiner oder gleich acht ist. Bei PVM ist ein solcher Performancesprung nicht erkennbar. Daraus kann gefolgert werden, dass OpenMPI in Fällen, in denen alle Parallelprozesse auf demselben Rechner laufen, zum Nachrichtentransfer die Netzwerkschnittstelle umgeht, während PVM in allen Fällen durch die Netzwerkschnittstelle ausgebremst wird.

In der Folge wurden mittels DSMC Benchmarktests einfacher Strömungsfälle und von Plasma-Simulationen durchgeführt. Während bei hohem Gasdruck in jedem Iterationsschritt zahlreiche Kollisionen zwischen Gasmolekülen berechnet werden müssen, überwiegen bei niedrigem Druck der Teilchenprozess sowie der Transfer von Teilchen zwischen angrenzenden Prozessen in der Rechenlast. Je nach Anteil der Kommunikation an der Rechenlast wurde bei der OpenMPI-Version ein Performancevorteil von bis zu 100% gemessen. Bei der PIC-MC-Simulation ist neben dem Teilchentransport auch ein Modul zur elektischen Feldberechnung involviert. Hier fällt der Performancevorteil der OpenMPI-Version mit zirka 35% etwas moderater aus, wie Abbildung 59 verdeutlicht. Weitere Details zum Benchmarking des DSMC-Strömungsmodells finden sich in der aus dem Projekt hervorgegangenen Veröffentlichung [17]. Softwareseitig waren somit alle Voraussetzungen zum Betrieb der DSMC/PIC-MC-Simulation auf D-Grid-Ressourcen erfüllt.

AP3-TP3: Benutzeroberfläche

Das Arbeitspaket AP3-TP3 beinhaltete die Erstellung einer auf Grid-Services basierten Benutzeroberfläche. Die zugehörigen Arbeiten umfassten neben der Gestaltung ei-

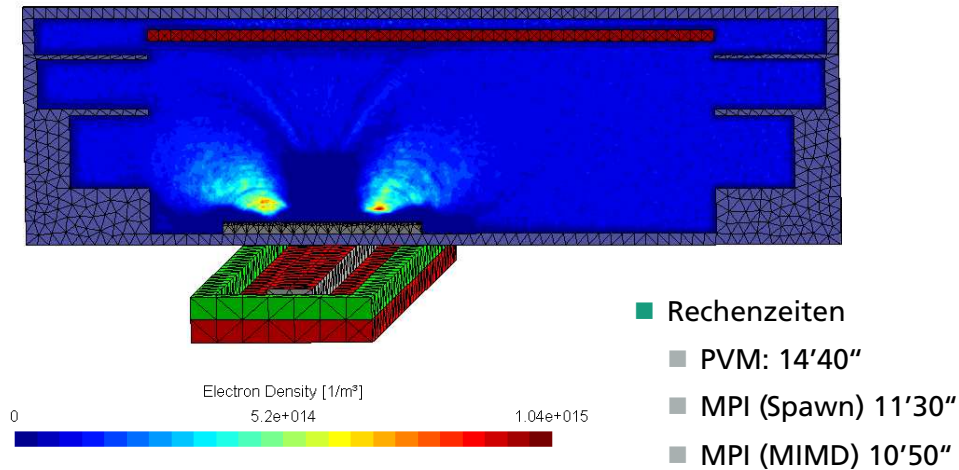


Abbildung 59: Messung der Gesamtrechenzeit für eine 2D-Plasmasimulation nach $0.1 \mu\text{s}$ simulierter physikalischer Zeit mit 8 Parallelprozessen

ner browserbasierten Benutzersteuerung auch die Erstellung von Konzepten zur Mehrbenutzerverwaltung sowie zu ferngesteuerten Datentransfers und Jobausführung auf D-Grid-Ressourcen. Weiterhin stellte sich heraus, dass von den auf der offiziellen D-Grid-Ressourcenliste⁴³ gelisteten Grid-Ressourcen nur ein Bruchteil für die Ausführung hochparalleler Anwendungen geeignet sind. Im Rahmen einer Recherche mussten diese Grid-Ressourcen vorab identifiziert werden.

Einrichten einer extern zugänglichen virtuellen Maschine zum Testen des Grid- und Portalbetriebs: Im Projektkonsortium wurde vereinbart, dass zur Durchführung von Jobs auf D-Grid-Ressourcen die Grid-Middleware Globus Toolkit in der Version 4.0.8 sowie der auf Globus Toolkit aufsetzende, vom Institut für Roboterforschung der Technischen Universität Dortmund entwickelte Scheduler zum Einsatz kommen soll.

Bei Jobs, die mittels Globus Toolkit gestartet werden, erfolgt der Hin- und Rücktransfer der Modell- und Ergebnisdaten üblicherweise mittels `globus-url-copy` über das sogenannte GSIFTP-Protokoll. Letzteres entspricht im Wesentlichen dem SFTP-Protokoll, abgesehen davon, dass die Authentifizierung mittels D-Grid-Zertifikaten erfolgt. Der Rücktransfer der Daten wird hierbei von der Seite des Rechenclusters im Grid angestoßen, wofür es erforderlich ist, dass der Zielrechner unter einem Fully Qualified Domain Name (FQDN)⁴⁴ mit eindeutig zugeordneter IP-Adresse ansprechbar ist.

Insofern war es sowohl für die Tests mit Globus Toolkit als auch für das Aufsetzen eines Web-Portals zum Testen der webbasierten Benutzeroberfläche unerlässlich, einen

⁴³Siehe https://dispatch.fzjuelich.de:8814/dgrid_ressourceall_list/. Die Seite erfordert zum Betrachten ein installiertes Grid-Zertifikat.

⁴⁴Der vollständige Name einer Domain wird als ihr Fully Qualified Domain Name bezeichnet.

extern via fester IP-Adresse und FQDN erreichbaren Rechner aufzusetzen. Für diesen Zweck wurde am Fraunhofer IST mittels VMware[®] eine virtuelle Maschine aufgesetzt und netzwerkseitig in eine demilitarisierte Zone gesetzt. Diese virtuelle Maschine ist unter dem FQDN ptgrid.ist.fraunhofer.de bzw. der fest vergebenen IP-Adresse 153.96.126.135 von extern zu erreichen. Sie verfügt über einen CPU-Kern eines AMD Opteron 2378 mit 2.4 GHz Taktfrequenz. Der verfügbare Arbeitsspeicher beträgt 4 GB. Auf der Maschine ist ein 64-bit Debian-Linux in der Version Squeeze installiert. Da bei einem rund um die Uhr vom Netz aus erreichbaren Rechner eine erhöhte Gefährdung durch externe Angriffe gegeben ist, wurden die folgenden Sicherheitsvorkehrungen durchgeführt:

- Der Linux-Kernel in der Version 2.6.32 wurde manuell als monolithischer Kernel kompiliert, d. h., die Routinen zum Support nachladbarer Module wurden entfernt. Bei der Kernelkonfiguration wurde die Auswahl an Hardwaretreibern explizit auf die in der virtuellen Maschine verfügbaren Hardwarekomponenten beschränkt. Somit kann ausgeschlossen werden, dass der Kernel durch ein manipuliertes nachladbares Modul kompromittiert wird.
- Weiterhin wurde die Software fail2ban installiert. Diese überwacht im Hintergrund alle externen Zugriffsversuche auf den Rechner. Wenn ein Loginversuch sechsmal in Folge fehlschlägt, sperrt fail2ban die entsprechende externe IP-Adresse mittels einer Firewallregel für einen Zeitraum von 15 Minuten. In dieser Zeit hat es für den Angreifer den Anschein, als ob der Rechner vom Netz getrennt sei. Somit wird das Angriffsziel in der Regel uninteressant. Anhand der Logfiles `/var/log/fail2ban.log` und `/var/log/auth.log` waren täglich etwa fünf bis zehn Loginversuche mit zufälligen Login-Namen, d. h. Wörterbuchangriffe, erkennbar. Durch die Beschränkung auf sechs Loginversuche konnte deren Erfolgswahrscheinlichkeit wesentlich gemindert werden.

Datentransfer im D-Grid und ferngesteuerte Job-Ausführung: PIC-MC-Simulationen sind nicht nur rechenintensiv, sondern erzeugen je nach Modellgröße auch Ergebnisdaten mit erheblichem Speicherverbrauch. Insbesondere bei 3D-Plasmamodellen kann der Speicherverbrauch der Ergebnisdaten innerhalb weniger Tage Rechenzeit in die Größenordnung von 100 GB gelangen. Bei einer 30 Mbit-Leitung, die derzeit häufig für externe Netzwerkverbindungen zum Einsatz kommt, gelangt dann der Zeitbedarf für die Übertragung aller Daten in dieselbe Größenordnung wie die eigentliche Rechenzeit. Daher sind intelligente Lösungen gefragt, die entweder eine differentielle Synchronisierung der Datenbestände oder einen Zugriff auf Teilmengen der Ergebnisdateien on demand erlauben. Im Rahmen von PT-Grid wurden die folgenden Methoden getestet:

- Daten-Rücktransfer via GSIFTP: Diese Methode wird seitens Globus Toolkit sowie dem auf Globus Toolkit aufsetzenden Scheduler der Technischen Universität Dortmund verwendet. In der Jobbeschreibungdatei wird hierbei eine URL⁴⁵ des aufrufenden Rechners angegeben, zu der die Ergebnisdateien zurücktransferiert werden sollen. Problematisch an dieser Vorgehensweise ist, dass der aufrufende Rechner hierfür mit einem FQDN im Netz erreichbar sein muss, was für die wenigsten der praktisch eingesetzten Arbeitsplatzrechner der Fall sein dürfte. Zudem gibt es keine interaktiven Auswahlmöglichkeiten bezüglich des Rücktransfers. Standardmäßig werden z. B. alle Ergebnisdateien in ein Archiv gepackt und dieses via GSIFTP zurücktransferiert. Bei Dateigrößen von insgesamt einigen 10 GB ist dies nicht praktikabel.
- GSISCP: Das Tool GSISCP ist ein abgewandeltes Secure Copy (SCP) bei dem statt eines üblichen SSH-Zertifikats ein Grid-Zertifikat verwendet wird. Sofern der Datenpfad auf dem Grid-Rechner bekannt ist, kann man dieses Tool für einfache Kopieraktionen verwenden. Der Arbeitsplatzrechner muss dafür nicht im Internet mit externer IP-Adresse sichtbar sein. Ein Beispiel der Aufrufsyntax ist `gsiscp -P 2222 globus.bfg.uni-freiburg.de:/scratch/my-workspace/datei.tgz ..`
- RSYNC: Das Tool RSYNC dient zum Synchronisieren von Verzeichnissen auf gegebenenfalls unterschiedlichen, via Netzwerk miteinander verbundenen Rechnern. Im Normalfall nutzt RSYNC zum Verbinden auf einem Fremdrechner das Tool SSH, was in einer Grid-Infrastruktur nicht funktioniert. Mittels einer speziellen Aufrufsyntax kann man erreichen, dass stattdessen das Tool GSISSSH verwendet wird: `rsync -av -delete -rsh="gsissh -p 2222" globus.bfg.uni-freiburg.de:/scratch/my-work-space/results/ results`. Mit diesem Befehl wird ein differentielles Backup aller Daten aus dem Verzeichnis des Grid-Rechners `./results/` und dem Verzeichnis `./results/` auf dem lokalen Arbeitsplatzrechner durchgeführt. Während eines mehrtägigen Simulationslaufes kann dieser Befehl jeweils über Nacht ausgeführt werden, um am nächsten Morgen aktualisierte Zwischenergebnisse lokal verfügbar zu haben.
- Mounten eines Grid-Verzeichnisses mit SSHFS: Mit Hilfe des Tools SSHFS kann man ein Verzeichnis auf einem externen Grid-Rechner einfach auf dem lokalen Rechner mounten. Hierzu ist die Installation des Tools SSHFS sowie des Kernelmoduls FUSE⁴⁶ erforderlich. Der Verzeichnisinhalt eines derart gemounteten Verzeichnisses

⁴⁵URL: Uniform Resource Locator; einheitlicher Quellenanzeiger

⁴⁶FUSE: Filesystem in Userspace

lässt sich jederzeit schnell und ohne großen Datenoverhead anzeigen. Gezielt ausgewählte Ergebnisdateien werden on demand übertragen. Die Aufrufsyntax mit für den Anwendungszweck des Fraunhofer IST optimierten Optionen lautet:

```
sshfs -o ServerAliveInterval=15 -o reconnect -o ssh_command=gsissh  
-p 2222 globus.bfg.uni-freiburg.de:/scratch/my-workspace/results  
MyMountPoint/.
```

Mit der Option `-o ServerAliveInterval` wird zu bestimmten Zeitintervallen ein Testdatenpaket zwischen den Rechnern herumgeschickt, um die Verbindung auch bei längerer Inaktivität aufrechtzuerhalten. Die Option `-o reconnect` sorgt dafür, dass die Verbindung bei temporären Netzwerkproblemen hinterher automatisch wiederhergestellt wird. Der Mount wird mit `fusermount -u MyMountPoint/` wieder aufgelöst.

Erstellung einer webbasierten Benutzeroberfläche: In Abstimmung mit den Projektpartnern wurde entschieden, die Entwicklung von Benutzeroberflächen für die Teilprojekte basierend auf dem JAVA-Portlet-Standard durchzuführen. Bei Portlets handelt es sich um webbasierte JAVA-Applikationen, die entweder als Stand-alone-Anwendung oder innerhalb einer Portalsoftware zum Einsatz kommen können. Die Auswahl der Portalsoftware fiel auf Vorschlag der GNS Systems GmbH und in Abstimmung innerhalb des Projekts auf Liferay in der Version 5.2.3. Liferay beinhaltet Groupware-Funktionalitäten, wie z. B. Benutzeradministration und ein integriertes Wiki. Auf diesen Funktionalitäten basiert auch das am INP Greifswald realisierte PT-Grid-Portal. Hingegen beinhalten die eingebetteten Portlets die Benutzeroberflächen für die jeweiligen Simulationsmodelle der Teilprojekte.

Die entwickelten Portlets setzen auf die Entwicklungsumgebung Google Web Toolkit (GWT) auf. Dieses Toolkit basiert zunächst auf Java und bietet dem Entwickler eine Reihe an vordefinierten, grafischen Steuerelementen, sogenannte Controls. Zur Darstellung in einem Webbrowser wird der Java-Code durch einen in GWT integrierten Cross-Compiler in JavaScript umgesetzt. Hierbei wird den jeweiligen Darstellungsbesonderheiten unterschiedlicher Webbrowser Rechnung getragen. GWT-Portlets sind somit mit einer Vielzahl unterschiedlicher Webbrowser kompatibel. Dem Entwickler entsteht dadurch kein zusätzlicher Aufwand.

Am Fraunhofer IST wurde ein GWT-Portlet in einer Testumgebung auf der unter ptgrid.ist.fraunhofer.de erreichbaren virtuellen Maschine für die PIC-MC-Simulationsumgebung implementiert. Die Benutzeroberfläche beinhaltet vier Registerkarten mit den folgenden Funktionen:

- **Templates:** Diese in Abbildung 60 links gezeigte Registerkarte dient zur Auswahl des Simulationsdatensatzes. Sie bietet eine Reihe von Demonstrationsmodellfällen

inklusive illustrativer Abbildungen zur Auswahl an. Ein angemeldeter Benutzer kann zudem aus einer Liste von selbst angelegten Simulationsfällen auswählen. Im Stand-alone-Betrieb des Portlets besteht auf der ersten Registerkarte die Möglichkeit, sich als Benutzer einzuloggen. Innerhalb der Portal-Software Liferay übernimmt das Portlet die Benutzerinformation des bereits in Liferay eingeloggten Benutzers.

- **Input Files:** In diesem Bereich sind die ASCII-Darstellungen aller Eingabedaten verfügbar. Für GMSH entwickelte Geometriedaten für die Reaktorgeometrie und für den Magnetsatz (optional) können hier hineinkopiert auf den Server hochgeladen werden. Die ASCII-Datei mit allen relevanten Modellparametern kann hier ebenfalls eingesehen werden. Es ist möglich, die ASCII-Datei direkt hier zu editieren. Allerdings ist die Eingabe der Modellparameter mit Hilfe der in der dritten Registerkarte verfügbaren Formulare weitaus komfortabler.
- **Specification:** In dieser Registerkarte (siehe Abbildung 60 rechts) erfolgen Eingabe und Anpassung der PIC-MC-Modellparameter. Die Struktur des Parametersatzes wird hier durch unterschiedliche Formulare wiedergegeben. Im oberen Formular erfolgt die Auswahl der Simulationsspezies (Gasarten etc.) sowie die Angabe einiger allgemeiner Simulationsparameter, wie z. B. die Zeitschrittweite und die zu rechnende physikalische Gesamtzeit. Weiterhin ist eine Auswahlmöglichkeit bezüglich der auszugebenden Zwischenergebnisse enthalten. Im mittleren Formular wird die Segmentierung des Simulationsgebiets in Subquader nebst Zellauflösungen und Randbedingungen vorgegeben. Im unteren Teil erfolgt schließlich die Definition der physikalischen Eigenschaften der durch die Modellgeometrie definierten Flächengruppen. Die Anzahl der Flächengruppen und deren Namensgebung orientiert sich dabei dynamisch an dem von GMSH erzeugten Meshfile, in dem diese Informationen bereits enthalten sind.
- **Simulation:** Die letzte Registerkarte beinhaltet eine Auflistung aller auf dem Server für den jeweiligen Benutzer sichtbaren Jobs. Diese können entweder noch laufen oder abgebrochen worden sein. Im letzteren Fall führt die PIC-MC-Software ein sogenanntes Checkpointing⁴⁷ durch, so dass der Berechnungsjob gegebenenfalls bei der zuletzt abgebrochenen Stelle fortgesetzt werden kann. Diese Möglichkeit ist auch in der Benutzeroberfläche implementiert. Etwaige Zwischenergebnisse werden neben jedem Job in einem Listeneintrag angezeigt und zum Download angeboten. Die Betrachtung der Zwischenergebnisse erfolgt dann auf dem lokalen Benutzerrechner

⁴⁷Checkpointing besteht im Wesentlichen in der Speicherung einer Momentaufnahme des aktuellen Zustands der Anwendung, um sie später für den Neustart im Falle eines Abbruchs zu verwenden.

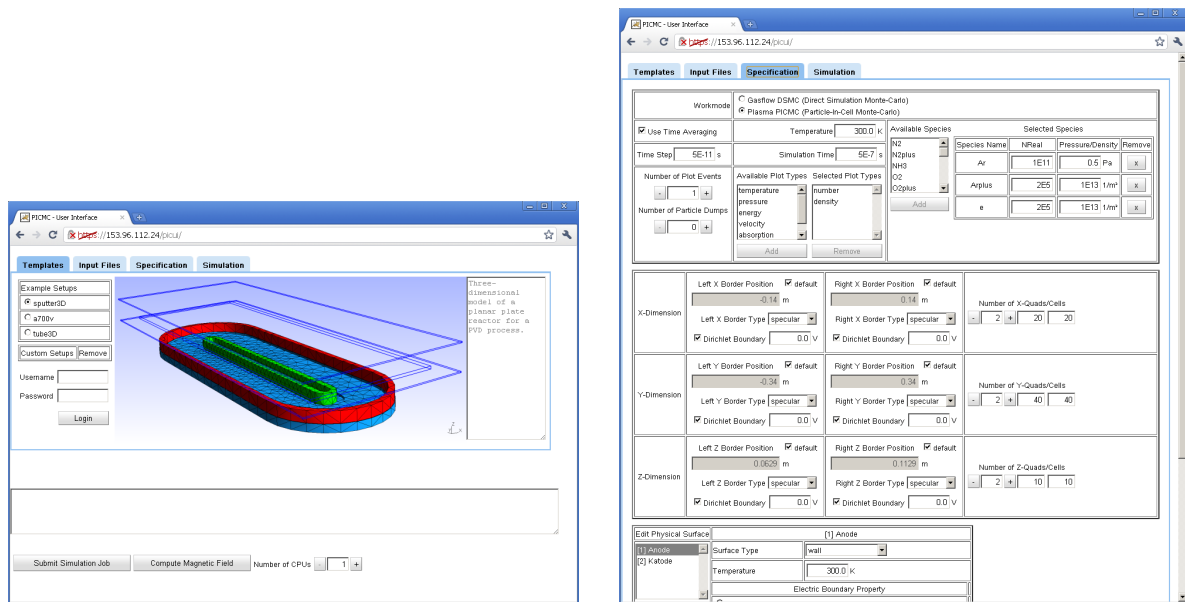


Abbildung 60: Einstiegsseite der Benutzeroberfläche für PIC-MC-Simulationen mit einer Auswahl von Demomodellfällen (links) sowie Registerkarte zur Eingabe der Modellspezifikationen (rechts)

mit einem geeigneten Betrachter. Im Falle der PIC-MC-Simulationsumgebung wird als Betrachter das Programm GMSH verwendet.

Die Benutzeroberfläche für PIC-MC-Simulationsrechnungen setzte im ersten Schritt nicht auf die D-Grid-Infrastruktur auf, sondern nutzte eine SSHFS-Verbindung zwischen dem Linux-Cluster am Fraunhofer IST und der virtuellen Maschine auf pt-grid.ist.fraunhofer.de. Eine gleichzeitige Entwicklung der Benutzeroberfläche zusammen mit zur Jobkontrolle benötigten D-Grid-Schnittstellen wäre ineffizient gewesen. Es hat sich gezeigt, dass beim ferngesteuerten Job-Submit auf D-Grid-Ressourcen erhebliche zusätzliche Problemstellungen zu bewältigen sind. Zudem starten die Jobs auf D-Grid-Ressourcen in der Regel nicht zeitnah, sondern erst nach einer gewissen Wartezeit, die in Einzelfällen mehrere Tage beträgt. Ein zeitnahes Testen der Benutzeroberfläche wäre unter diesen Bedingungen nicht möglich gewesen, wodurch der Entwicklungsprozess erheblich behindert worden wäre. Die Entwicklung einer projektübergreifenden Schnittstelle zum Remote-Jobsubmit auf D-Grid-Ressourcen erfolgte daher im Rahmen eines separaten Teilschritts, der im nächsten Abschnitt näher beschrieben wird.

Die Benutzeroberfläche für die PIC-MC-Simulationsumgebung wurde auf der DPG-Tagung 2011 in Kiel im Rahmen eines Vortrags im Symposium Plasmatechnologie-Grid sowie auf der D-Grid-Ergebniskonferenz 2012 in Bonn online vorgeführt (siehe Tabelle 1 und Abschnitt 11).

Erarbeitung von Methoden zum ferngesteuerten Submit paralleler Jobs: Für den Web-

Portal-Betrieb mussten zunächst Methoden erarbeitet werden, um Parallel-Jobs ferngesteuert auf externen D-Grid-Ressourcen starten und überwachen zu können. Weiterhin waren diejenigen D-Grid-Ressourcen zu identifizieren, auf denen eine Ausführung paralleler Jobs überhaupt effizient möglich ist. Insgesamt wurden im Projekt die folgenden Methoden zum externen Job-Submit implementiert und evaluiert:

- Datentransfer und Jobsubmit via GSISCP/GSISSH,
- Nutzung von `globusrun-ws` und einer XML-Datei im RSL-Format und
- Nutzung eines am Institut für Roboterforschung der Technischen Universität Dortmund entwickelten, auf Globus Toolkit aufsetzenden Meta-Schedulers.

Zum Testen einfacher Submits paralleler Jobs und zum Vergleich der Netzwerk-Performance unterschiedlicher Grid-Cluster wurde das einfache Testprogramm `mpitest` implementiert. Dieses kann via `mpiexec` N -mal gestartet werden und für eine Anzahl von M Runden ein Datenpaket im Tokenring-Verfahren zwischen allen N Programm-Instanzen herumschicken. Man erhält anschließend einen Report, aus dem die Verteilung der Prozesse auf die Grid-Cluster-Knoten und die gemessene Gesamtlaufzeit hervorgehen. Neben einer einfachen Aussage bezüglich der Netzwerk-Performance des Grid-Clusters kann somit insbesondere getestet werden, ob das Job-Submit-Skript in der beabsichtigten Weise funktioniert hat, d. h., ob die Prozesse in der vorgesehenen Weise auf die Knoten des Grid-Clusters verteilt wurden. Das gleiche Job-Submit-Skript funktionierte auf einigen Grid-Clustern, während es in anderen Fällen fehlschlug. Es wurden dann z. B. trotz unzureichender Anzahl von CPU-Kernen alle Prozesse nur auf einem Knoten gestartet. Inwieweit dies auf individuelle Konfigurationsprobleme oder andere technische Schwierigkeiten zurückzuführen ist, konnte nicht für alle D-Grid-Ressourcen abschließend geklärt werden.

Um einen parallelen Job-Submit basierend auf GSISSH durchführen zu können, wird ein an den jeweils vorliegenden Job-Scheduler angepasstes Submit-Skript benötigt. Ein an den PBS-Scheduler angepasstes Submit-Skript für das Testprogramm `mpitest` ist dem folgenden Programmausdruck 1 zu entnehmen.

Programmausdruck 1: PBS-Submit-Skript für das Testprogramm `mpitest`

```
1 #!/bin/bash
2 #PBS -l nodes=4:ppn=8,walltime=00:10:00
3 #PBS -e $HOME/$PBS_JOBID.stderr
4 #PBS -o $HOME/$PBS_JOBID.stdout
5
6 module load compiler/gnu/4.3
```

```
7 module load mpi/openmpi/1.4.3-gnu-4.3
8
9 mpirun -np 32 mpitest 100000
```

Hiermit werden insgesamt 32 Prozesse verteilt auf vier Knoten mit je 8 CPU-Kernen gestartet. Diese Aufteilung wird in den oberen, mit #PBS beginnenden Kommentarzeilen festgelegt. Mit den Kommandos `module load` werden Umgebungsvariablen zur Nutzung einer bestimmten auf der D-Grid-Ressource installierten MPI-Version gesetzt. Diese Vorgehensweise funktionierte in der Form auf allen Ressourcen des BWGrid. Auf anderen D-Grid-Ressourcen sind gegebenenfalls abweichende Anweisungen zur Definition der Umgebungsvariablen erforderlich.

Zunächst wurde die Verwendung des PBS-Skripts im Zusammenhang mit GSISSH/GSISCP in einer interaktiven Session, in der acht Prozesse auf einem Knoten gestartet wurden, demonstriert. Diese Session ist im Programmausdruck 2 dokumentiert.

Programmausdruck 2: Demonstration eines parallelen Job-Submits auf einer D-Grid-Ressource mittels GSISSH/GSISCP und eines PBS-Skripts

```
1 gsiscp -P 2222 mpitest mpitest-bwgrid.sh gtbw.grid.uni-mannheim.de:
2 mpitest
   100\% 10KB  10.5KB/s   00:00
3 mpitest-bwgrid.sh
   100\%  214    0.2KB/s   00:00
4 ap@ptgrid:~$ gsissh -p 2222 gtbw.grid.uni-mannheim.de \
5     '. ~/.bashrc && qsub mpitest-bwgrid.sh'
6 236440.intern1
7 ap@ptgrid:~$ gsissh -p 2222 gtbw.grid.uni-mannheim.de \
8     '. ~/.bashrc && cat result.txt'
9 Rank=1, Host={n060302}
10 Rank=2, Host={n060302}
11 Rank=3, Host={n060302}
12 Rank=4, Host={n060302}
13 Rank=5, Host={n060302}
14 Rank=6, Host={n060302}
15 Rank=7, Host={n060302}
16 Rank=0, Host={n060302}
17 ** Time for 100000 rounds: 1.17 s **
```

Hier erfolgt der Datentransfer mittels GSISCP in Zeile 1. Es werden das vorkompilierte Programm `mpitest` sowie das PBS-Aufrufskript aus Programmausdruck 1 (`mpitest-bwgrid.sh`) übertragen. In Zeile 4 erfolgt der eigentliche Job-Aufruf mittels `qsub`. Hierbei ist zu beachten, dass mit vorangeschaltetem `. ~/.bashrc` zunächst die für die interaktive Shell maßgeblichen Umgebungsvariablen geladen werden. Zeile 6 zeigt als einzige Ausga-

be des Qsub-Aufrufs den String 236440.intern1. Dies entspricht der auf dem Grid-Cluster vergebenen Job-ID. Für weitere Interaktionen mit diesem Job, z. B. mittels `qstat`, `qhold` usw., sollte die Job-ID zwischengespeichert werden. Schließlich kann auch die Anzeige der auf dem D-Grid-Cluster entstehenden Ausgabedatei, wie in Zeile 7 gezeigt, mittels `GSISsh` angestoßen werden.

Mit den hier gezeigten, auf `GSISsh`/`GSISCP` basierenden Werkzeugen konnte ein einfacher Adapter zum ferngesteuerten Job-Submit für den Portalbetrieb realisiert werden. Die Verwendung von `GSISsh`/`GSISCP` setzt lediglich die Existenz eines gültigen Proxy-Zertifikats voraus, welches gegebenenfalls portalseitig aus einem Grid- oder Robot-Zertifikat heraus erstellt werden muss. Da `SSH` und `SCP` eine einseitige Kommunikation verwenden, würde diese Vorgehensweise auch auf Portalrechnern funktionieren, die nicht von extern über einen `FQDN`, sondern z. B. nur innerhalb eines internen Firmennetzes ansprechbar sind und lediglich über eine gewöhnliche Internet-Anbindung nebst Firewall verfügen. Ein Nachteil dieses Verfahrens besteht darin, dass die Submit-Skripte für unterschiedliche D-Grid-Ressourcen an den jeweiligen Job-Scheduler und die jeweilige Installationsumgebung angepasst werden müssen.

An diesem Punkt sollte die Grid-Middleware Globus Toolkit ansetzen, die in der Version 4.0.8 zum Einsatz kam. Mit Hilfe integrierter Schnittstellen zu unterschiedlichen Job-Schedulern wurde eine auf allen Grid-Ressourcen einheitliche Vorgehensweise beim Job-Submit angestrebt. In der Praxis zeigte sich jedoch, dass dies bestenfalls für Single-Task-Jobs funktioniert, während für Parallel-Jobs auch beim Aufruf mit `globusrun-ws` Besonderheiten des jeweils auf der Grid-Ressource installierten Job-Schedulers beachtet werden müssen. Das Frontend `globusrun-ws` benötigt zum Submit eines nichttrivialen Jobs eine XML-formatierte Datei im `RSL`-Format. In dieser Datei werden der Name der ausführbaren Programmdatei, gegebenenfalls Programmargumente sowie optional Dateitransfervorgänge vor und nach der Jobausführung spezifiziert. Theoretisch können in dieser Datei auch `MPI`-parallele Jobs spezifiziert werden, indem beispielsweise folgende Zeilen eingefügt werden:

Programmausdruck 3: Dateiinhalt zur Spezifikation `MPI`-parallele Jobs

```
1 <count>32</count>
2 <jobType>MPI</jobType>
```

Tatsächlich zeigte sich jedoch, dass entweder die lokale `MPI`-Installation beim Jobstart nicht gefunden wird oder nicht gelinkt werden kann. In anderen Fällen ergab sich eine sinnlose Aufteilung der Prozesse auf dem Cluster, z. B. 32 Prozesse auf einen Knoten mit 8 CPU-Kernen. Nach längerer Recherche ergab sich als Lösung, mittels `globusrun-ws` einen Single-Task-Job in Form eines Aufrufskripts zu starten und in der `RSL`-Datei bereits

Parameter für den Job-Scheduler zur Errichtung einer Parallelumgebung zu spezifizieren. hierfür kann das Tag `<extensions>` innerhalb des RSL-Formats verwendet werden. Im Falle des Programms `mpitest` werden demnach eine RSL-Datei sowie ein Aufrufskript benötigt. Diese sind für BWGrid-Ressourcen und PBS als Job-Scheduler angepasst und im Programmausdruck 4 ersichtlich.

Programmausdruck 4: RSL-Datei und Shellskript zum Aufruf des Programms `mpitest` via `globusrun-ws`

```

1 ==> RSL-Datei mpi_para.xml <==
2
3 <job>
4   <executable>/bin/bash</executable>
5   <argument>${GLOBUS_USER_HOME}/mpi_para.sh</argument>
6   <stdout>${GLOBUS_USER_HOME}/mpi_para.stdout</stdout>
7   <stderr>${GLOBUS_USER_HOME}/mpi_para.stderr</stderr>
8   <count>1</count>
9   <maxWallTime>2</maxWallTime>
10  <jobType>single</jobType>
11  <fileStageIn>
12    <transfer>
13      <sourceUrl>gsiftp://ptgrid.ist.fraunhofer.de/home/ap/mpi_para.sh
14      </sourceUrl>
15      <destinationUrl>file:///${GLOBUS_USER_HOME}/mpi_para.sh</
16        destinationUrl>
17    </transfer>
18    <transfer>
19      <sourceUrl>gsiftp://ptgrid.ist.fraunhofer.de/home/ap/mpitest</
20        sourceUrl>
21      <destinationUrl>file:///${GLOBUS_USER_HOME}/mpitest</
22        destinationUrl>
23    </transfer>
24  </fileStageIn>
25  <fileStageOut>
26    <transfer>
27      <sourceUrl>file:///${GLOBUS_USER_HOME}/result.txt</sourceUrl>
28      <destinationUrl>gsiftp://ptgrid.ist.fraunhofer.de/tmp/result.txt
29      </destinationUrl>
30    </transfer>
31  </fileStageOut>
32  <fileCleanUp>
33    <deletion>
34      <file>file:///${GLOBUS_USER_HOME}/mpitest</file>
35    </deletion>

```

```

33     <deletion>
34         <file>file:///${GLOBUS_USER_HOME}/mpi_para.sh</file>
35     </deletion>
36 </fileCleanUp>
37 <extensions>
38     <nodes>2:ppn=5</nodes>
39 </extensions>
40 </job>
41
42 ==> Shell-Skript mpi_para.sh <==
43
44 #!/bin/bash
45
46 . /etc/profile
47 . ~/.bashrc
48
49 module load compiler/gnu/4.3
50 module load mpi/openmpi/1.4.3-gnu-4.3
51
52 NPROCS='cat ${PBS_MACHINEFILE} | wc -l'
53 mpiexec -np $NPROCS mpitest 100000
54
55 echo "**** Finished mpitest on " `"/bin/date`
56 exit 0

```

Das entscheidende Detail in der RSL-Datei steht in den Zeilen 37 bis 39. Hier werden dem PBS-Jobscheduler die Anzahl der Knoten und die Anzahl von Prozessen pro Knoten als Parameter mitgegeben. Beim Aufruf mittels `globusrun-ws` werden zunächst die Skript-Datei `mpi_para.sh` sowie das kompilierte Programm `mpitest` via GSIFTP auf den Grid-Rechner übertragen (`<fileStageIn>...`). Anschließend wird auf dem Grid-Rechner der Bash-Interpreter mit dem Aufrufskript als Argument aufgerufen. Innerhalb des Skripts wird anhand der Einträge in `$PBS_MACHINEFILE` erneut die Anzahl der Prozesse ermittelt und das Programm `mpitest` entsprechend oft gestartet. Die Ergebnisdatei wird innerhalb des Tags `<fileStageOut>...` ins Verzeichnis `/tmp` des lokalen Rechners kopiert. Anschließend werden die übertragenen Dateien auf dem Grid-Rechner gelöscht. Mit diesem Setup wurde die in der Auflistung 5 dargestellte Beispielsession auf dem D-Grid-Rechner der Universität Mannheim durchgeführt.

Programmausdruck 5: Beispielsession auf dem D-Grid-Rechner der Universität Mannheim

```

1 ap@ptgrid:~$ globusrun-ws -submit -F gtbw.grid.uni-mannheim.de \
2         -Ft PBS -s -f mpi_para.xml
3 Delegating user credentials...Done.

```

```
4 Submitting job...Done.
5 Job ID: uuid:63fcf754-57eb-11e1-b5de-005056a90020
6 Termination time: 02/16/2012 15:40 GMT
7 Current job state: StageIn
8 Current job state: Pending
9 Current job state: Active
10 **** Finished mpitest on Mi 15. Feb 16:35:01 CET 2012
11 Current job state: StageOut
12 Current job state: CleanUp-Hold
13 Current job state: CleanUp
14 Current job state: Done
15 Destroying job...Done.
16 Cleaning up any delegated credentials...Done.
17 ap@ptgrid:~$ cat /tmp/result.txt
18 Rank=1, Host={n060406}
19 Rank=2, Host={n060406}
20 Rank=3, Host={n060406}
21 Rank=4, Host={n060406}
22 Rank=5, Host={n060211}
23 Rank=6, Host={n060211}
24 Rank=7, Host={n060211}
25 Rank=8, Host={n060211}
26 Rank=9, Host={n060211}
27 Rank=0, Host={n060406}
28 ** Time for 100000 rounds: 1.64 s **
```

Dieses Beispiel zeigt den funktionierenden Job-Submit eines Parallelprozesses unter Verwendung von `globusrun-ws`. Es ist jedoch anzumerken, dass in der RSL-Datei explizit Parameter für den PBS-Jobscheduler spezifiziert und im Aufrufskript spezielle Befehle zum Setzen benötigter Umgebungsvariablen enthalten sein müssen. Die via GSIFTP durchgeführten Dateiübertragungsvorgänge setzen voraus, dass der aufrufende Rechner extern über einen FQDN angesprochen werden kann. Dies ist bei der vorher angesprochenen Methode via GSISSH/GSISCP nicht erforderlich. Damit erfordert `globusrun-ws` gegenüber dem GSISSH/GSISCP-Verfahren einen deutlich erhöhten Aufwand, und die anfangs angesprochene Unabhängigkeit des Submit-Verfahrens von der jeweiligen Grid-Ressource wird in der Praxis nicht erreicht. Aus der Verwendung von Globus Toolkit gegenüber dem einfacheren GSISSH/GSISCP ergibt sich somit kein Mehrwert außer in den Fällen, in denen eine D-Grid-Ressource explizit nur über eine Globus-Toolkit-Schnittstelle ansprechbar ist. Inwieweit in späteren Versionen von Globus Toolkit die Standardisierung der Job-Submit-Schnittstelle weiter vorangetrieben wurde, konnte im Rahmen des Projekts PT-Grid nicht evaluiert werden.

Die dritte untersuchte Methode zur ferngesteuerten Job-Ausführung besteht in der Verwendung des am Institut für Roboterforschung der Technischen Universität Dortmund entwickelten Meta-Schedulers. Dieses Tool setzt programmtechnisch auf der Globus-Toolkit-Infrastruktur auf, und die Vorgehensweise ist zunächst ähnlich wie bei Globus Toolkit. Auch hier wird eine XML-formatierte Job-Beschreibungsdatei benötigt. Allerdings wird als Schema die Job Submission Description Language (JSDL) verwendet. Im Gegensatz zu den RSL-Dateien für `globusrun-ws` gibt es hierbei zwei wesentliche Erweiterungen:

- Anstelle einer einzelnen D-Grid-Ressource gibt man in der JSDL-Datei eine Liste von sogenannten Candidate-Hosts an. Dabei werden sogenannte Named Hosts verwendet, deren Schreibweise von den üblicherweise verwendeten URLs abweicht. Werden mehrere Candidate-Hosts angegeben, kann der Meta-Scheduler prinzipiell selbsttätig entscheiden, auf welcher Ressource der Job gestartet wird.
- Zur Datenübertragung kommt das am Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin entwickelte Software GNDMS zum Einsatz, wie im Abschnitt 6.1.1.4 dargestellt. Dieses System ist für die sichere Übertragung großer Datenmengen zwischen HPC-Ressourcen konzipiert.

Im Rahmen des Teilprojekts 3 wurde in Zusammenarbeit des Fraunhofer IST mit der GNS Systems GmbH und dem Institut für Roboterforschung (IRF) der Technischen Universität Dortmund der Meta-Scheduler im Zusammenhang mit der PIC-MC-Simulationssoftware auf einem Grid-Cluster am IRF getestet. Gegenüber den bereits erhöhten Anforderungen von Globus Toolkit an die Computing-Infrastruktur kommen hierbei weitere Hürden hinzu, die einem breiteren Einsatz des Meta-Schedulers für das Teilprojekt 3 im Wege standen:

- Auf den Candidate Hosts muss eine Server-Komponente des Meta-Schedulers installiert sein. Dadurch reduzierte sich die Auswahl möglicher Compute-Ressourcen auf eine relativ kleine Anzahl. Auf den BWGrid-Clustern, die sich innerhalb des D-Grids als besonders geeignet für Parallel-Jobs herausgestellt haben, konnte der Scheduler-Server während der Projektlaufzeit z. B. nicht installiert werden. Der an der Technischen Universität Dortmund für die Tests bereitgestellte Cluster war nur eingeschränkt für Parallelrechnungen geeignet, da beispielsweise eine Verteilung der Parallelprozesse auf mehrere Clusterknoten an Konfigurationsproblemen scheiterte.
- Zusätzlich muss während der Jobausführung eine Serverkomponente des GNDMS-Systems zum Datentransfer auf einem weiteren Server – in diesem Falle beim

Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin – online sein. Die Einbeziehung dreier örtlich voneinander getrennter Server für einen Job-Submit hat sich als störanfällig erwiesen.

- Die Tests mit dem Meta-Scheduler beschränkten sich auf Daten-Stage-In, Jobausführung und Stage-Out des Ergebnisverzeichnisses in Form einer gepackten Archivdatei. Funktionen zur Jobüberwachung, etwa zum Abruf von Zwischenergebnissen oder zum Anhalten und Neustarten des Jobs mit veränderten Parametern, konnten während der Projektlaufzeit mit dem Meta-Scheduler nicht realisiert werden. Insofern war die Praxistauglichkeit dieser Versuche stark eingeschränkt, und der mit dem Meta-Scheduler erzielbare Mehrwert war fraglich.
- Die Verwendung der JAVA-basierten Scheduler-Client-Komponente gestaltete sich seitens der Entwicklung als recht umständlich. Neben dem bereits relativ komplexen JSDL-Dateiformat müssen alle für Globus Toolkit relevanten JAVA-Klassen in der CLASSPATH-Umgebungsvariable gelistet werden. Während der gesamten Job-Laufzeit liegt die RAM-Belegung alleine des Scheduler-Clients zwischen 120 und 200 MB, was schwer nachzuvollziehen ist und im Falle eines Portalservers mit mehreren Nutzern, die jeweils mehrere Jobs ausführen, schnell zu Speicherengpässen führen würde.

Identifikation geeigneter D-Grid-Ressourcen für die Ausführung MPI-paralleler Jobs:

Anhand der D-Grid-Ressourcenliste wurden unterschiedliche Grid-Cluster bezüglich ihrer Eignung für den Anwendungszweck des Teilprojektes 3, d. h. MPI-parallele PIC-MC-Plasmasimulation, evaluiert. Seitens der am Fraunhofer IST entwickelten PIC-MC-Simulationsumgebung bestehen diesbezüglich die folgenden Anforderungen:

- Die Parallel-Library OpenMPI ist in einer geeigneten Version installiert.
- Die Konfiguration der Grid-Engine (PBS etc.) erlaubt das Starten paralleler Jobs und gewährleistet eine korrekte Verteilung der Parallelprozesse auf den Grid-Knoten.
- Die verwendete Netzwerkschnittstelle ist hinreichend schnell.

Um die prinzipielle Ausführbarkeit MPI-paralleler Applikationen und die Netzwerk-Performance zu testen, wurde das Testprogramm mpitest herangezogen. Mit entweder 8 oder 32 Parallelprozessen wurde auf verschiedenen Grid-Clustern die Zeit für 100000-maliges Herumschicken eines Datenpakets im Tokenring-Verfahren gemessen. Die Ergebnisse sind in Tabelle 4 zusammengestellt.

Tabelle 4: Ergebnisse der Laufzeittests des Programms mpitest auf unterschiedlichen Grid-Ressourcen

Grid-Cluster	Netzwerk	Scheduler	Anzahl der Knoten	Prozesse pro Knoten	Prozesse insgesamt	Laufzeit [s]
IST-Linux-Cluster	GBit	-	2	4	8	9.5
			4	8	32	15.45
			1	32	32	5.56
Uni Mannheim gtbw.grid.uni-mannheim.de	InfiniBand	PBS	32	1	32	7.13
			4	8	32	5.28
			8	1	8	1.8
			1	8	8	1.2
HLRS Stuttgart gridway.dgrid.hls.de	InfiniBand	PBS	8	1	8	1.5
			32	1	32	7.6
Uni Freiburg globus.bfg.uni-freiburg.de	InfiniBand	PBS	8	1	8	1.8
			32	1	32	8.04
Uni Esslingen grid01.hs-esslingen.de	GBit	PBS	8	1	8	10.7
			32	1	32	83.2
LRZ München lxgt2.lrz-muenchen.de	Myrinet	SGE	1	8	8	7.0
TU Dortmund udo.gt01.grid.uni-dortmund.de	100 MBit	PBS	8	1	8	194.3
	GBit		3	2-3	8	93.9
TU Dortmund ptgrid.it.irf.tu-dortmund.de	GBit	PBS	3	2-3	8	30.5
TU Dortmund ptgrid.it.irf.tu-dortmund.de	GBit	PBS	1	8	8	1.5

Bezüglich der Durchführung der Tests gibt es die folgenden Anmerkungen. Der IST-Cluster umfasst vier Maschinen mit je 48 CPU-Kernen (AMD 6172, 12-Core) und verwendet Gigabit-Ethernet als Netzwerkschnittstelle. OpenMPI nutzt die Netzwerkschnittstelle nur dann, wenn die Prozesse auf unterschiedlichen Rechnern liegen. Für Prozesse auf demselben Rechner wird das wesentlich schnellere Loopback-Device genutzt.

Tabelle 4 nur einen relativ kleinen Ausschnitt der im D-Grid gelisteten Ressourcen. Die anderen Ressourcen waren entweder für die VO „ptgrid“ nicht ansprechbar oder aufgrund ihrer Konfiguration für die Ausführung MPI-paralleler Jobs ungeeignet. Hierbei zeigen die vier BWGrid-Cluster aus Mannheim, Freiburg, Esslingen und Stuttgart eine sehr einheitliche Konfiguration und vielversprechende Performance im Vergleich zu den anderen Grid-Ressourcen. Der Cluster `udo.gt01.grid.uni-dortmund.de` der Technischen Universität Dortmund besteht aus virtuellen Maschinen mit jeweils drei CPUs pro Knoten. Während der Tests erfolgte eine Umstellung der Netzwerkschnittstelle von 100-MBit- auf Gigabit-Ethernet. Bei `ptgrid.it.irf.tu-dortmund.de` handelt es sich um einen Testcluster für das Projekt PT-Grid, der insbesondere für den Betrieb mit dem Meta-Scheduler der IRF konfiguriert war. Zur Projektlaufzeit bestand ein Konfigurationsproblem bezüglich der Verteilung der Prozesse auf mehrere Knoten. Daher gibt es hier nur ein Testergebnis für einen Knoten. Das gleiche Problem trat am LRZ München auf.

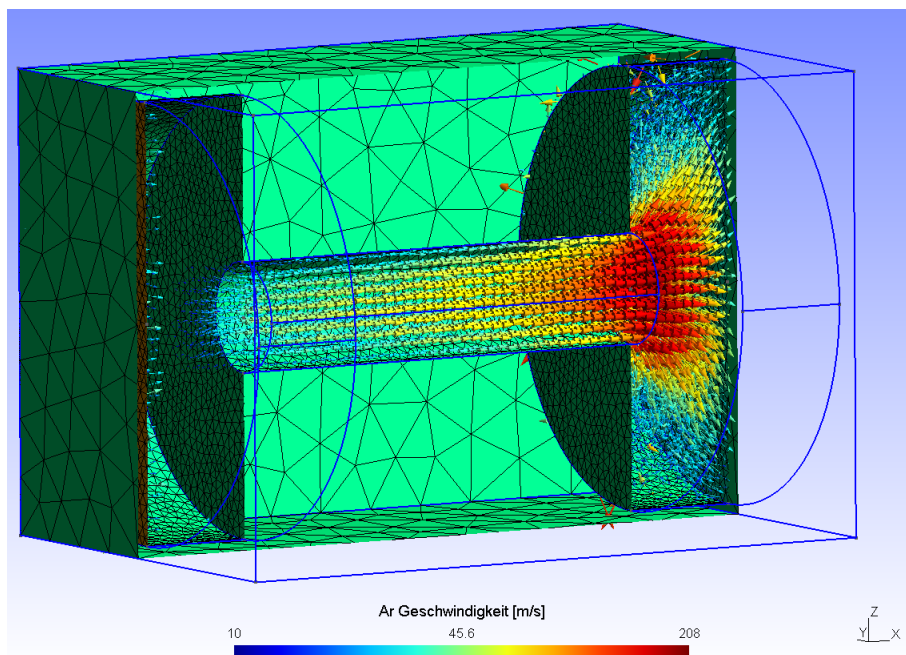


Abbildung 61: Für Grid-Benchmarks verwendetes DSMC-Modell einer Rohrströmung mit eingezeichneter Argon-Geschwindigkeitsverteilung

Zur weiteren Bewertung der Performance wurde ein DSMC-Modell einer Rohrströmung erstellt, das in Abbildung 61 dargestellt ist. Dieses Modell umfasst ein von Argon durchströmtes zylindrisches Rohr, an dem zwei größere Volumina für Gaseinlass und Gasaustritt angeschlossen sind. An der linken Eintrittsfläche befindet sich eine thermische Argon-Teilchenquelle mit einem Gleichgewichtsdruck von 0.8 Pa. Die Austrittsfläche an der rechten Seite entspricht einer Pumpfläche mit 20% Absorptionswahrscheinlichkeit.

Tabelle 5: Ergebnisse der Laufzeittests auf unterschiedlichen Grid-Ressourcen für das DSMC-Modell in Abbildung 61

Cluster	URL	Angeforderte CPUs	PIC-MC-Prozesse	Laufzeit [min]
IST Cluster	-	1 × 10	9	60
Uni Mannheim	gtbw.grid.uni-mannheim.de	2 × 8	9	43
HLRS Stuttgart	gridway.dgrid.hlrs.de	2 × 8	9	50
Uni Freiburg	globus.bfg.uni-freiburg.de	2 × 8	9	45
Uni Esslingen	grid01.hs-esslingen.de	2 × 8	9	42
TU Dortmund	udo-gt01.tu-dortmund.de	4 × 3	9	78

Das Gesamtvolumen der umschließenden Box beträgt $62 \times 42 \times 42 \text{ cm}^3$. Dieses wird im Modell in Zellen von 1 cm^3 Größe geteilt. Weiterhin wird das Modell in neun Subquader segmentiert, um damit eine Parallelisierung auf neun CPUs zu realisieren. Das simulierte physikalische Zeitintervall beträgt 400 ms. Bei einer Zeitschrittweite von 10^{-5} s ergeben sich 40000 DSMC-Iterationen.

Die Gesamtrechenzeit bei einer Aufteilung auf 9 CPUs liegt in der Größenordnung von einer Stunde auf dem Cluster des Fraunhofer IST und ist somit gut und unabhängig von kleineren Latenzen messbar. Wie aus Tabelle 5 ersichtlich ist, liegt die praktisch erzielbare Performance der D-Grid-Ressourcen trotz verteilten Rechnens teils deutlich über dem am Fraunhofer IST installierten Cluster. Das in Abbildung 61 dargestellte Ergebnis wurde durch Rechnung auf dem Grid-Rechner der Universität Mannheim bestimmt.

Schnittstelle für Grid-Submit von Jobs seitens der Benutzeroberfläche: Eine Schnittstelle für den Remote-Submit von Simulationsanwendungen aus dem Projektkonsortium auf D-Grid-Ressourcen muss zum einen die Besonderheiten der unterschiedlichen, im Konsortium vorhandenen Simulationstools berücksichtigen. Zum andern müssen Probleme bezüglich der teils recht heterogenen Struktur des D-Grid und der dazugehörigen Softwarekomponenten gelöst werden. Insofern war die Erstellung einer projektübergreifend nutzbaren Schnittstelle zum Job-Submit keine triviale Aufgabe. Zudem wurde das Anforderungsprofil mehrfach während der Projektlaufzeit entsprechend der mit dem D-Grid gemachten Erfahrungen angepasst und stand erst im letzten Projekthalbjahr vollständig fest.

Die seitens der GNS Systems GmbH erstellte Schnittstelle, deren Quellen im projektweiten Verzeichnisbaum unter <http://forge.it.irf.tu-dortmund.de/repos/projects/ptgrid/trunk/portal> unter CAEWeb hinterlegt sind,

setzt auf Webservices bzw. JAVA-Servlets auf. Ein Job-Submit kann somit aus jedem Portlet oder anderweitig erstellter Benutzeroberfläche heraus mit Hilfe einer HTTPS-Anfrage an den Portalrechner mit laufender Schnittstelle initiiert werden. Während der Jobausführung schickt die Schnittstelle XML-formatierte Statusmeldungen an den aufrufenden Prozess zurück, der nach Parsen der XML-Fragmente die Statusmeldungen in der Benutzeroberfläche anzeigen oder anderweitig verwenden kann.

Die Schnittstelle besteht somit aus zwei logischen Ebenen. In der ersten Ebene erfolgt die Kommunikation mit externen Prozessen via HTTPS mit Hilfe zweier JAVA-Servlets. Hierbei handelt es sich zum einen um das ShellExecServlet, welches HTTPS-Requests mit POST- oder GET-Daten entgegennimmt und mit diesen Informationen ein Shell-Skript (bash) aufruft. Weiterhin gibt es ein FileServlet, das automatisch aufgerufen wird, wenn die HTTPS-URL den Teilstring `results/` enthält, d. h., wenn Zugriff auf einen Ergebnisdatensatz gewünscht ist. Das FileServlet liefert daraufhin die gewünschten Ergebnisdaten aus dem jeweils relevanten Job-Verzeichnis an den anfragenden Prozess aus.

Unterhalb der JAVA-Servlets existieren je nach angesteuerter Grid-Ressource und in Abhängigkeit vom verwendeten Solver unterschiedliche Adapter (zweite logische Ebene). Bei diesen Adaptern handelt es sich jeweils um Unterverzeichnisse mit einer Sammlung von Shell-Skripten, die für den gewählten Simulationsfall unterschiedliche Aufgaben der Jobkontrolle auf den Grid-Ressourcen übernehmen. Die Adapter stehen unter `src/portal/CAEWeb/src.servlets/scripts/Adaptername/` im Quellenrepositorium. Jeder Adapter muss mindestens ein Shellskript namens `jobsubmit` zur Ausführung des Jobs auf der Grid-Ressource enthalten. In Abhängigkeit von etwaigen weiteren Ausstattungsmerkmalen kommen weitere Shell-Skripte hinzu. Eine Liste möglicher Ausstattungsmerkmale nebst Erklärungen ist in Tabelle 6 zusammengestellt.

AP4-TP3: Pilottests

Während und nach der Projektlaufzeit wurde die D-Grid-Infrastruktur vom Fraunhofer IST zur Durchführung rechenintensiver Plasmasimulation im Zusammenhang mit anderen öffentlich geförderten Projekten genutzt. Im Rahmen des von der Volkswagen-Stiftung geförderten Projekts „Cosmos“ (AZ.: I/83 234) werden unter anderem Magnetron-Entladungsplasmen bei hohen Plasmadichten untersucht. Hierbei treten in der Simulation Plasmafluktuationen, d. h. herumlaufende Plasmawellen auf. Ähnliche Phänomene werden seit kurzem von unterschiedlichen Forschungsgruppen bei gepulsten, hochdichten PVD-Entladungen⁴⁸ beobachtet. Mittels einer Langzeitsimulation auf dem Grid-Cluster der Universität Freiburg wurden diese Fluktuationen und deren Frequenzspektrum charakte-

⁴⁸PVD: physical vapor deposition; physikalische Gasphasenabscheidung

Tabelle 6: Mögliche Adapter-Ausstattungsmerkmale und zugehörige Shell-Skripte

Ausstattungsmerkmal	Skriptname	Bedeutung
–	jobsubmit	Die Fähigkeit, Job-Submits durchzuführen, ist die Minimalvoraussetzung jedes Adapters.
CANABORT	jobabort	Den Job durch Benutzereingriff abbrechen.
CANALTER	jobalter	Die Job-Parameter während der Laufzeit modifizieren. Im Detail beinhaltet dies (i) das Herunterfahren und Checkpointing des laufenden Jobs, (ii) das Übersenden eines geänderten Parametersatzes und (iii) den Neustart des Jobs. Das Checkpointing und das Neustarten vom Zwischenzustand muss dazu auch von der Solver-Software beherrscht werden.
CANHOLDRELEASE	jobhold / jobrelease	Mit jobhold wird ein Job, der sich noch in der Queue einer Grid-Engine befindet, zurückgehalten. Der Zweck kann z. B. sein, einen anderen Job mit höherer Priorität, der in der Queue weiter hinten steht, zuerst ausführen zu lassen. Bereits laufende Jobs können nicht mehr zurückgehalten werden. Mit jobrelease wird ein zurückgehaltener Job wieder freigegeben. Diese Funktionalität wird auf den Grid-Ressourcen von den üblich verwendeten Schedulingern, wie PBS oder Sun Grid Engine, umgesetzt.
HASINFO / NEEDSYNC	– / jobsync	Dieser Schalter zeigt zunächst die prinzipielle Verfügbarkeit von Zwischenergebnissen an. Falls zur Anzeige der Zwischenergebnisse Dateitransferaktionen erforderlich sind, muss zuvor das Skript jobsync angestoßen werden. Dies wird durch den weiteren Schalter NEEDSYNC angezeigt.

risiert.

Ferner werden im EU-Projekt „ORAMA“ halbleitende Oxidschichten hergestellt, charakterisiert und in deren Materialeigenschaften modelliert. Ziel ist die Bereitstellung von Materialien für transparente elektronische Bauteile. Im Falle der Herstellung oxidischer Leuchtdioden beim Projektpartner Osram Opto Semiconductor wurde der Abscheideprozess eines Silber-Rückseitenreflektors mittels Magnetron-Sputtern von Silber mit kombinierter RF/DC-Anregung analysiert. Je nach Wahl des RF-Anteils an der elektrischen Stromversorgung und anderer Prozessparameter resultiert aus dem Prozess ein mehr oder weniger starker Beschuss des Halbleiter-Bauelements mit Ionen. Hierdurch werden die Diodencharakteristiken messbar verschoben. Im Rahmen einer Parameterstudie sind die Änderungen an den Dioden-Vorwärtsspannungen für eine Reihe von Arbeitspunkten bekannt. Mittels 3D-PIC-MC-Plasmasimulation der Beschichtungsanordnung wurden diese Ergebnisse mit den modellierten Ionenenergie-Verteilungsfunktionen am Substrat gegenübergestellt. Hierfür wurden 3D-Plasmasimulationen für mehrere Arbeitspunkte im Rahmen mehrerer Jobs auf dem Grid-Cluster der Universität Mannheim durchgeführt. Ergebnisse der Untersuchungen der beiden Pilottest sind im Folgenden dargestellt.

Analyse von Plasmafluktuationen in 3D-PVD-Anordnungen: Für diese Untersuchungen wurde die in Abbildung 62 gezeigte Modellgeometrie herangezogen. Ein Sputtertarget ist von einer Anodenabschirmung mit kreisförmiger Öffnung umgeben. Auf der Rückseite des Sputtertargets und gegenüber der kreisförmigen Öffnung befindet sich ein kreisförmiger Magnetsatz, durch den das Entladungsplasma in Targetnähe gehalten und in eine torusförmige Form gezwungen wird. Für das Argonplasma bei einem Gesamtdruck von 0.5 Pa und einer Leistung (Sollwert) von 50 W wurden PIC-MC-Simulationen durchgeführt, die als Spezies Ar, Ar⁺, e⁻ berücksichtigen. Als Targetmaterial kam Titan mit einem Koeffizienten für ioneninduzierte Sekundärelektronen von 0.08. Die Modelldimensionen waren $\Delta X = \Delta Y = 100$ mm mit $NX = NY = 100$ Zellen, d. h., in X- und Y-Richtung wurden Zellgrößen von 1 mm verwendet. ΔZ betrug 90 mm (segmentiert in 5, 2.5, 2.5, 5, 25, 25, 25 mm) und die zugehörige Zellenanzahl $NZ = 120$ (segmentiert in 5, 20, 10, 10, 25, 25, 25). In Z-Richtung, d. h. senkrecht zum Sputtertarget, werden somit in Targetnähe stufenweise kleinere Zellen bis zu 0.125 mm verwendet, um die relativ dünne Plasmarandschicht besser numerisch auflösen zu können. Insgesamt wurden 1.2×10^6 Zellen verwendet, und die Zeitschrittweite der PIC-MC-Simulation betrug 5 ps.

Bei den Simulationen zeigte sich, dass das Plasma nicht in einem homogenen Torus brennt, sondern in Abhängigkeit von der Leistungsdichte und vom Totaldruck eine unterschiedliche Anzahl von propagierenden Plasmafluktuationen auftreten. Die Richtung der Propagation hängt von der Leistungsdichte ab. Bei sehr geringen Leistungen handelt es

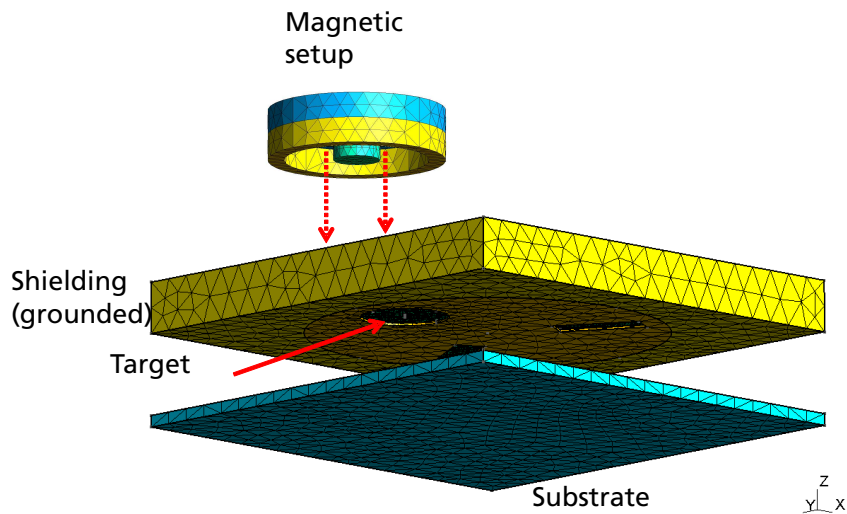


Abbildung 62: 3D-Modell einer zirkularen Magnetron-Entladung

sich um Ionisationswellen, die sich entgegengesetzt zur Laufrichtung der Elektronen bewegen. Bei höheren Leistungsdichten geraten dagegen die Ar^+ -Ionen selbst in eine Rotationsbewegung, die letztlich die Bewegung der Ionisationswellen dominiert, so dass bezüglich der Plasmafluktuationen eine Umkehr der Bewegungsrichtung eintritt.

Zur Analyse der auftretenden Frequenzen und des Langzeitverhaltens wurde eine Simulation über mehr als $50 \mu\text{s}$ bei einer Gesamtleistung von 50 W durchgeführt. Diese Leistungsdichte entspricht bereits realistischen experimentellen Plasmabedingungen. Aufgrund des Umfangs der Berechnung wurde dieser Simulations-Run auf dem BW-Grid-Cluster globus.bfg.uni-freiburg.de durchgeführt. Hierfür waren mehrere Jobs mit bis zu 10 Tagen Dauer und mit jeweils 72 CPU-Kernen erforderlich. Das entsprechende PBS-Aufrufskript ist im Programmausdruck 6 gezeigt.

Die Jobdauer von maximal 10 Tagen entspricht der maximalen Dauer von Jobs in der Job-Queue auf dem Freiburger Grid-Cluster. Längere Laufzeiten werden nicht akzeptiert. Da die PIC-MC-Software checkpoint-fähig ist, konnten jedoch längere Jobs mit Hilfe mehrerer hintereinandergeschalteter Jobs durchgeführt werden. Die Gesamtrechnenzeit lag in der Größenordnung von einem Monat bzw. 50000 CPU-Stunden.

Programmausdruck 6: PBS-Submit-Skript zur Durchführung der 3D-PIC-MC-Simulation einer 3"-PVD-Entladung

```

1 #!/bin/bash
2 #PBS -l nodes=9:ppn=8,walltime=240:00:00
3 #PBS -e $HOME/$PBS_JOBID.stderr
4 #PBS -o $HOME/$PBS_JOBID.stdout
5 #PBS -N Ti50-hires
6

```

```

7 BASENAME="Ti50-hires"
8 echo "Starting ${BASENAME}.par"
9
10
11 module load compiler/gnu/4.3
12 module load mpi/openmpi/1.4.3-gnu-4.3
13
14 #tar xjf picmc_grid.tar.bz2
15
16 WS=$(ws_find COSMOS)
17 cd $WS
18
19 export PICMCPATH=$HOME/picmc_GRID
20 export LD_LIBRARY_PATH=$LD_LIBRARY_PATH:$PICMCPATH/lib
21
22 mpirun -x LD_LIBRARY_PATH -x PICMCPATH -np 1 $PICMCPATH/bin/rvm -i
    $PICMCPATH \
23 ${BASENAME}_bfield.rd : -np 50 -x LD_LIBRARY_PATH $PICMCPATH/bin/bem
24
25 mpirun -x LD_LIBRARY_PATH -x PICMCPATH -np 1 $PICMCPATH/bin/rvm -i
    $PICMCPATH \
26 -l scr/master.r $BASENAME.par : -np 70 $PICMCPATH/bin/picmc
27
28 cd $HOME

```

In Abbildung 63 ist die berechnete Elektronendichteverteilung nach 50 μs dargestellt. Sie zeigt einen Torus mit etwa 18 Fluktuationen. Auf der Konferenz „Plasma Surface Engineering (PSE) 2012“ im September 2012 in Garmisch-Partenkirchen wurden diese Rechnungen zusammen mit Frequenzanalysen präsentiert. Die simulierten Phänomene finden qualitative Entsprechung in Hochgeschwindigkeitsaufnahmen von Hochleistungs-Impuls-Spitterentladungen [18–20], aber auch in DC-Entladungen wurden derartige Phänomene bereits experimentell gefunden [21]. Zur genaueren Analyse der auftretenden Frequenzen und der Abhängigkeiten von Prozessparametern dauern die Untersuchungen derzeit noch an, wobei weiterhin auf D-Grid-Ressourcen zurückgegriffen wird.

Dreidimensionale PIC-MC-Modellierung von RF/DC-Spitterplasmen: Im Rahmen des im 7. Forschungsrahmenprogramm (FP7) von der EU-Kommission geförderten Projekts „ORAMA“ (NMP3-LA-2010-246334) wurde ein Spitterprozess für Silber-Rückseitenspiegel auf Dünnschicht-LED-Strukturen basierend auf GaAlInN hinsichtlich des Ionenbeschusses der empfindlichen Halbleiterstrukturen untersucht. Als Spannungsversorgung kommt eine kombinierte RF-DC-Anregung zum Einsatz. An den Halbleiterstrukturen wirkt sich der Ionenbeschuss in einer Verschiebung der Strom-

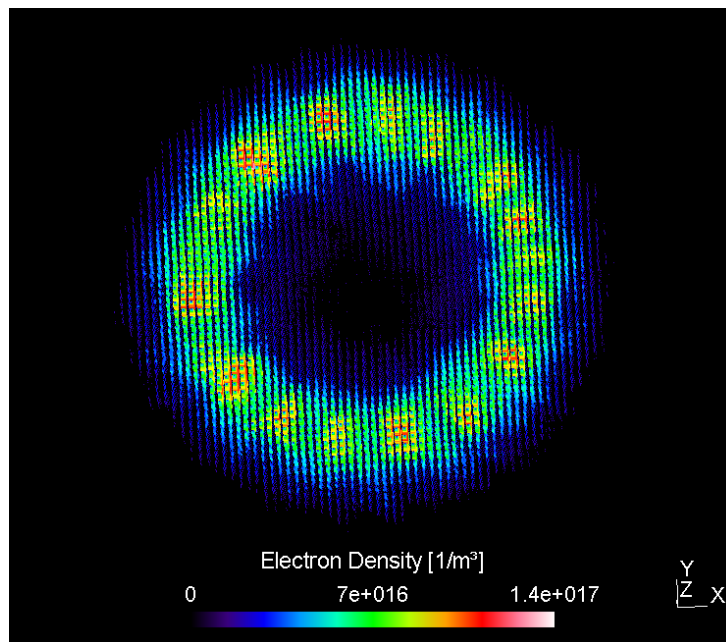


Abbildung 63: Gerechnetes Elektronendichteprofil bei 50 W Leistung nach 50 μ s mit sichtbaren Plasmaffluktionen

Spannungscharakteristik aus, die in Form einer Verschiebung ΔV_f der Vorwärtsspannung quantifiziert wird.

Wie in Abbildung 64 gezeigt, umfasst die Prozesskammer „Emerald Sputter Tool“ bei Osram Opto Semiconductor ein kreisförmiges Sputtertarget mit einem Durchmesser von 8 Zoll. Die Substrate befinden sich im unteren Bereich auf einem Drehteller und haben elektrisch eine variables Potential. Zwischen Sputtertarget und Substrat befindet sich eine Formblende, mit der der bei Drehtellern typische Abfall der Beschichtungsrate in radialer Richtung kompensiert wird. Die Kammerwand und die Formblende befinden sich auf Massepotential und stellen für die Sputterkathode die Anode dar.

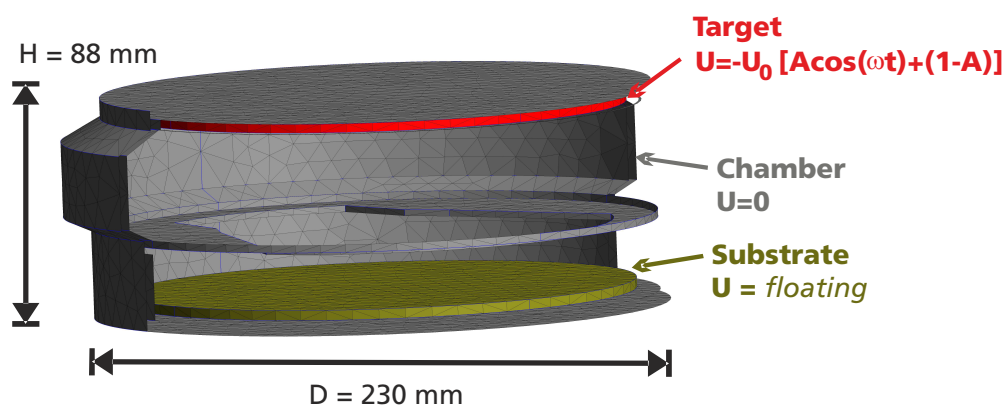


Abbildung 64: Modell des „Emerald Sputter Tools“ bei Osram Opto Semiconductor.

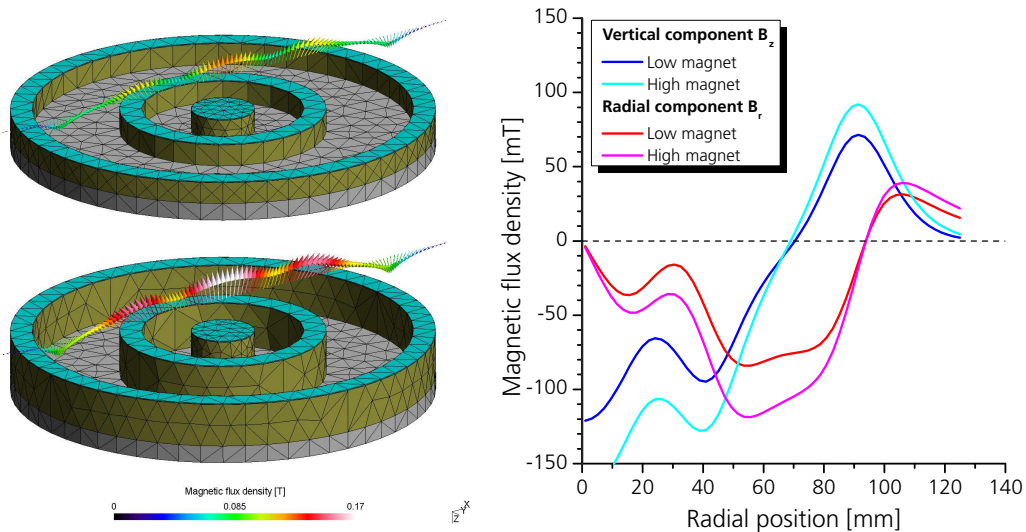


Abbildung 65: Zwei mögliche Magnetfeldkonfigurationen für das Sputtertarget (links) und berechnete radiale und vertikale Komponente der magnetischen Flussdichte (rechts)

Für den Magnetsatz können zwei unterschiedliche Konfigurationen verwendet werden, die in Abbildung 65 dargestellt sind. In beiden Fällen gibt es zwei gleichgepolte, innere Magnetringe und einen umgekehrt gepolten, äußeren Magnetring. Auf den Oberseiten der Magnetringe befindet sich ein jeweils 0.5 mm dickes, magnetisches Blech. Die spezielle Anordnung mit den drei Magnetringen führt zu einer Aufweitung des Bereichs mit nahezu parallelem Magnetfeld und dadurch zu einer Verbreiterung des Sputter-Erosionsgrabens.

In einer „Design-of-Experiments“-Studie wurden bei Osram Opto Semiconductor Silbersputterbeschichtungen auf LED-Strukturen mit unterschiedlichen Prozessparametern durchgeführt und die Änderung in der Vorwärtsspannung gemessen. Bei der Simulation von Sputterprozessen ist es nicht möglich, eine konstante Spannungsamplitude am Target vorzugeben, da die Targetspannung keine monotone Funktion der Entladungsleistung ist. Vielmehr wird ein Sollwert der Entladungsleistung vorgegeben, und die Targetspannung wird mit einem einfachen Proportionalregler so geregelt, dass in der Simulation die Sollleistung möglichst gut angenähert wird. Eine weitere Problematik besteht in der Abbildung der RF-DC-Überlagerung für einen vorgegebenen RF-Leistungsanteil f_{RF} , da zum Zeitpunkt der Durchführung der Simulationen nicht alle Details des Schaltnetzwerks bekannt waren. Der Ansatz für die zeitabhängige Targetspannung lautet $U(t) = -U_0 \{A \cos(\omega t) + (1 - A)\}$. Ohne detaillierte Kenntnis der Plasmaimpedanzen für den RF- und den DC-Anteil besteht die einfachste Annahme darin, dass der Leistungsanteil proportional zur jeweiligen Spannungsamplitude ist, also $P_{DC} \propto (1 - A)^2$ und $P_{RF} \propto A^2$ gelten. Damit kann der Parameter A als Funktion des RF-Leistungsanteils f_{RF} gemäß $A = \left(\sqrt{f_{RF} - f_{RF}^2} - f_{RF} \right) / (1 - 2f_{RF})$ für $f_{RF} \neq 0.5$ und $A = 0.5$ falls

Tabelle 7: In der Simulation untersuchten Parametersätze der „Design-of-Experiments“-Studie

Nr.	Leistung [W]	RF-Anteil [%]	Gesamtdruck [Pa]	Magnetfeld [g]	ΔV_f [mV]
P02	100	30	2.0	1000	4
P08	100	30	0.8	1500	114
P09	100	30	0.3	1000	185
P10	100	100	2.0	1500	129
P14	100	60	0.3	1000	49
P15	100	100	0.8	1000	229

$f_{RF} = 0.5$ angegeben werden.

Die in der Simulation untersuchten Parametersätze sind in Tabelle 7 zusammengestellt. Bei der 3D-Simulation des vergleichsweise großen Modells waren einige Kompromisse nötig, um eine handhabbare Rechenzeit zu gewährleisten. So wurde die Leistung in der Simulation um Faktor 10 reduziert, d. h., auf 10 W, da andernfalls die Simulationszeit pro Parametersatz im Bereich mehrerer Monate liegen würde. Die Modelldimensionen waren 252 mm in X - und in Y -Richtung und 88 mm in Z -Richtung. Die Zellauflösung betrug 2 mm in X - und Y -Richtung sowie 2, 1 und 0.5 mm in Z -Richtung mit feinerer Auflösung des Bereichs am Target. Insgesamt resultierten etwa 900000 Zellen. Die Zeitschrittweite der Simulation betrug 20 ps.

Mit diesen Einstellungen wurden die sechs in Tabelle 7 aufgeführten Testbedingungen in der Simulation nachgestellt, wobei Plasmadichten von maximal etwa 10^{16} m^{-3} erreicht wurden. Pro Simulationslauf wurden jeweils 32 CPUs alloziert. Die Rechnung erfolgt über eine Gesamtrechenzeit von insgesamt 14 Tagen. Als Computing-Ressource wurde der Grid-Cluster der Universität Mannheim gtbw.grid.uni-mannheim.de verwendet. Die maximale Joblaufzeit auf diesem Cluster beträgt zwei Tage. Daher mussten alle Jobs mehrfach kontrolliert, mit Checkpoint beendet und wieder neugestartet werden, wobei die Simulationen aufgrund des Checkpoints vom zuletzt zwischengespeicherten Zustand aus fortgesetzt wurden. Die Submit-Skripts entsprechen weitgehend dem Programmausdruck 6.

Als eine Besonderheit fiel auf, dass von den sechs Simulationsläufen in jedem Falle etwa 15 bis 20 GB an Ergebnisdaten anfielen. Insgesamt entstanden auf dem Grid-Cluster somit im Laufe der Simulationen gut 100 GB an Daten. Die Übertragung dieser Daten auf einen Rechner am Fraunhofer IST erfolgte in mehreren Intervallen mittels RSYNC nach dem im Arbeitspaket AP3-TP3 beschriebenen Verfahren. Die durchschnittliche Übertragungsrates vom Grid-Cluster ins Netz des Fraunhofer IST betrug zirka 2 MByte/s. Damit dauerte das

Übertragen der gesamten Datenmenge insgesamt etwa 14 Stunden. Da dieser Vorgang das Netzwerk des Fraunhofer IST stark belastete, wurden die Datenübertragungen auf Wunsch der IT-Abteilung des Fraunhofer IST in mehreren Intervallen in die Abendstunden bzw. auf das Wochenende verlegt. Somit wurde klar, dass sich die Entstehung und Übertragung großer Datenmengen im D-Grid als ernsthaftes Hindernis erweisen kann. Eine prinzipielle Grenze liegt vor, sobald die Zeit für die Datenübertragung die Rechenzeit übersteigt. In diesem Falle kann das D-Grid nicht sinnvoll genutzt werden. Eine erfolgreiche Grid-Nutzung beinhaltet somit auch gewisse Mindestanforderungen bezüglich der Bandbreite des Netzwerkanschlusses.

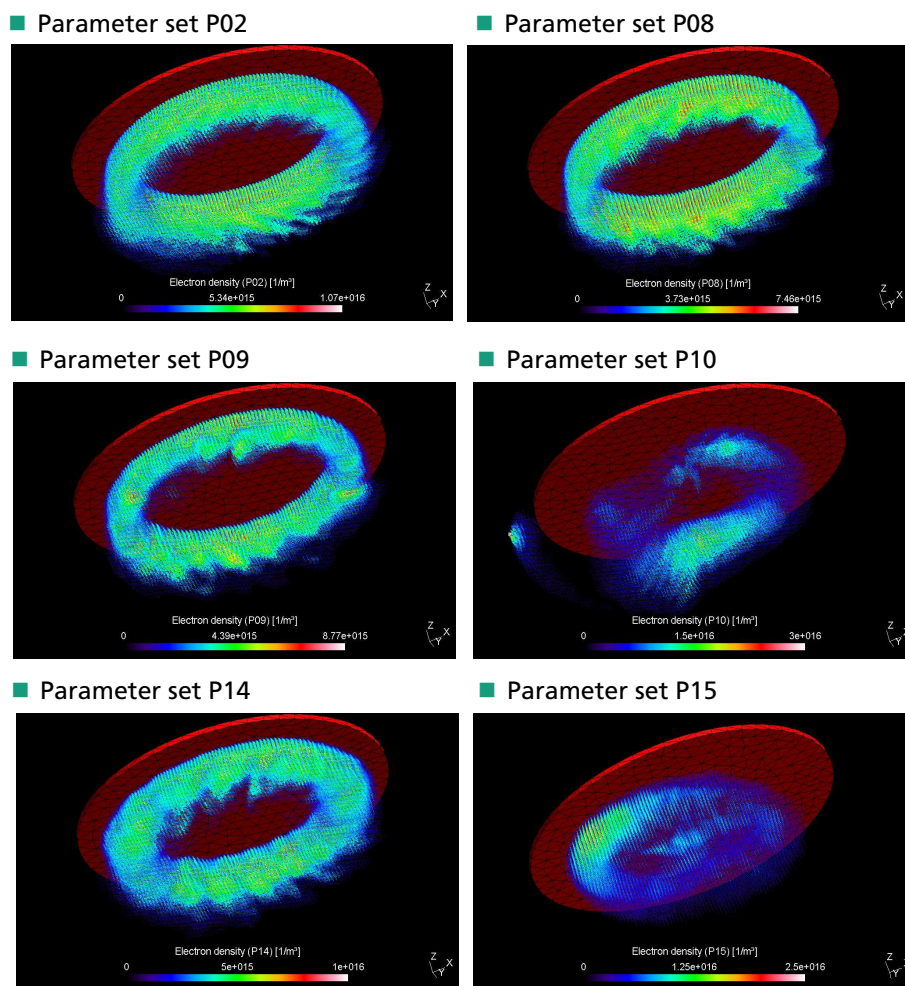


Abbildung 66: Gerechnete Elektronendichteverteilungen für die Parametersätze in Tabelle 7

In Abbildung 66 sind die gerechneten Elektronendichteverteilungen für die sechs in Tabelle 7 aufgeführten Parametersätze dargestellt. Die Plots sind jeweils über die letzten $0.5 \mu s$ des Simulationszeitraums zeitgemittelt. Wie in den Plasma-Visualisierungen anhand der Elektronendichte zu sehen ist, bildet das Plasma in den meisten Fällen einen Torus

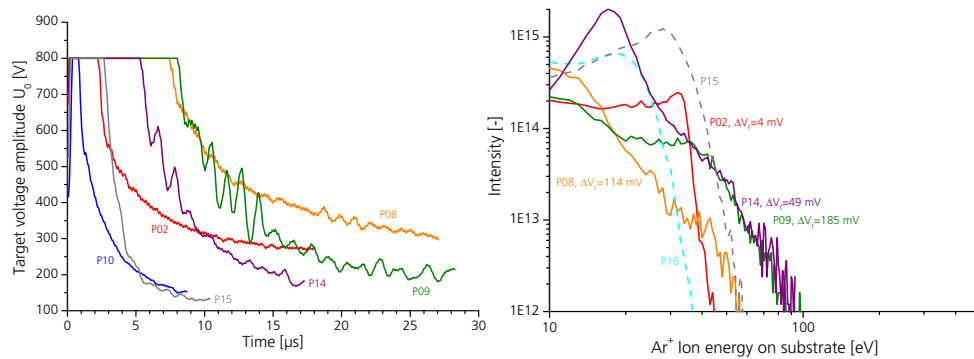


Abbildung 67: Zeitabhängiger Verlauf der Spannungsamplitude U_0 (links) und Ar^+ -Ionenenergie-Histogramme aus den Simulationsläufen für die Parametersätze in Tabelle 7

mit Plasmafluktuationen unterschiedlicher Wellenlänge aus. Für die Parametersätze P10 und P15 zeigten sich am Ende instabile Entladungen: Im Falle von P10 bildete sich am Kammerrand ein Hot Spot, und im Falle von P15 kollabiert die Plasmaentladung innerhalb des Plasmatorus.

In den Auswertungen in Abb. 67 wurden die instabilen Fälle nicht berücksichtigt und nur als gestrichelte Linie dargestellt. In den anderen Fällen zeigt sich eine gewisse Korrelation zwischen simulierter Ionenenergieverteilung und gemessener Plasmabeeinträchtigung, wobei zumindest die Grenzwerte mit niedrigster bzw. höchster Plasmabeeinträchtigung sinnvoll korreliert sind. Anhand der Daten konnte eine interessante Arbeitshypothese über die Ursache der vergleichsweise hohen Ionenenergien aufgestellt werden, die derzeit durch weitere Messungen und gegebenenfalls weitere Simulationen auf D-Grid-Ressourcen überprüft wird.

Die Ergebnisse wurden auf der Konferenz „4th International Symposium on Transparent Conductive Materials“ im Oktober 2012 auf Kreta vorgestellt. Eine Veröffentlichung ist nach weiterer Prüfung der Datenlage anhand von Messungen und gegebenenfalls weiteren Simulationen in Planung.

AP5-TP3: Abschließende Soll-Ist-Erfassung

Die Arbeiten im Teilprojekt 3 beinhalteten im Wesentlichen eine exemplarische Portierung einer parallelen, Particle-in-Cell-Monte-Carlo-Simulationsumgebung in die D-Grid-Infrastruktur, die Erstellung einer Benutzeroberfläche zur Bedienung dieser Software im Rahmen eines Web-Portals sowie Pilottests dieser Software auf D-Grid-Ressourcen zwecks Erfahrungsbildung hinsichtlich der Anwendbarkeit, des Laufzeitverhaltens und etwaig auftretender technischer Probleme. Es konnten alle Ziele erreicht werden. Lediglich bei den Pilottests erfolgte eine Verlagerung von industriell motivierten Anwendungen hin zu wissenschaftlichen Problemstellungen aus parallel laufenden, öffentlich geförderten Projek-

ten. Die Ursache dafür ist die ungeklärte rechtliche Situation bei der Anwendung von D-Grid-Ressourcen im Zusammenhang mit bilateraler, industrieller Auftragsforschung. Diese Problematik trat erst während der Projektlaufzeit in den Fokus. Die Zielerreichung kann anhand der einzelnen, im Folgenden aufgeführten Meilensteine (siehe Abbildung 99 im Anhang A.4) verifiziert werden.

Meilenstein 1 – D-Grid-Integration: Die Portierung der am Fraunhofer IST entwickelten, parallelen Simulationsumgebung auf die Parallelisierungsschnittstelle OpenMPI sowie die Ermöglichung der Ausführung auf entfernten Ressourcen mittels Grid-Scheduler bzw. via D-Grid-Middleware erfolgte plangemäß. Die hierbei erzielten Erfahrungen bezüglich Laufzeitverhalten im Vergleich zur vorherigen Version, die auf PVM als Parallelisierungsschnittstelle basierte, wurden auf der Konferenz PARA2010 im Juni 2010 in Reykjavik als Posterpräsentation vorgestellt und in der projektbezogenen Veröffentlichung [17] publiziert.

Meilenstein 2 – Oberfläche: Für die webbasierte Bedienung der PIC-MC-Software wurde eine auf dem Google Web Toolkit basierende Benutzeroberfläche erstellt, die das Editieren der sehr umfangreichen Modellparameter sowie eine interaktive Jobkontrolle von laufenden PIC-MC-Simulationsläufen mittels Webbrowser ermöglicht. Im Rahmen eines Vortrags auf der DPG-Tagung in Kiel im Jahre 2011 erfolgte eine Online-Vorführung dieser Benutzeroberfläche anhand einiger einfacher Beispiel-Simulationsmodelle. Bei der Schnittstelle zwischen Benutzeroberfläche und dem eigentlichen Rechencluster wurde im ersten Schritt eine proprietäre, auf den Linux-Cluster am Fraunhofer IST beschränkte Lösung implementiert, um den Fokus der Entwicklungsarbeit zunächst auf die Benutzeroberfläche legen zu können. Im zweiten Schritt wurde eine allgemeingültigere Schnittstelle erstellt und getestet, die eine ferngesteuerte Jobausführung mittels unterschiedlicher Job-Scheduler und via D-Grid-Middleware ermöglicht. Im zweiten Falle waren erhebliche technische Probleme zu bewältigen, die zur Antragsphase nicht absehbar waren. Insbesondere stellte sich heraus, dass nur ein relativ kleiner Teil der D-Grid-Ressourcen überhaupt zur Ausführung massiv paralleler Simulationsrechnungen geeignet ist. Hierdurch verzögerte sich die Erstellung der verallgemeinerten Schnittstelle zur Remote-Jobausführung erheblich. Zum Projektabschluss konnte ein lauffähiger Prototyp vorgestellt werden. Die Remote-Schnittstelle ist sehr modular aufgebaut und wird sich mit nur wenig Implementationsaufwand auch auf zukünftigen Cloud-Technologien einsetzen lassen. Weitere Details sind am Ende der Ergebnisdarstellung des Arbeitspaketes AP3-TP3 enthalten.

Meilenstein 3 – Pilottests: Die Pilottests teilten sich in zwei Phasen auf. Zunächst wurden einfache parallele Testprogramme zwecks Messung der Ausführungs- und Netzwerkperformance auf allen geeigneten und im Rahmen der VO „ptgrid“ zugänglichen D-

Grid-Ressourcen getestet. Anschließend erfolgten Tests mit einem Modell zur Niederdruckgasströmung und einem weiteren Modell zur Plasmasimulation in einem 2D-Modell einer Sputterkathode. Die Benchmark-Ergebnisse sind in den Tabellen 4 und 5 zusammengestellt. Im weiteren Verlauf wurden D-Grid-Ressourcen zur Durchführung umfangreicherer Simulationsrechnungen im Rahmen zweier parallel laufender, öffentlich geförderter Projekte verwendet. Trotz anfänglicher technischer Probleme bezüglich Jobsteuerung, Grid-Zugangsmodalitäten und Datenübertragung hat sich die Nutzung der D-Grid-Ressourcen als zielführend herausgestellt, und die Aktivitäten wurden auch nach Projektende noch weitergeführt. Die Aktivitäten wurden im Rahmen der Darstellung der Ergebnisse für das Arbeitspaket AP4-TP3 im Detail beschrieben.

Die Nutzung der D-Grid-Ressourcen im Rahmen öffentlich geförderter Projekte verläuft aus Sicht des Fraunhofer IST sehr erfolgreich. Eine Einschränkung besteht darin, dass bisher die Situation der D-Grid-Nutzung über das Jahr 2012 hinaus noch ungeklärt ist. Die im Rahmen des Projekts entwickelte Benutzeroberfläche zur Online-Bedienung der PIC-MC-Simulation wurde verschiedenen Industriepartnern vorgestellt, und es gab bereits eine konkrete Interessenbekundung bezüglich der Umsetzung einer solchen Benutzeroberfläche innerhalb eines Firmen-Intranets. Durch Anpassung der PIC-MC-Software auf D-Grid-Ressourcen ist die Software nunmehr auf nahezu beliebigen Großrechnersystemen lauffähig, wodurch sich ebenfalls Vorteile bei der Zusammenarbeit mit industriellen Partnern ergeben. Insofern erwartet das Fraunhofer IST auch für die kommenden Jahre eine nachhaltige Nutzung der Projektergebnisse sowohl im Bereich der Grundlagenforschung als auch in Zusammenarbeit mit Industriepartnern und bewertet das Projekt insgesamt als Erfolg.

6.5 Teilprojekt 4: Selbstkonsistente kinetische Berechnung von Ionen- und Neutralteilchenverteilungsfunktionen hinter einer Plasmarandschicht

R. P. Brinkmann¹, T. Hemke¹, W. Ottow² und L. Eichhorn³

¹ Lehrstuhl für Theoretische Elektrotechnik, Ruhr-Universität Bochum

² Engineering Systems International GmbH (ESI), Essen

³ Plasmetrex GmbH, Berlin

Die Zielsetzung des Teilprojektes 4 bestand darin, ein bereits implementiertes und validiertes Modell einer hochfrequenzmodulierten Plasmarandschicht des Lehrstuhls für Theoretische Elektrotechnik der Ruhr-Universität Bochum (TET-RUB) für die Nutzung im Plasma-Technologie-Grid tauglich zu machen. Es sollte ein Online-Beratungswerkzeug geschaffen werden, das den PT-Grid-Nutzer in die Lage versetzt, das Randschichtmodell für die jeweiligen Plasmazustände und Anwendungsbereiche optimal einzusetzen und seine Ergebnisse für die technisch-physikalische Optimierung von Plasmaprozessen zu nutzen. Das Simulationswerkzeug sollte sich dabei aus dem Randschichtmodell selbst, das die Verteilungsfunktionen der Ionen und Neutralteilchen berechnet und dafür als Input die Betriebsparameter der Plasmarandschicht benötigt, sowie aus drei alternativen Methoden zur Bestimmung der Betriebsparameter des Plasmas zusammensetzen. Diese unterschiedlichen Methoden sind

1. ein globales Modell, das eine Eigenentwicklung von TET-RUB ist,
2. der hydrodynamische Simulationscode CFD-ACE+ der ESI GmbH und
3. das Plasmametrolgiesystem Hercules[®] der Plasmetrex GmbH zur Auswertung messtechnischer Größen.

Die drei alternativen Methoden erlauben es, grundlegende wissenschaftliche Aussagen zu treffen (globales Modell), einen Plasmaprozess industrierelevant zu simulieren (CFD-ACE+) oder die durch eine prozessbegleitende Messung gewonnenen Daten (Hercules[®]) zu verwerten.

Das Teilprojekt wurde arbeitsteilig von den Partnern TET-RUB, ESI GmbH und Plasmetrex GmbH auf der Basis der von den informationstechnischen Partnern realisierten Infrastruktur umgesetzt. Die Teilprojektleitung lag beim TET-RUB. Durch die Insolvenz des Pilotanwenders im Teilprojekt 4, der Quimonda AG, mussten im Verlaufe des Projektes alternative Anwender sowohl im wissenschaftlichen als auch im industriellen Umfeld akquiriert werden. Die Arbeitsplanung umfasste die zehn Arbeitspakete

1. Erfassung des Ist-Status (AP1-TP4) zu Projektbeginn,
2. Einarbeitung und Schulung (AP2-TP4),
3. Definition von Pflichtenheften (AP3-TP4),
4. Umsetzen des Randschichtsimulators (AP4-TP4),
5. Implementierung der Interfaces (AP5-TP4),
6. Test der erstellten Software (AP6-TP4),
7. Pilotanwendung (AP7-TP4),
8. Erstellung von Dokumentation, Schulungsunterlagen und Berichten (AP8-TP4) während der Projektlaufzeit,
9. betriebswirtschaftliche und informationstechnische Bewertung am Projektende (AP9-TP4) und die abschließende
10. Erstellung von Dokumentation, Schulungsunterlagen und Berichten (AP10-TP4).

Die Arbeitsplanung für das Teilprojekt 4 und die Verantwortlichkeiten der Teilprojektspartner sind im Anhang A.5 in Abbildung 100 dargestellt.

AP1-TP4: Erfassung des Ist-Status

Das Randschichtmodell des TET-RUB berechnet orts- und phasenaufgelöst die elektrische Feldverteilung und die Dichten der geladenen Teilchen in der Randschicht eines hochfrequenzmodulierten Plasmas. Die Berechnung erfolgt selbstkonsistent, d. h., eine externe Festlegung der orts- und phasenaufgelösten Größen durch den Nutzer ist weder nötig noch möglich. Als Inputparameter werden die Betriebsparameter der Randschicht benötigt. Die sechs Anforderungen des Randschichtsimulators sind

- (1) die Betriebsparameter des Prozesses, wie Druck, Temperatur und Zusammensetzung des Prozessgases,
- (2) die lokale Elektronentemperatur,
- (3) die Teilchenflüsse der relevanten Ionenspezies auf die Randschicht und der zeitlich gemittelte Elektronenstrom, wenn dieser vom Ionenstrom verschieden ist,
- (4) der modulierte Hochfrequenzstrom bzw. die angelegte Hochfrequenzspannung,

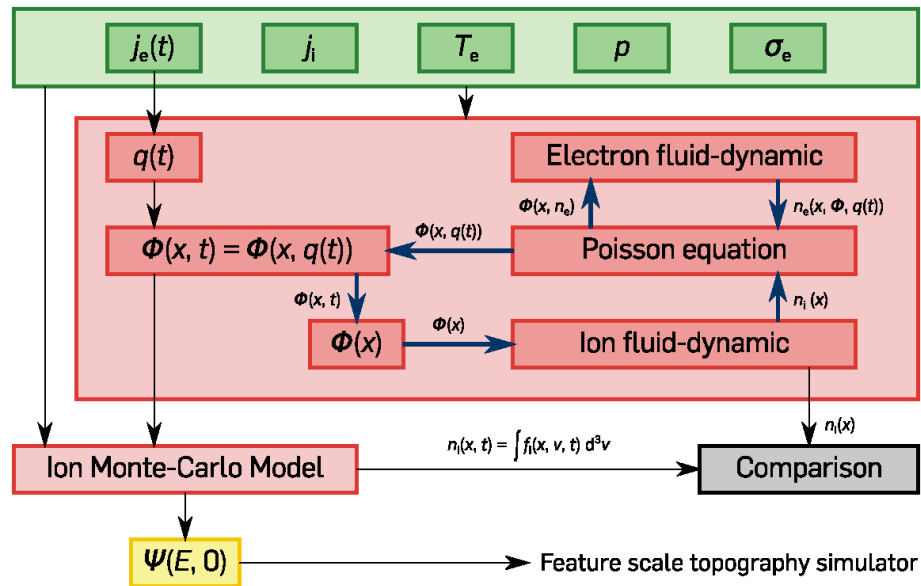


Abbildung 68: Prinzipieller Aufbau des Randschichtsimulators

- (5) die angelegte Bias-Spannung bzw. alternativ die Information, dass die Elektrode auf Floatingpotential liegt, sowie
- (6) die Wechselwirkungsparameter (zumeist Wirkungsquerschnitte) für die Stoßprozesse.

Der prinzipielle Aufbau des Randschichtsimulators ist in Abbildung 68 dargestellt, welche dem PT-Grid-internen Bericht „Abschlussbericht“ der Ruhr-Universität Bochum [P29] entnommen ist. Die drei alternativen Möglichkeiten, die Betriebsparameter zu erhalten, lassen sich bezüglich der zugrunde liegenden Anwendung wie folgt klassifizieren.

1. Die Kopplung an das globale Modell des TET-RUB stellte die wissenschaftliche Basis dar. Für die Entladung charakteristische Größen wurden als Input-Parameter in die Eingabedatei geschrieben. Es konnte somit getestet werden, in welchem Parameterbereich das Programm arbeitet. Weiterhin ließen sich mit geringem Rechenaufwand grobe Abschätzungen bezüglich der Größenordnung bestimmter Ausgabe-größen durchführen.
2. Die Kopplung an die kommerzielle Software CFD-ACE+ der ESI GmbH war die Basis für eine industrierelevante plasmatechnische Prozesssimulation. Die Prozessbedingungen sollten dabei möglichst genau in ein Modell übertragen werden. Die Geometrie der Plasmakammer wurde durch die Eingabegerometrie des Modells abgebildet. Die Prozessparameter, wie z. B. Druck, angelegte Hochfrequenzspannung

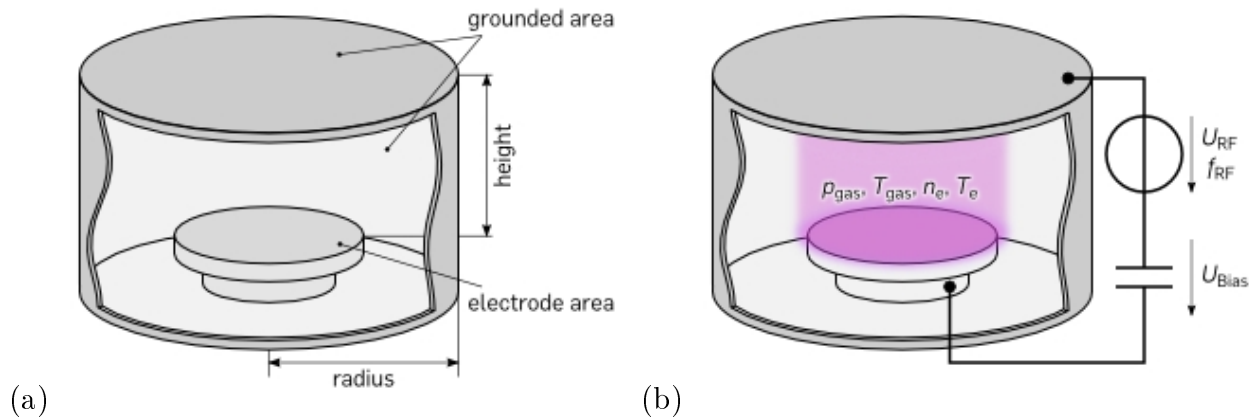


Abbildung 69: Geometrieparameter (a) und Plasmaparameter (b) des Referenzreaktors

und Gaszusammensetzung, wurden als Eingabegrößen in das Modell eingegeben. Die Kopplung an das Randschichtmodell ermöglichte dann die Ermittlung der Ionenenergieverteilungsfunktion.

- Die Kopplung an das Plasmametrolgiesystem Hercules[®] der Plasmatrix GmbH bildete die Verzahnung des Randschichtmodells mit einer prozessbegleitenden Messung. Die industrierelevante Nutzung ist als hoch einzuschätzen, da die Simulation mit realen, messtechnisch gewonnenen Prozessparametern arbeitet. Aus diesen Parametern soll das Randschichtmodell die Energieverteilungsfunktion der Ionen berechnen. Als Referenzanlage wurde der Plasmaätker PlasmaTherm 790 seitens der Plasmatrix GmbH vorgeschlagen, welcher Tests des Modells bei den Anregungsfrequenzen 13 und 40 MHz ermöglichte.

Der im Rahmen des Teilprojektes untersuchte zylindrische Referenzreaktor ist in Abbildung 69 schematisch dargestellt mit den vorzugebenden geometrischen Größen und Plasmaparametern.

Aus informationstechnischer Sicht kamen im Teilprojekt 4 des PT-Grids sowohl selbstprogrammierte Software als auch kommerzielle Werkzeuge zum Einsatz. Da die Bestimmung der Eingabeparameter auf drei unterschiedliche Arten erfolgen kann, ergaben sich drei unterschiedlichen Workflows. Jeder dieser Workflows war wiederum in die drei Phasen Datenvorbereitung (Pre-Processing), Lösung des Modells (Solver) und Aufbereitung der Ergebnisse (Post-Processing) unterteilbar, wobei hier in der zweiten Phase (Solver) teilweise mehrere Softwarekomponenten zum Einsatz kommen.

Exemplarisch ist in Abbildung 70 der Workflow der Kopplung des Randschichtsimulators an das Plasmametrolgiesystem Hercules[®] dargestellt. Dabei werden die Messdaten aus Hercules[®] genutzt, um mit Hilfe des Randschichtsimulators die Verteilungsfunktion der Ionen und Neutralteilchen zu berechnen. In der ersten Variante werden mit Hil-

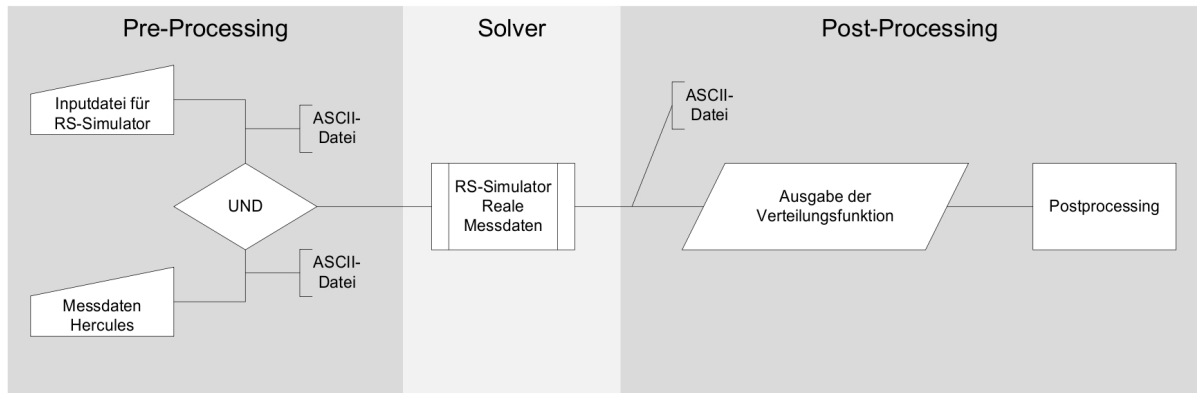


Abbildung 70: Programmablauf unter Verwendung von realen Messdaten aus Hercules[®] im Teilprojekt 4

fe der Messdaten die Eingabedaten durch das globale Modell bestimmt. In der zweiten Variante werden die Betriebsparameter durch ein separates Modell von CFD-ACE+ erstellt, wodurch die Anforderungen von Teilprojekt 2 (siehe Abbildung 37) und Teilprojekt 4 an dieser Stelle im Bezug auf die Software ähnlich sind. Die Arbeitsabläufe im Teilprojekt 4 wurden in den in Abbildung 2 dargestellten allgemeinen Arbeitsablauf im Plasma-Technologie-Grid integriert, der im PT-Grid-internen Bericht „Soll-Ist-Erfassung der Informationstechnik-Infrastruktur im PT-Grid“ [P4] dokumentiert ist.

Zuarbeit zu betriebswirtschaftlichen Aspekten an die Fachhochschule Stralsund erfolgte durch den Lehrstuhl für Theoretische Elektrotechnik der Ruhr-Universität Bochum und die ESI GmbH im Rahmen von Gesprächen, die auf einem entsprechenden Fragebogen basierten, der die Bereiche Grid-bezogene Aktivitäten und geschäftsorientierte Zielvorstellungen betraf. Die Ergebnisse der Befragungen wurden im PT-Grid-internen Ergebnisbericht „Erhebung der derzeitigen Gridaktivitäten und der geschäftsorientierten Zielvorstellungen (Meilenstein 1) der plasmatechnischen Berater des Plasma-Technologie-Grid-Projektes“ [P2] der Fachhochschule Stralsund dokumentiert (siehe Abschnitt 6.1.2).

AP2-TP4: Einarbeitung und Schulung

Die drei Teilprojektspartner haben regelmäßig an den Projekttreffen des gesamten PT-Grids sowie den durch die Projektleitung veranstalteten Schulungen, die in Tabelle 1 zusammengefasst sind, teilgenommen.

Darüber hinaus besuchten Mitarbeiter des TET-RUB zu Beginn des Projektes Schulungen, die durch die ESI GmbH bzw. die Plasmetrex GmbH durchgeführt wurden. Die Plasmaschulungen der ESI GmbH beinhalteten die Vorstellung des Plasmamodells in der kommerziellen Software CFD-ACE+, die numerische Konzeption von CFD-ACE+, das

Aufsetzen verschiedener Beispielprobleme anhand von Tutorials sowie eine Diskussion der Schnittstellen im Teilprojekt 4. Die Mitarbeiter des TET-RUB konnten den Support der ESI GmbH während der Projektlaufzeit nutzen und Lizenzen zur Nutzung von CFD-ACE+ wurden durch die ESI GmbH zur Verfügung gestellt.

Die von der Plasmetrex GmbH veranstaltete Schulung betraf die Funktionsweise des Plasma-Messtechnik-Systems Hercules[®]. Sie umfasste weiterhin eine Demonstration des Plasma-Messtechnik-Systems an einer Plasmaanlage, die Präsentation der Software Herc-View zur Datenanalyse und die Vorstellung des in der Halbleiterindustrie üblichen Datentransferstandards für Sensoren SEMI⁴⁹ E54.9.

AP3-TP4: Definition von Pflichtenheften

Das Pflichtenheft bildet die Grundlage der Implementierung in Teilprojekt 4. Es wurde durch den Lehrstuhl für Theoretische Elektrotechnik der Ruhr-Universität Bochum in Absprache mit den Teilprojektpartnern ESI GmbH und Plasmetrex GmbH erstellt und liegt als PT-Grid-interner Bericht [P7] auf dem BSCW-Server <http://bscw.uni-duisburg-essen.de/bscw/bscw.cgi/> und beim Koordinator (INP Greifswald) vor.

Im Pflichtenheft wurde detailliert geplant, welche Betriebsparameter der Randschicht durch das globale Modell, CFD-ACE+ bzw. Hercules[®] übergeben werden. Allgemein werden bei der Zusammenschaltung des globalen Modells mit dem Randschichtsimulator höchstens zwei Randschichten berechnet. Die im Arbeitspaket AP1-TP4 genannten sechs Anforderungen des Randschichtsimulators werden durch das globale Modell wie folgt umgesetzt.

- (1) Der Druck und die Neutralgastemperatur werden als konstant betrachtet und stellen Inputgrößen dar. Die Zusammensetzung der Prozessgase erfolgt als Eingabe für den Fall, dass die Plasmachemie berechnet wird. Sie geht als Eingabegröße zudem in die Berechnung einer Stoßfrequenz für elastische Elektronenstöße ein.
- (2) Die Elektronentemperatur gilt global und ist eine Eingabegröße.
- (3) Die Teilchenflüsse auf die Randschicht werden im globalen Modell berechnet und an den Randschichtsimulator kommuniziert.
- (4) Die Amplitude und Frequenz der angelegten Hochfrequenzspannung stellen Eingabegrößen dar.
- (5) Ein Self-Bias wird durch das globale Modell berechnet und an den Randschichtsimulator übermittelt.

⁴⁹SEMI: Semiconductor Equipment and Materials International

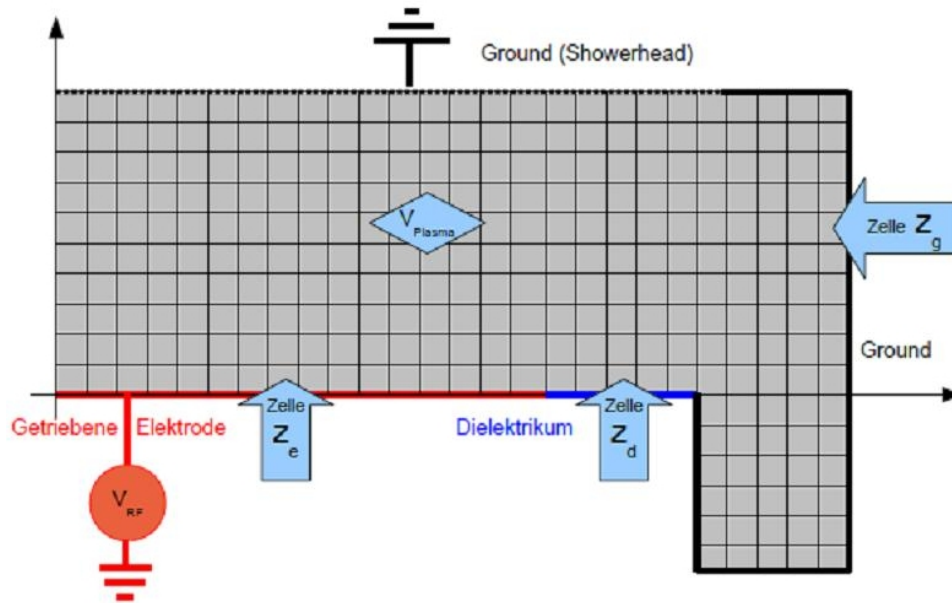


Abbildung 71: Schema eines typischen Plasmareaktors im Teilprojekt 4

- (6) Die Wechselwirkungsparameter gehen als Input in das globale Modell für die Berechnung einer Stoßfrequenz für elastische Elektronenstöße ein.

Dabei stellen die in den Anforderungen (1), (2), (4) und (6) genannten Parameter Eingabegrößen sowohl im Randschichtsimulator als auch im globalen Modell dar.

Die Kopplung des Randschichtsimulators an das hydrodynamische Simulationspaket CFD-ACE+ unterscheidet sich von der Umsetzung der anderen beiden Alternativen dadurch, dass die Randschichten für jede beliebige, an eine Wand grenzende Gitterzelle berechnet werden können und somit die Anzahl der Randschichten zwei deutlich überschreiten kann. Das Schema eines typischen Plasmareaktors ist in Abbildung 71 skizziert. Die Kommunikation zwischen Randschichtsimulator und CFD-ACE+ erfolgt idealerweise per Subroutine. Allgemeine Anforderungen bestehen ferner darin, dass der Randschichtsimulator erst nach Erreichen der stationären Lösung aktiviert werden soll und dass die Patches der Zellen, in denen die Randschicht berechnet werden soll, ausgelesen werden. Dabei wird zwischen geerdeten Patches p_g an den Zellen Z_g , dielektrischen Patches p_d an den Zellen Z_d und Patches p_e an den Zellen Z_e , die an einer Hochspannung liegen, unterschieden. Die im Arbeitspaket AP1-TP4 zusammengestellten Anforderungen des Randschichtsimulators werden durch CFD-ACE+ wie folgt umgesetzt.

- (1) Der Druck wird als konstant betrachtet und soll in einer zentralen Zelle des Gitters ausgelesen werden können. Alternativ kann er in die Eingabedatei des Randschichtsimulators analog zur Eingabe des Druckes in die Modelldatei von CFD-ACE+ eingetragen werden. Die Neutralgastemperatur wird ebenfalls als konstant betrach-

tet und aus einer zentralen Zelle des Gitters ausgelesen. Im Falle der Jouleschen Heizung des Neutralgases wird sie in der entsprechenden Zelle Z ausgelesen. Die Zusammensetzung der (wichtigsten) Prozessgase erfolgt als Eingabe für den Randschichtsimulator analog zu den Eintragungen der „Inlet-Chemie“ der Modelldatei von CFD-ACE+. Für den Fall, dass durch die Plasmachemie wichtige Spezies, die nicht denen des einströmenden Gases entsprechen, gebildet werden, muss die Dichte aller (wichtigen) Spezies in der entsprechenden Zelle Z ausgelesen werden.

- (2) Die Elektronentemperatur wird in der entsprechenden Zelle Z ausgelesen.
- (3) Die Teilchenflüsse der wichtigsten Spezies auf die Randschicht werden als Teilchenflüsse durch den Patch p ausgelesen.
- (4) Die Amplitude und Frequenz der angelegten Hochfrequenzspannung werden entweder in der Eingabedatei des Randschichtsimulators analog zu den Angaben in der Modelldatei von CFD-ACE+ eingetragen oder an den entsprechenden Patches p_e ausgelesen.
- (5) Ein Self-Bias wird an den entsprechenden Patches p_e ausgelesen, die auf Floating-potential liegen. Die Patches p_g liegen auf Potential Null.
- (6) Die Parameter für die wichtigsten Wechselwirkungen in der Randschicht werden in der Eingabedatei des Randschichtsimulators festgelegt.

Die Anforderungen der Koppelung des Randschichtsimulators an das Plasmametrolgiesystem Hercules[®] gleichen denen der Zusammenschaltung von globalem Modell und Randschichtsimulator. Hercules[®] liefert Messdaten, die volumengemittelt für den gesamten Plasmareaktor gelten. Dabei werden über ein zweidimensionales Fluid-Modell, das den gemessenen Hochfrequenzstrom auswertet, die Stoßrate für Impulstransfer der Elektronen (ohmsche und gegebenenfalls auch stochastische Heizung) sowie die Elektronendichte an der Randschichtkante berechnet und durch Hercules[®] bereitgestellt. Diese Größen werden anschließend durch das globale Modell verwertet, das seinerseits die Betriebsparameter an den Randschichtsimulator übergibt. Allgemeine Anforderungen bestehen in der Festlegung der Reaktorgeometrie und -symmetrie, der Anzahl der Randschichten (eine oder zwei) und der Art der Wände vor den Randschichten (metallisch oder dielektrisch). Die im Arbeitspaket AP1-TP4 beschriebenen Anforderungen des Randschichtsimulators werden durch Hercules[®] wie folgt umgesetzt.

- (1) Der Druck wird als konstant betrachtet und analog zu den Prozessbedingungen der Hercules[®]-Messung in der Eingabedatei des Randschichtsimulators angegeben.

Entsprechend der Gaszusammensetzung des einströmenden Gases und unter der Voraussetzung, dass im Plasma keine Spezies gebildet wird, die maßgeblich die Elektron-Schwerteilchen-Wechselwirkung beeinflusst, wird ein mittlerer effektiver Stoßquerschnitt bestimmt, aus dem mit Hilfe der gemessenen Stoßrate der Elektronen die Neutralgasdichte bestimmt wird. Die Neutralgasdichte wird anschließend verwendet, um über das ideale Gasgesetz die Neutralgastemperatur zu berechnen.

- (2) Die Elektronentemperatur gilt global und ist eine Eingangsgröße, die prozessspezifisch geschätzt werden muss.
- (3) Die Teilchenflüsse auf die Randschicht werden durch das Auswerten der durch Hercules[®] berechneten Plasmadichte und der geschätzten Elektronentemperatur berechnet.
- (4) Hercules[®] benötigt die mittlere Randschichtdicke, die angelegte Spannung oder den Self-Bias als Eingangsgröße für die Auswertung. Die mittlere Randschichtdicke ist dabei z. B. im Vergleich zur angelegten Spannung, die meistens nicht exakt bestimmbar ist, der zuverlässigere Eingangswert. Somit wird die mittlere Randschichtdicke anstelle des Stroms (mit Amplitude und Frequenz) auf die Randschicht (oder wahlweise der angelegten Spannung mit Amplitude und Frequenz) auch als Eingangsgröße für das Randschichtmodell gewählt und bildet in beiden Modellen denselben gemeinsamen Eingangswert.
- (5) Der Self-Bias wird näherungsweise durch Hercules[®] berechnet. Da auch das Randschichtmodell einen Self-Bias berechnet, hängen beide Berechnungen von der mittleren Randschichtdicke in (4) ab. Durch die Verschiedenheit der Modelle ist ein Unterschied zwischen der Berechnung durch Hercules[®] und den Randschichtsimulator zu erwarten, wobei beide Ergebnisse miteinander verglichen werden.
- (6) Die Parameter für die wichtigsten Wechselwirkungen in der Randschicht werden in der Eingabedatei des Randschichtsimulators festgelegt.

Die Definition der Schnittstellen zwischen dem Randschichtsimulator und den drei alternativen Methoden zur Bestimmung der Betriebsparameter wurde im Pflichtenheft [P7] ergänzt durch entsprechende Ausführungen zum Datentransfer zwischen den Modulen. Dabei wurden sowohl geeignete Unterroutinen, ASCII- und VOF-Dateien als auch der in der Halbleiterindustrie übliche Datentransferstandard für Sensoren SEMI E54.9 als Optionen identifiziert, wobei insbesondere bei der Übertragung von Messdaten von Hercules[®] zum globalen Modell und zum Randschichtsimulator geeignete Verfahren zur automatischen Datenanalyse zur Reduktion der immensen Datenmengen notwendig sind.

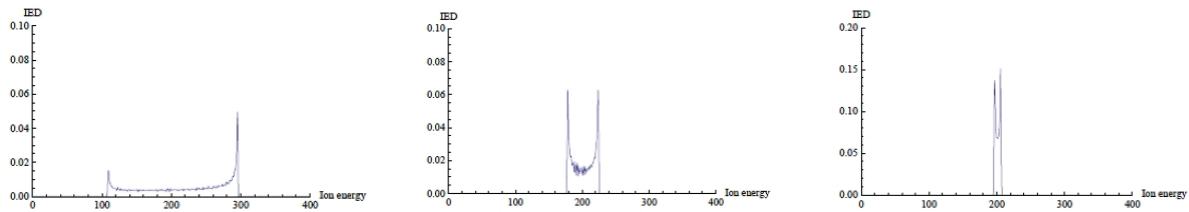


Abbildung 72: Ionenenergieverteilung für die Anregungsfrequenzen 2.56 MHz (links), 20.56 MHz (mittig) und 100 MHz (rechts)

AP4-TP4: Umsetzen des Randschichtsimulators

Der für das Teilprojekt 4 zur Verfügung stehende Randschichtsimulator bot die Möglichkeit einer selbstkonsistenten Berechnung des elektrischen Feldes und der Dichten der im Plasma vorhandenen Spezies. Jedoch war die Gültigkeit des zugrunde liegenden Modells auf den Fall beschränkt, dass die angelegte Hochfrequenz ω_{RF} größer als die Ionenplasmafrequenz ω_{Pi} ist. Um neueren technischen Entwicklungen Rechnung zu tragen, wurde im Rahmen des PT-Grid-Projektes von Mitarbeitern des TET-RUB das ursprüngliche Randschichtmodell so erweitert, dass es für jegliche industrierelevante Szenarien bezüglich der Anregungsspannungen und -frequenzen anwendbar wurde. Diese Entwicklung geschah schrittweise.

Zunächst wurde das „Potential-Matrix-Modell“ etabliert, das von einer stoßfreien, RF-modulierten Schicht ausgeht und eine „Potential-Matrix“ berechnet, die das Potential in Raum und Zeit enthält. Des weiteren wurde ein Monte-Carlo-Code zur Berechnung der Ionentrajektorien entwickelt, der es ermöglichte, die Energien der Ionen, die auf die Elektrode bzw. Wand treffen, zu bestimmen. Abbildung 72 zeigt Ergebnisse der Ionenenergieverteilung (IED; ion energy distribution) in Abhängigkeit von der anregenden Frequenz ω_{RF} für eine Ionenplasmafrequenz von $\omega_{Pi} = 10$ MHz. Es wird deutlich, dass mit kleiner werdender Anregungsfrequenz die Modulation der Ionen zunimmt, da sie dem Wechselfeld folgen können und somit die Ionenenergieverteilungsfunktion aufgespreizt wird.

Die Umsetzung und Testung des „Potential-Matrix-Modells“ erfolgte zunächst in Mathematica. Anschließend wurde der Code in C++ implementiert. Die Vergleichsrechnungen wurde erfolgreich abgeschlossen. Abbildung 73 zeigt als Beispiel einer Berechnung mit dem C++-Programm die Variation der Ionenenergieverteilung mit der Masse der Ionen zwischen 2 und 150 amu⁵⁰ für eine konstante Anregungsfrequenz $\omega_{RF} = 6$ MHz. Die Charakteristik der Ionenenergieverteilungsfunktion hängt auch hier – wie in Abbildung 72 – vom Verhältnis von Ionenplasmafrequenz zur Anregungsfrequenz ab. Mit kleiner werdender Masse sinkt die Ionenplasmafrequenz ω_{Pi} , so dass die Ionen stärker moduliert werden.

⁵⁰amu: atomic mass unit; Atommasseneinheit

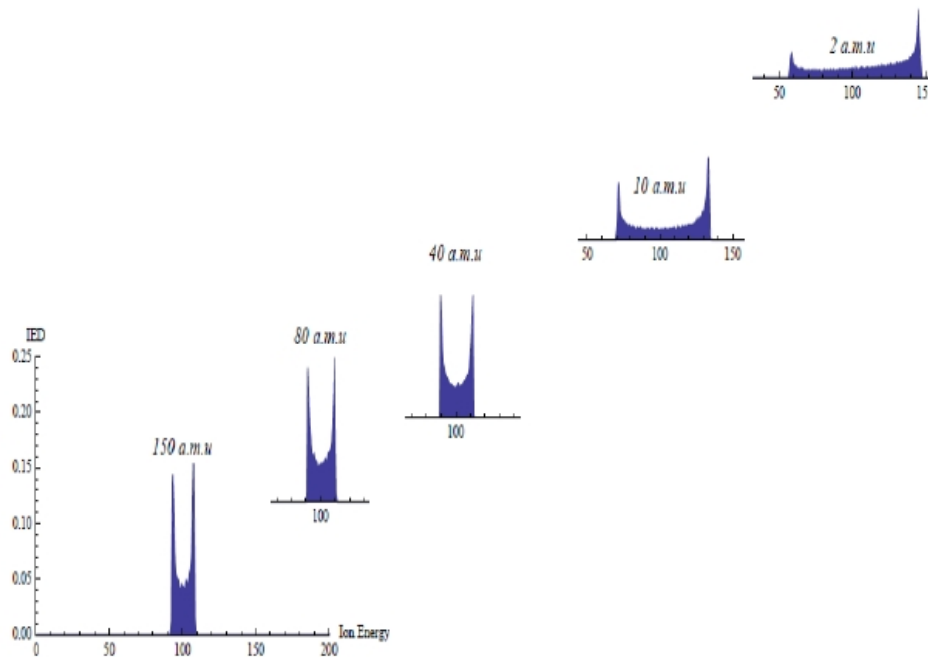


Abbildung 73: Ionenenergieverteilung bei Variation der Masse von 2 bis 150 amu

Dieses Verhalten ist in der verbreiterten Doppelppeakstruktur der Ionenenergieverteilungsfunktion zu erkennen. Das Randschichtmodell war somit in der Lage, durch Berücksichtigung der Modulation der Ionen die Auswirkung auf die Ionenenergieverteilungsfunktion zu berechnen.

In einem weiteren Schritt erfolgte die Erweiterung des Randschichtmodells zur Beschreibung stoßbestimmter Plasmen. Die Abbildungen 74 und 75 zeigen Simulationsergebnisse für eine sinusförmige Anregung mit $\omega_{RF} = 1$ MHz für unterschiedliche Drücke. Der RF-Strom ist dabei so gewählt, dass die Randschichtdicke für alle Fälle konstant ist. Abbildung 74 zeigt den großen Einfluss des Druckes auf die Form der Ionenenergieverteilungsfunktion. Mit zunehmendem Druck verkleinert sich die Intensität des Peaks bei der höchsten Ionenenergie der bimodalen Struktur. Durch die vermehrten Stöße der Ionen mit dem Neutralgas kommt es zu einer Streuung der Ionen, wodurch weniger Ionen mit der maximalen Energie an der Elektrode auftreffen. Bei einem Druck von 50 mTorr ist schließlich die bimodale Struktur vollkommen aufgelöst. Die Streuung durch Stöße schlägt sich ebenfalls in der Winkelverteilung (IAD: Ion angle distribution) der auf die Elektrode auftreffenden Ionen nieder. Abbildung 75 zeigt, dass mit steigendem Druck die Anzahl der Ionen, die in größere Winkelbereiche gestreut werden, wächst. Beide Resultate haben Einfluss auf jegliche Art von Ionenunterstützten Oberflächenprozessen und sind somit von hoher industrieller Relevanz.

Das Randschichtmodell wurde in der Bachelorarbeit von M. Brehler zum Thema „Par-

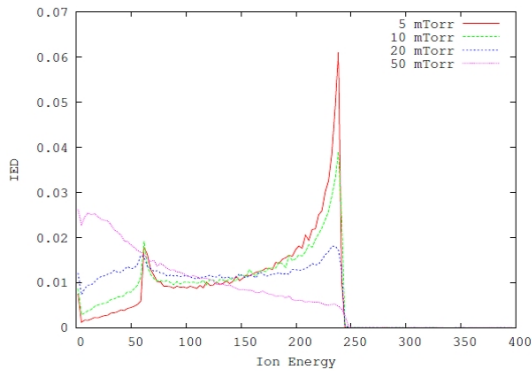


Abbildung 74: Normierte Ionenenergieverteilung als Funktion der Ionenenergie in Abhängigkeit vom Druck

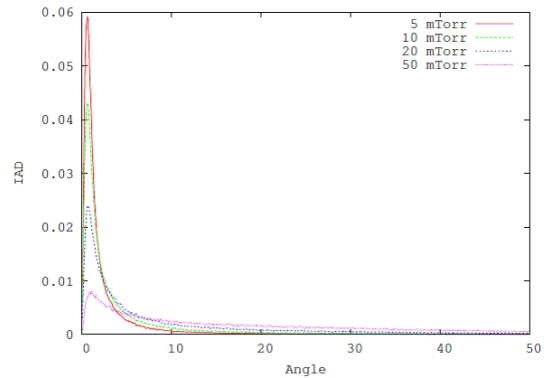


Abbildung 75: Normierte Ionenwinkelverteilung als Funktion des Winkels in Abhängigkeit vom Druck

allelisierung einer Plasma-Randschicht-Simulation“ [22], die in Kooperation von TET-RUB mit dem Projektpartner Institut für Roboterforschung der Technischen Universität Dortmund durchgeführt wurde, gridfähig parallelisiert. Diverse Tests zeigten, dass durch diese Umsetzung ein in etwa linearer Geschwindigkeitszuwachs in Abhängigkeit von den Prozessen erreicht werden kann. Der Geschwindigkeitszuwachs ist in Abbildung 76 für ein typisches Simulationsmodell dargestellt.

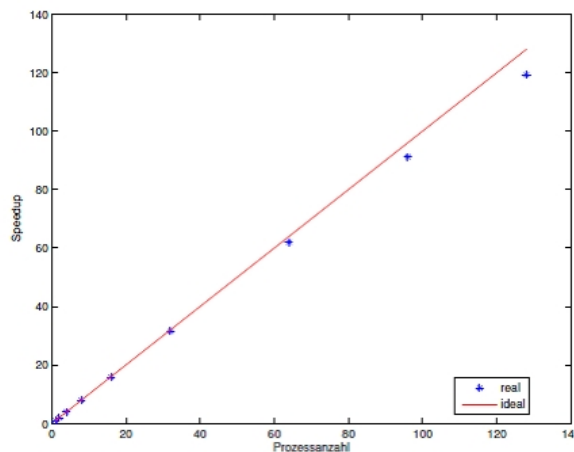


Abbildung 76: Geschwindigkeitszuwachs in Abhängigkeit von der Anzahl der Prozesse

Ferner wurde die Referenz-Installation der Grid-Server am Lehrstuhl für Theoretische Elektrotechnik der Ruhr-Universität Bochum erfolgreich durchgeführt. Der Server `pt-grid.tet.ruhr-uni-bochum.de` des TET-RUB wurde durch die Technische Universität Dortmund verifiziert und ist unter der URL-Adresse `http://ptgrid.it.irf.tudortmund.de:-8080/webmds/webmds?info=indexinfo&xsl=servicegroupxsl` sichtbar.

Zusätzlich zu den geplanten Arbeiten wurde es notwendig, dass seitens TET-RUB eige-

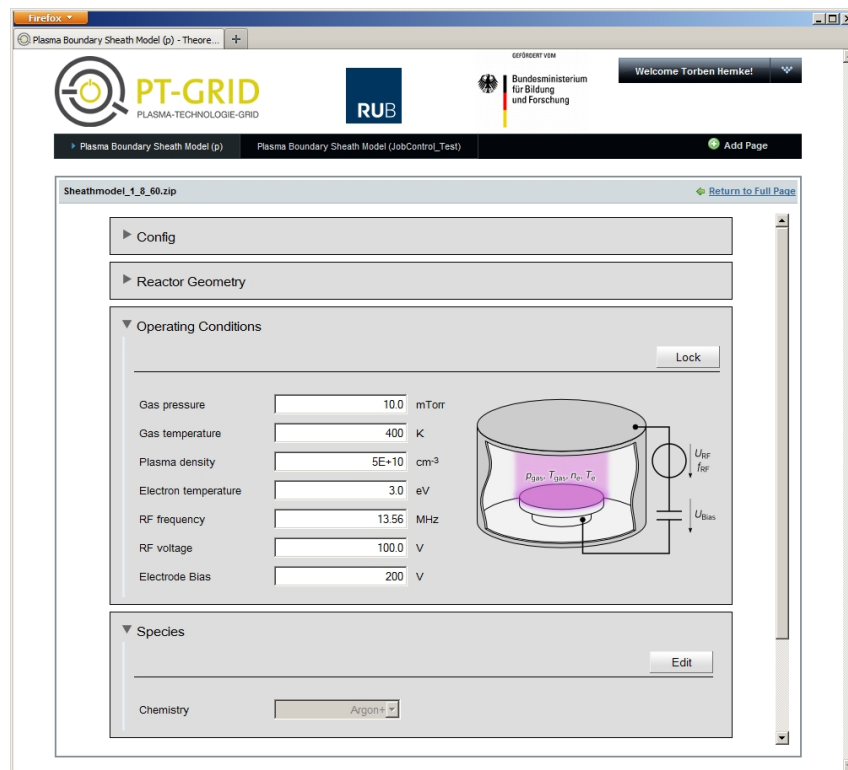


Abbildung 77: Parametereingabe im Portal in Teilprojekt 4

ne Aktivitäten zur Portalentwicklung durchgeführt wurden (siehe auch Abschnitt 6.1.1). Die drei alternativen Methoden, die Betriebsparameter des Randschichtmodells zu bestimmen, erforderten unterschiedliche Umsetzungen der Portallösung. Die Kopplung des Randschichtmodells an das globale Modell des TET-RUB, bildete dabei einen Basistentwurf, auf dem die anderen Ansätze aufbauen konnten. Das Portlet wurde durch den TET-RUB umgesetzt und in Funktionalität und Visualisierung optimiert. Des Weiteren wurde eine Jobsteuerungsoberfläche entworfen und implementiert. Alle mit den Projektpartnern abgesprochenen Interaktionsmöglichkeiten wurden in der grafischen Oberfläche vorgesehen, konnten aber nur zum Teil durch den serverseitigen Adapter implementiert werden. Diese Oberfläche wurde als Vorlage in den anderen Teilprojekten genutzt. Es sei an dieser Stelle explizit darauf hingewiesen, dass die Arbeiten zum Portal und zur Jobsteuerung in diesem Umfang im Teilprojekt 4 zum Zeitpunkt des Projektantrages nicht vorgesehen und geplant waren. Das Portlet zur Parametereingabe im Teilprojekt 4 ist in Abbildung 77 dargestellt, und die Abbildung 78 illustriert die Jobsteuerung und die Visualisierung der Ausgabe einer Ionenenergieverteilungsfunktion (IEDF) im Teilprojekt 4. Der Portalserver für das Randschichtmodell der Ruhr-Universität Bochum wurde Bestandteil der PT-Grid-Infrastruktur (Abbildung 5) und ist unter der URL-Adresse <http://sheath.tet.rub.de> erreichbar.

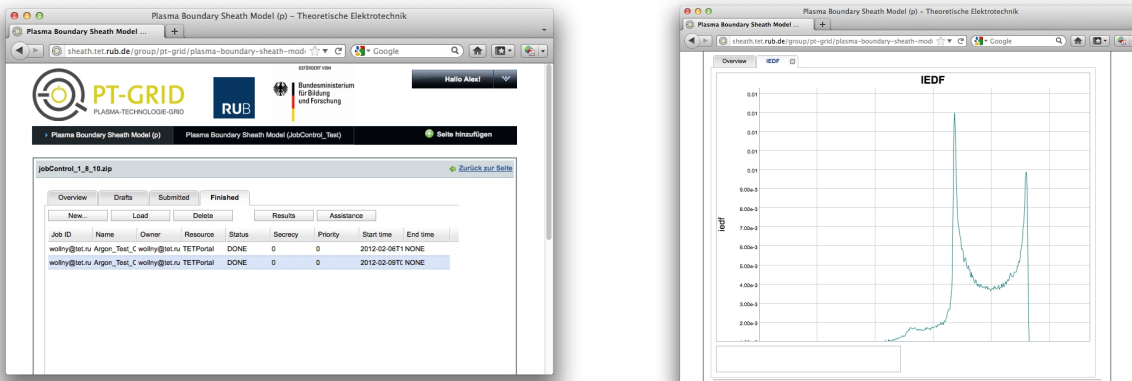


Abbildung 78: Jobsteuerung (links) und Visualisierung der Ausgabe (rechts) im Teilprojekt 4

Zur Umsetzung des Randschichtsimulators in Kopplung mit dem hydrodynamischen Simulationspaket CFD-ACE+ der ESI GmbH wurden Python-Skripte in Zusammenarbeit des TET-RUB und der ESI GmbH erstellt, mit denen Ergebnisse aus CFD-ACE+-Simulationen an den Randschichtsolver übergeben werden. Als Referenzmodell wurde dabei eine kapazitiv gekoppelte RF-Entladung (CCP-Reaktor) mit Argon als Hintergrundgas verwendet. Die Daten der Abmessung dieser Geometrie wurden von einem Plasmareaktor, TEL 432 SCCM, entnommen. Abbildung 79 zeigt die Geometrie und das numerische Gitter des Referenzreaktors.

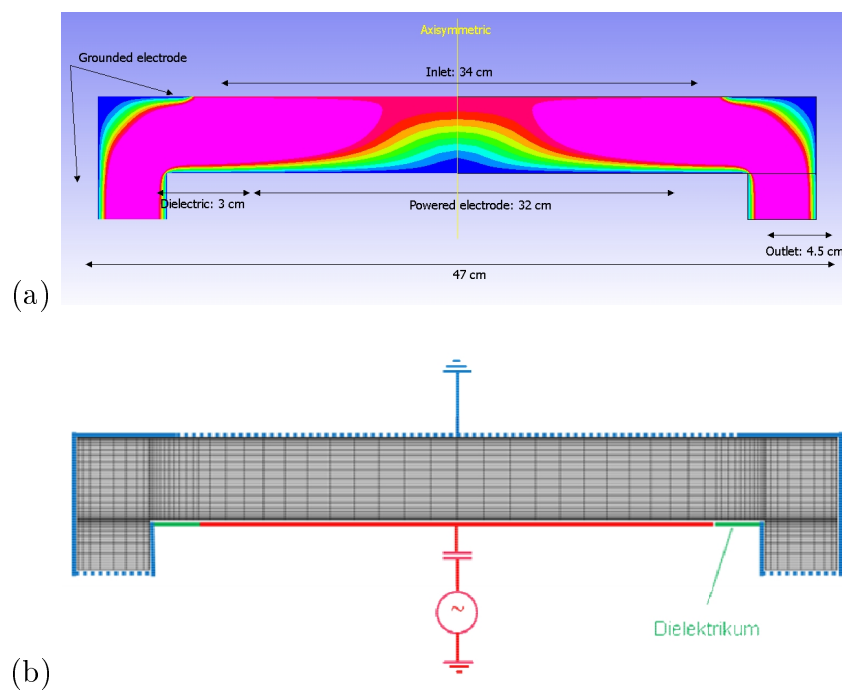


Abbildung 79: Reaktor geometrie (a) und numerisches Gitter (b) im Teilprojekt 4

Um das Arbeitspaket AP5-TP4 bearbeiten zu können, wurde es für die Plasmetrex GmbH notwendig, zusätzliche Aktivitäten zu den Möglichkeiten der Datenkopplung unter industriellen Bedingungen zwischen den Tool-Sensor-Daten und dem Simulator (z. B. Randschichtsimulator) vorzugsweise unter Verwendung des in der Halbleiterindustrie üblichen Standards für Sensoren SEMI E54.9 durchzuführen. Dabei war zu berücksichtigen, dass in der Halbleiterindustrie in der Regel die Tool- und Waferdaten zur Prozessüberwachung verwendet werden, wobei etwa 10 MB Prozessdaten pro Kammer und Tag (bei der Überwachung von 6 Parametern) gespeichert werden. Zudem werden die Produktionsdaten in Abhängigkeit vom Hersteller der Plasmaanlage und vom jeweiligen Kunden nicht oder über verschiedene Schnittstellen (Protokolle) zur Verfügung gestellt, um diese Daten weiter aufzuarbeiten und zu reduzieren.

Somit wurde im Rahmen des Projektes die Studie „Sensor Integration in den Produktionsprozess“ in das Projekt eingebunden. In dieser Studie der Plasmetrex GmbH wurden im Wesentlichen die produktionsrelevanten Möglichkeiten der Datenkopplung und zur Verfügung stehende international gebräuchliche Interfaceprotokolle und standardisierte Schnittstellen (SEMI Standard) dargestellt.

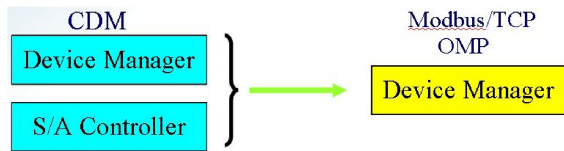
Um Sensordaten, Tooldaten und logistische Daten zu verbinden und in einer Datenbank abzulegen, kann SECS II⁵¹ verwendet werden. Der sogenannte Standard E5 ist eine Beschreibung der Nachrichten, welche zwischen dem Equipment, d. h. der Plasmaanlage, und dem Host ausgetauscht werden. Für GEM⁵² steht der Standard E30, der das Verhalten der Plasmaanlage (Hardware) bezüglich der Kommunikation mit dem Host definiert. Dieser Standard ist speziell auf die Automatisierungstechnik ausgelegt. Die beiden Standards SECS und GEM beschreiben somit die Kommunikation von der Basis (dem Austausch der einzelnen Datenpakete) bis zum Verhalten der einzelnen Kommunikationsteilnehmer (wann, was und wie es verschickt werden muss). Als eine mögliche Variante wurde die BlueBox von MKS Instruments angesehen. Dieses Gerät ist ein so genannter SECS-Multiplexer, der den Datenaustausch bzw. das Zusammenführen von Datenströmen realisieren kann. Aufgrund der sich immer länger hinziehenden Verzögerungen bei der Lieferung der BlueBox infolge von Umstrukturierungen von MKS Instruments, konnte die Konzeption während der Projektlaufzeit nicht umgesetzt werden. Auch die Diskussionen zu alternativen Lösungen zur BlueBox insbesondere mit der Firma AIS Dresden GmbH und der Firma znt-Richter aus München haben noch nicht zu einer Lösung geführt.

Zudem hat sich die Favorisierung des Standards SEMI E54.9 im Laufe des Projektes bestätigt. Der 2. SEMI E54.9 – Modbus/TCP OMP⁵³ Standard beschreibt ein Sensor-

⁵¹Semiconductor Equipment Communication Standard 2

⁵²Generic Equipment Model

⁵³OMP: object messaging protocol



CDM – Common Device Model SEMI E54

Abbildung 80: Datenabbildung in das Modbus-Protokoll

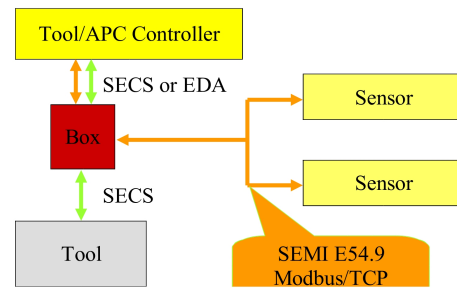


Abbildung 81: Sensorschnittstelle mit Box

Aktuator-Netzwerk (SAN) basierend auf einer Modbus/TCP-Spezifikation. Die Datenabbildung ist in Abbildung 80 dargestellt. Das Modbus/TCP (SEMI E54.9) erfüllt alle Anforderungen an das Kommunikationsprotokoll. Es ermöglicht die Übertragung von Sensordaten und logistischen Daten sowie das Vereinen von Anlagen- und Sensordaten in einer Zeitbasis. Es bildet die Grundlage für eine automatische Datenanalyse und bietet eine einfache Integration zusätzlicher (Plug-and-play-)⁵⁴ Sensoren.

Das Metrologiesystem Hercules[®] verfügt sowohl über eine SECS-Schnittstelle als auch über Modbus/TCP (SEMI E54.9) und ist somit in der Lage, Informationen und Daten mit dem SECS-Relais („Box“) auszutauschen. Dabei sind unter anderem die Sensordaten rückverfolgbar über SECS oder EDA⁵⁵ der Anlage. Abbildung 81 zeigt die entsprechende Sensorschnittstelle mit „Box“.

Auch wenn somit prinzipiell die effektive Datenkopplung über eine integrierte Sensorschnittstelle direkt an der Prozessanlage möglich ist, erwies sich eine derartige Datenschnittstelle für die Anwendung im Rahmen des Online-Beratungswerkzeuges als nur begrenzt geeignet, da die Implementierung der Datenströme einer Online-Plasmacharakterisierung in eine Plasmasimulation nicht möglich ist. Jedoch können die gemessenen Plasmaparameter als komplementärer Input in der Simulation genutzt werden.

AP5-TP4: Implementierung der Interfaces

Im Hinblick auf die gridfähige Umsetzung des Randschichtsimulators wurde die Funktionalität der angestrebten Portallösung ausgeplant. Abbildung 82 zeigt die Portallösung für das Randschichtmodell in Zusammenhang mit dem globalen Modell. Neben der Visualisierung der Eingabeparameter soll das Portal die Funktion eines Parsers⁵⁶ übernehmen,

⁵⁴plug and play: einstecken und einschalten

⁵⁵EDA: Equipment Data Acquisition

⁵⁶Parser: Programm, das eine syntaktische Analyse durchführt.

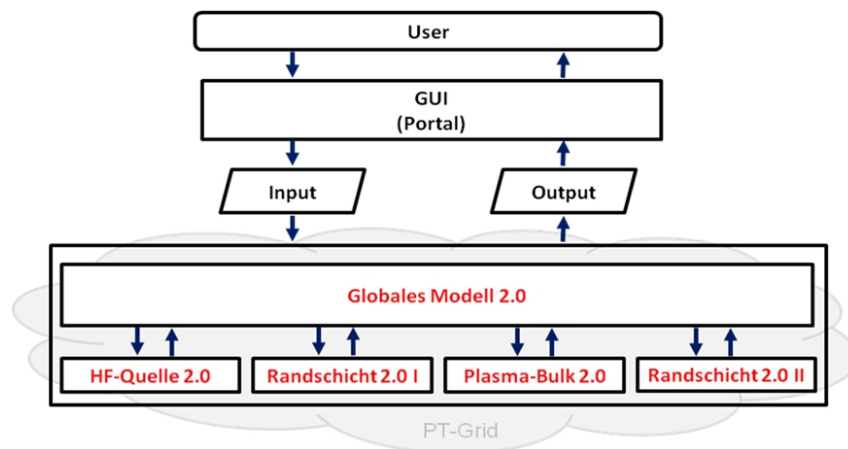


Abbildung 82: Portallösung für die Umsetzung des Randschichtmodells mit dem globalen Modell im Teilprojekt 4

der die Eingabeparameter einer Validitätsprüfung unterzieht. Zum Zwecke des Postprozessings soll die Möglichkeit bestehen, die Ausgabedaten im Portal zu visualisieren oder alternativ zu exportieren.

Für die Kopplung des Randschichtsimulators mit der kommerziellen Software CFD-ACE+ der ESI GmbH waren Ergebnisse von Simulationen mit CFD-ACE+ als Eingabeparameter zur Verfügung zu stellen. Abbildung 83 illustriert schematisch das Zusammenwirken von CFD-ACE+ und dem Randschichtsimulator. Die Übergabe der Parameter

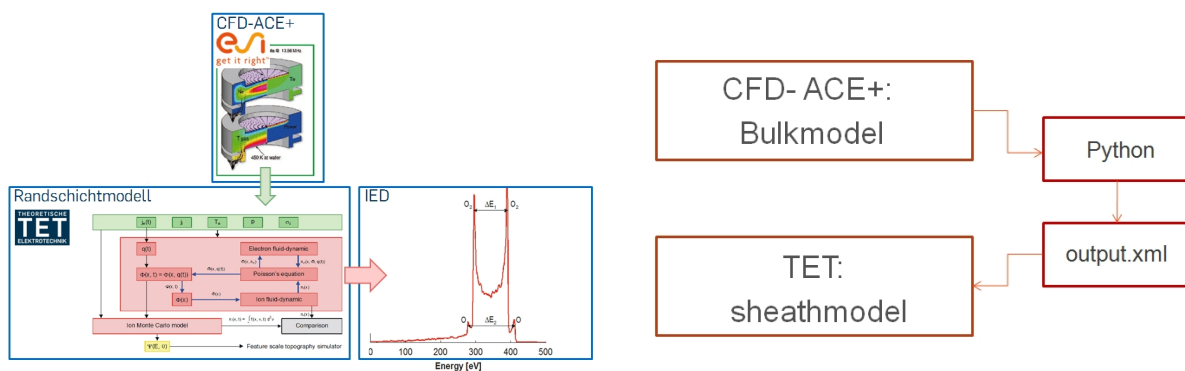


Abbildung 83: Anbindung von CFD-ACE+ an den Randschichtsimulator

aus dem Bulk-Modell von CFD-ACE+ wurde mit Hilfe von Python-Skripten realisiert, die automatisch transferiert werden. Nachdem der Nutzer die Position der zu berechnenden Ionenenergieverteilung (IED) festgelegt hat, wird im Postprocessor CFD-VIEW das Python-Skript gestartet, das die Betriebsparameter der Randschicht aus den Simulationsergebnissen von CFD-ACE+ ausliest und in eine XML-Datei⁵⁷ schreibt, die dem

⁵⁷XML: extensible markup language; erweiterbare Auszeichnungssprache

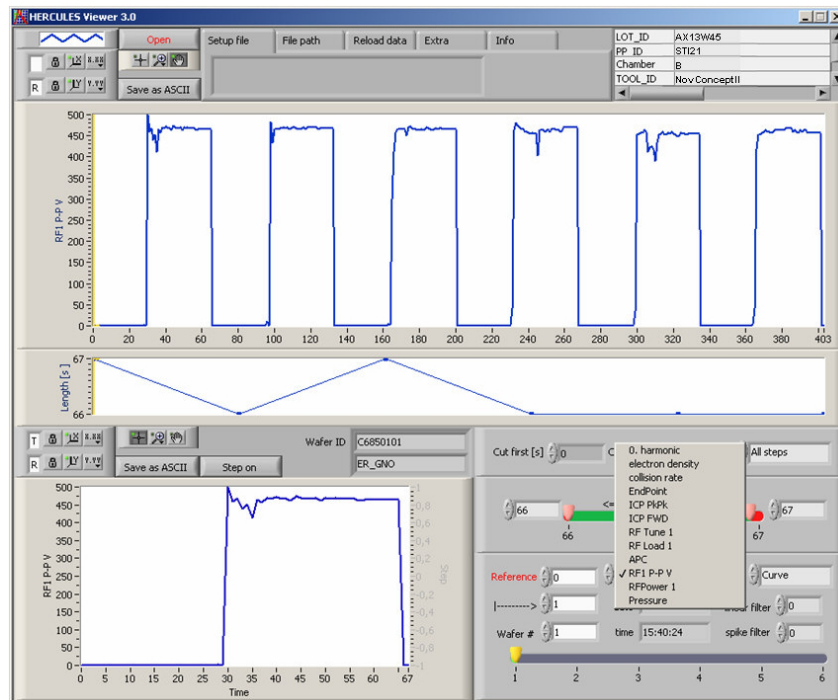


Abbildung 84: Implementierung von Toolparametern in die Auswertesoftware des Hercules[®]-Systems

Randschichtmodell als Eingabedatei dient.

Der Transfer der Daten, die das Plasmametrolgiesystem Hercules[®] liefert, und dem Randschichtmodell sollte über die Auswertesoftware HercViewer realisiert werden. Die Datenübertragung für das globale Modell kann dabei im ASCII-Format realisiert und mit einem Script eingelesen werden. In Abbildung 84 ist ein Beispiel für die HercViewer-Oberfläche dargestellt. Diese Auswertesoftware wurde im Rahmen des Projektes erfolgreich durch die Plasmatrix GmbH erweitert, um auch logistische Parameter, wie Tool_ID, Recipe und Wafer_ID, zuverlässig einzubeziehen.

Zudem erfolgten durch die Plasmatrix GmbH zahlreiche Untersuchungen zu großflächigen Beschichtungen, wie sie in der Photovoltaik üblich sind, mit dem Ziel der Verifizierung des Plasmamodells. Dabei standen die Gleichmäßigkeit des Schichtaufbaus in Abhängigkeit von der Ionenenergieverteilung, die Untersuchung des typischen Bereiches von Ionenenergieverteilungen im prozessrelevanten Druckbereich bis 1000 Pa und die Analyse der Gleichmäßigkeit der Hochfrequenz-Leistungseinkopplung in großflächigen Entladungen im Mittelpunkt. Es zeigte sich, dass die Homogenität der abgeschiedenen Schichten im Wesentlichen durch die Homogenität des Prozessplasmas bestimmt und stark von sich ausbildenden stehenden Wellen in den Plasmarandschichten (Skin-Effekt) beeinflusst wird. Neben der Kammergeometrie, die insbesondere die Ausprägung bestimmter plasmaphysikalischer Effekte begünstigt oder unterdrückt, wurde bei Messungen bei Kunden festge-

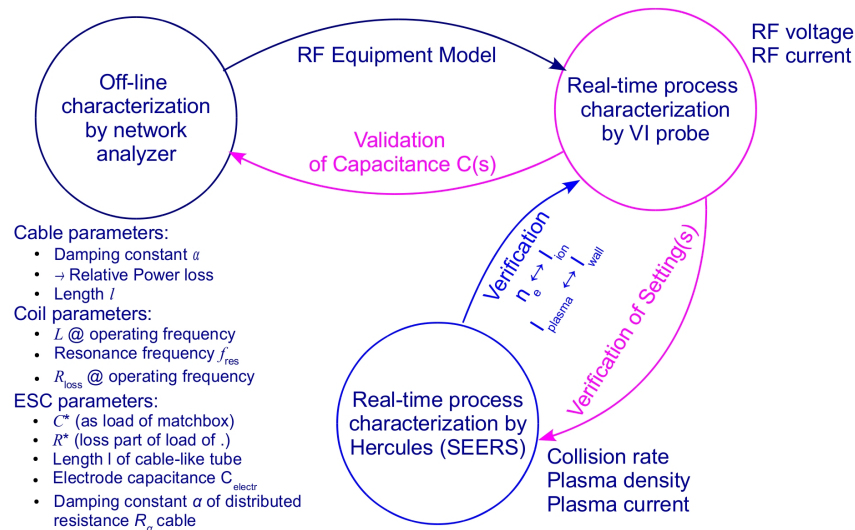


Abbildung 85: Ansätze zur Kammer- und Prozesscharakterisierung

stellt, dass besonders die Art und Weise der Hochfrequenz-Leistungseinkopplung und des zugehörigen Stromkreises einen großen Einfluss auf die Entladung hat.

Die notwendige Untersuchung der Hochfrequenz-Komponenten erfolgte mit dem Ziel, online und offline Daten sinnvoll miteinander zu verbinden. Dabei wurden unterschiedliche Ansätze und Modelle verwendet. Die verschiedenen Ansätze zur Charakterisierung der Plasmakammer und der Plasmaprozesse sind in Abbildung 85 dargestellt. Im Wesentlichen wird von drei Komponenten ausgegangen: der Offline-Charakterisierung mit einem Breitbandnetzwerkanalysator, der Echtzeitprozesscharakterisierung mit Hochfrequenz-Spannungssensoren und der Echtzeitprozesscharakterisierung mittels des Plasmamonitor Hercules®.

Die Offline-Charakterisierung stellt hierbei die Vorbedingung für die anderen beiden Komponenten dar. Sie liefert Kabelparameter, Spulenparameter und Parameter für die Leistungseinspeisung durch Spule und Kondensator (ESC). Bei der Echtzeitprozesscharakterisierung mit Hochfrequenz-Spannungssensoren werden Hochfrequenzspannung und -strom bestimmt. Die Daten werden verwendet, um die Konfiguration von Hercules® zu überprüfen bzw. korrigieren. Über die Echtzeitprozesscharakterisierung mit dem Plasmamonitor erfolgt die Ermittlung von Plasmadichte, Elektronenstoßrate, Entladungsstrom und Plasmabulkleistung. Diese Parameter werden benötigt, um plasmaphysikalische Größen, wie ionischer Energieeintrag und Ionendichte, zu bestimmen.

Wie Abbildung 86 verdeutlicht, werden die Hochfrequenz-Hardware-Parameter im äußeren grauen Bereich ermittelt. Der blaue Bereich stellt im Wesentlichen die Technologie der Plasmatrix GmbH dar. Der Kammerzustand, die reale Gaszusammensetzung und die im Plasma umgesetzte Hochfrequenzleistung können mit Hilfe der Plasmamaparameter be-

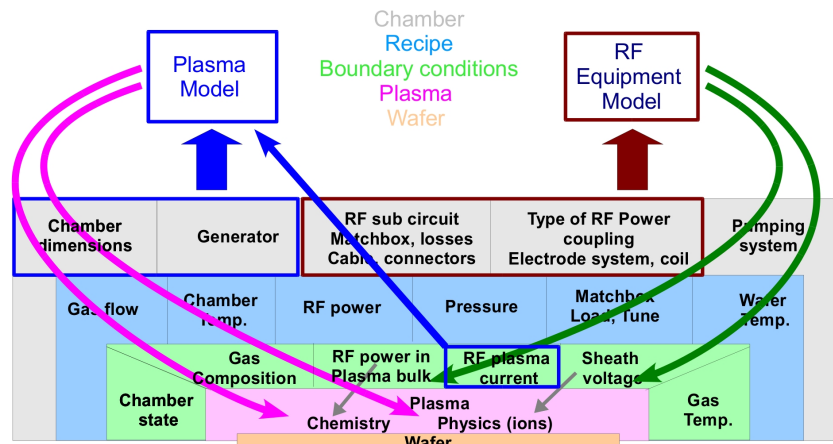


Abbildung 86: Schematische Darstellung zur Plasmabeschreibung durch Modelle

stimmt werden. Mit Verwendung eines Plasmamodells und des Hochfrequenz-Equipment-Modells, das die Hochfrequenzkabel, das Elektrodensystem und die Spule zur induktiven Leistungseinkopplung beschreibt, kann nun eine Beschreibung bzw. Charakterisierung von Plasmaprozessen wesentlich genauer erfolgen. Die Realisierung der Datenübergabe von der Plasmatrix GmbH in das Randschichtmodell des TET-RUB steht jedoch noch aus. Ebenso konnten die Anpassung an reale Plasmamaparameter und die Bereitstellung industrierelevanter Daten nicht vorgenommen werden, da die Firma SignetSolar GmbH, mit der die Plasmatrix GmbH den größten Teil für das Arbeitspaket AP5-TP4 bestritt, im Dezember 2010 Konkurs anmeldete.

AP6-TP4: Test der erstellten Software

Um das erarbeitete Randschichtmodell des TET-RUB unter Verwendung des globalen Modells zu testen, wurden Vergleiche mit Experimenten, Particle-in-Cell-Simulationen und analytischen Modellen durch den TET-RUB durchgeführt. Die Verifikation durch den Vergleich mit experimentellen Ergebnissen erfolgte in Kooperation mit der Arbeitsgruppe „Physik reaktiver Plasmen“ der Ruhr-Universität Bochum. Abbildung 87 zeigt den Vergleich von gemessener und modellierter Ionenenergieverteilung für die Anregung mit einer Rechteckfunktion von 1 MHz. Die gute Übereinstimmung zwischen Messung und Modell liefert einen ersten Nachweis für das Modell.

Im sogenannten Zwischenregime, in dem die Transitzeit der Ionen in der Größenordnung der Periodendauer der Frequenz der angelegten Spannung liegt, zeigt die Spannungs-Ladungs-Charakteristik eine Hysterese. Dieses Verhalten wurde mit dem Randschichtmodell berechnet und erfasst. Im Laufe einer Zusammenarbeit mit dem Lehrstuhl für Plasma- und Atomphysik der Ruhr-Universität Bochum und dem Research Institute for

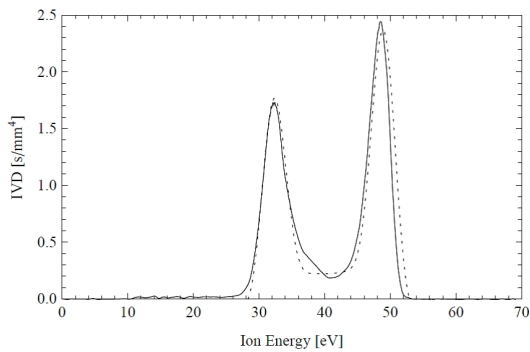


Abbildung 87: Gemessene (durchgezogene Linie) und modellierte (gestrichelte Linie) Ionenenergieverteilung als Funktion der Ionenenergie

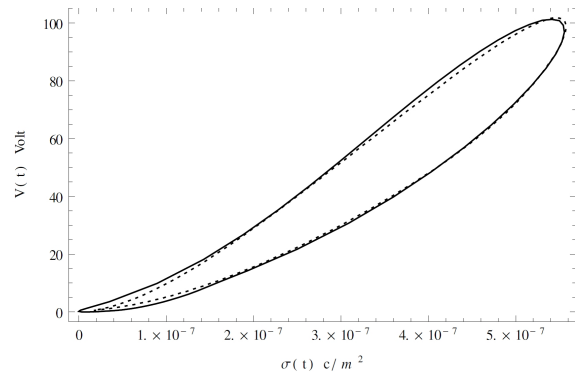


Abbildung 88: Randschichtmodellberechnung (durchgezogene Linie) und Particle-in-Cell-Simulation (gestrichelte Linie) der Spannungs-Ladungs-Kennlinie

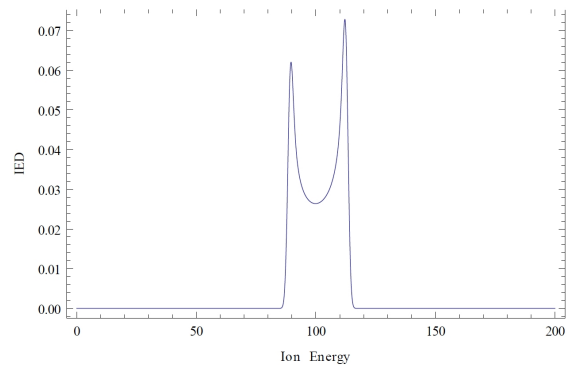
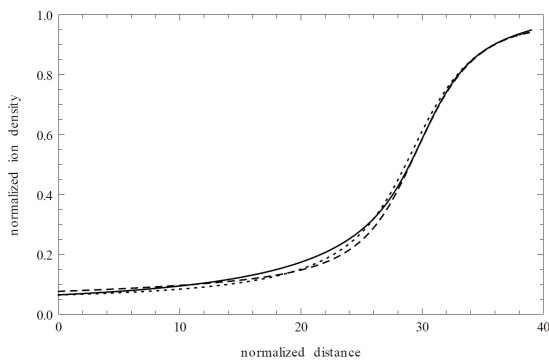


Abbildung 89: Modulation der Ionendichte (links) und die Ionenenergieverteilung an der getriebenen Elektrode (rechts) aus dem analytischen Modell

Solid State Physics and Optics, Hungarian Academy of Sciences, Budapest, Ungarn wurde dieses Phänomen auch durch ein analytisches Modell und eine Particle-in-Cell-Simulation beleuchtet und verifiziert. Die Spannung-Ladungs-Kennlinien des Randschichtmodells und der Particle-in-Cell-Simulation sind in Abbildung 88 dargestellt und zeigen gute Übereinstimmung.

Ferner wurde am Lehrstuhl für Theoretische Elektrotechnik der Ruhr-Universität Bochum ein analytisches Modell der Plasmarandschicht im Zwischenregime, in dem $\omega_{RF} \approx \omega_{Pi}$ gilt, entwickelt. Dieses analytische Modell ist auf den stoßfreien Fall limitiert und verifiziert die Ergebnisse des Randschichtmodells. Abbildung 89 zeigt Ergebnisse des analytischen Modells für die Modulation der Ionendichte und die Ionenenergieverteilung an der getriebenen Elektrode. Zusammenfassend belegen die verschiedenen Vergleiche die Anwendbarkeit des Randschichtmodells des TET-RUB.

Für die Kopplung des Randschichtsimulators mit der kommerziellen Software CFD-

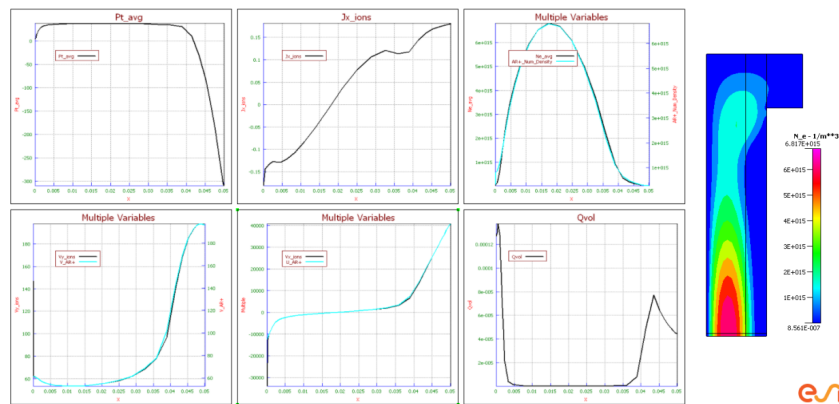


Abbildung 90: Graphische Darstellung ausgewählter Parameter von CFD-ACE+ im Teilprojekt 4

ACE+ der ESI GmbH waren Randbedingungen von Simulationen mit CFD-ACE+ zur Verfügung zu stellen. Es wurden CFD-ACE+-Simulationen bei einem Druck von 20 mTorr durchgeführt, bei der die Spannungsquelle mit 200 V und einer Frequenz von 13.56 MHz betrieben wurde. Für diese Bedingungen ist die Knudsenzahl, die ein Maß für die hydrodynamische Beschreibung eines Gases oder Plasmas darstellt, kleiner als Eins. Somit kann das Plasma als Kontinuum betrachtet und durch einen hydrodynamischen Zugang beschrieben werden.

Die Simulation lief auf zwei unterschiedlichen Zeitskalen, was auf unterschiedlich schnelle Prozesse zurückzuführen ist. Die Prozesse, wie Erzeugung und Rekombination der Teilchen, Chemie, Transport der ungerichteten Energie und Wärme, werden auf einer langsamen Skala durchgeführt. Hier wurde mit einer zeitlichen Auflösung von $10 \mu\text{s}$ gerechnet. Dagegen werden Prozesse, wie die Modulation der Spannung an der Randschicht, das dynamische Verhalten der Dichte der Elektronen oder der Transport der gerichtete Energie im Plasma auf einer schnellen Zeitskala mit einer zeitlichen Auflösung von ungefähr 1 ns durchgeführt. Der Datenaustausch zwischen den unterschiedlich schnellen Prozessen wird dabei zu jedem Zeitpunkt der jeweiligen Zeitskala durchgeführt. Die erhaltenen Ergebnisse wurden mit Python-Skripten automatisch an das Randschichtmodell transferiert. Die Skripte der ESI GmbH für die Parameterübergabe aus dem hydrodynamischen Modell von CFD-ACE+ wurden erfolgreich getestet und dem TET-RUB zur Verfügung gestellt. Zur Überprüfung der Plausibilität der aus der XML-Datei extrahierte Parameter der Simulationen mit CFD-ACE+ wird eine entsprechende grafische Ausgabe erzeugt, die in Abbildung 90 dargestellt ist. Die extrahierten Parameter werden durch den Randschichtsimulator eingelesen, und die Berechnung der Ionenenergieverteilungsfunktion kann erfolgen.

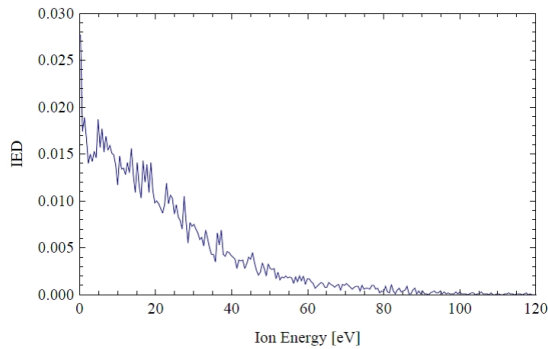


Abbildung 91: Normierte Ionenenergieverteilung als Funktion der Ionenenergie

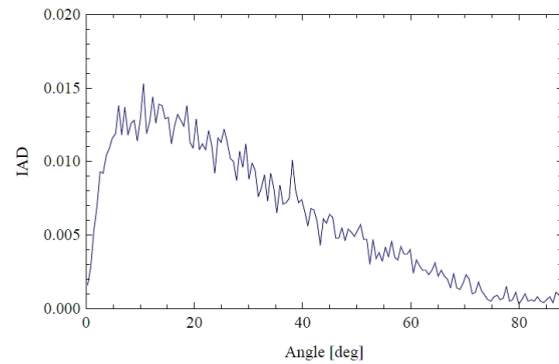


Abbildung 92: Normierte Ionenwinkelverteilung als Funktion des Eintreffwinkels

AP7-TP4: Pilotanwendung

Nach der Insolvenz des Pilotanwenders im Teilprojekt 4, der Qimonda AG, bestand zunächst die Aufgabe darin, geeignete neue Pilotanwender zu finden. Im Laufe des PT-Grid-Projektes stellte sich heraus, dass die Ergebnisse aus Teilprojekt 4 auch von akademischen Kooperationspartnern verwendet werden können. Die gefundenen Kooperationspartner aus Industrie und Wissenschaft sind auch als potentielle Nachnutzer der Ergebnisse des Teilprojektes 4 des PT-Grid-Projektes anzusehen. Im Folgenden sind die Anwendungsszenarien erläutert.

Kooperation mit S. Danko, Robert Bosch GmbH, Angewandte Forschung 1, Beschichtungstechnologien und Oberflächentechnik, Stuttgart: Ziel dieser Kooperation ist die Berechnung der Ionenenergieverteilungsfunktion (IED) und der Ionenwinkelverteilungsfunktion (IAD) auf einem Substrat in einem Silan-Plasma. Silan-Plasmen bilden die Grundlage für wichtige Prozesse bei der Herstellung von Solarzellen (unter anderem Abscheidung von Silizium und Deposition von Siliziumnitrid). Mit der Berechnung der Verteilungsfunktionen kann der Beschichtungsprozess in Planung und Durchführung signifikant verbessert werden. In einem ersten Schritt wurde dazu ein Plasmabulk-Modell mit einer reduzierten Silan-Chemie entwickelt, um die Betriebsparameter der Randschicht zu bestimmen. Dabei stellte sich heraus, dass der Teilchenfluss auf die Randschicht durch H_2^+ -Ionen dominiert wird. In den Abbildungen 91 und 92 sind die berechneten Ionenenergie- und Ionenwinkelverteilungsfunktionen gezeigt. Durch den relativ hohen Prozessdruck von 400 Pa tritt eine starke Streuung der Verteilungsfunktion über der Energie und den Eintreffwinkel auf. Ein erweitertes Modell der Silan-Chemie ist in Bearbeitung, so dass eine realitätsnähere Abbildung des Prozesses zukünftig simuliert werden kann.

Kooperation mit A. von Keudell, Arbeitsgruppe „Physik reaktiver Plasmen“, Ruhr-Universität Bochum: Wie in allen Beschichtungsprozessen hängen auch bei der Beschich-

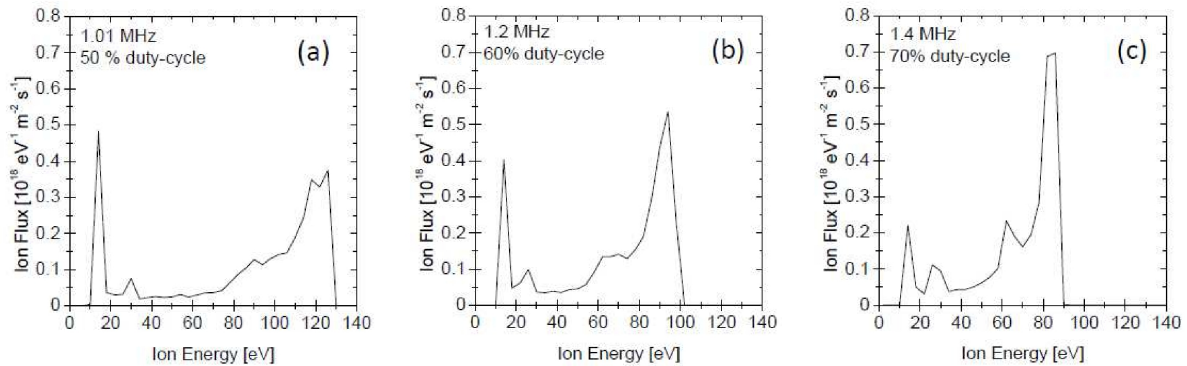


Abbildung 93: Ionenenergieverteilung für unterschiedliche Anregungsfrequenzen und Tastverhältnisse

tung mit Aluminiumoxid (Al_2O_3) der Prozess und damit die Eigenschaften der abgeschiedenen Schichten wesentlich von der Ionenenergie- und Ionenwinkelverteilungsfunktion ab. In der Arbeitsgruppe „Physik reaktiver Plasmen“ wird versucht, die Ionenenergieverteilung durch in Amplitude und Form maßgeschneiderte angelegte RF-Spannungen zu beeinflussen. Basierend auf dem Input der angelegten RF-Spannung des Experimentes wurde zum einen die Ionenenergieverteilungsfunktion berechnet. Zum anderen wurde das entwickelte Randschichtmodell angewendet, um den Einfluss der Spannung an der getriebenen Elektrode und somit auch der sich einstellenden Ionenenergieverteilung auf die Eigenschaft der abgeschiedenen Schichten zu untersuchen. Wie Abbildung 93 zeigt, kann die Ionenenergieverteilung durch die Frequenz und die Länge des Tastverhältnisses (duty cycle) der angelegten Spannung maßgeschneidert werden. Somit wird es möglich, die Charakteristiken der abgeschiedenen Schicht direkt zu beeinflussen.

Testzugang für das Randschichtportal des Teilprojektes 4: Auf der Frühjahrstagung des Fachverbands Plasmaphysik der Deutschen Physikalischen Gesellschaft 2012 in Stuttgart wurden Testzugänge für das Portal <http://sheath.tet.rub.de> des Teilprojektes 4 an Mitarbeitende folgender Institutionen ausgestellt:

- Robert Bosch GmbH, Angewandte Forschung 1, Beschichtungstechnologien und Oberflächentechnik, Stuttgart,
- Experimentalphysik V, Ruhr-Universität Bochum,
- Allgemeine Elektrotechnik und Plasmatechnik, Ruhr-Universität Bochum,
- Physikalische Grenzflächenverfahrenstechnik, Universität Stuttgart und
- Max-Planck-Institut für Plasmaphysik, Garching.

Diese Testzugänge zeigen das Interesse plasmaphysikalischer und plasmatechnologischer

Einrichtungen an den Ergebnissen des Plasma-Technologie-Grids und an seinem Online-Beratungswerkzeug.

AP8-TP4: Erstellung von Dokumentation, Schulungsunterlagen und Berichten

Das Arbeitspaket 8 des Teilprojektes 4 (AP8-TP4) umfasste die Erstellung und zentrale Ablage von Berichten, Schulungsunterlagen und anderen Materialien, wie Präsentationen auf den Projekttreffen des PT-Grids, Workshops des D-Grids und Tagungen, wie der Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft. Gemäß dem Zuwendungsbescheid verfasste die ESI GmbH, die Plasmetrex GmbH und der Lehrstuhl für Theoretische Elektrotechnik der Ruhr-Universität Bochum halbjährlich zu Mitte Februar und August eines Jahres jeweils einen Zwischenbericht, den sie dem Projektträger termingerecht zuleiteten. Die Zwischenberichte, die PT-Grid-internen Berichte [P3,P7] und die Präsentationen der Teilprojektpartner sind im Allgemeinen auf dem BSCW-Server <http://bscw.uni-duisburgessen.de/bscw/bscw.cgi/> verfügbar.

Die von der Plasmetrex GmbH angebotene Plasmaschule und der HF-Kurs für die Halbleiter- und Photovoltaikindustrie wurden unter anderem für die Erstellung der Dokumentation und Schulungsunterlagen der Plasmetrex GmbH verwendet.

AP9-TP4: Betriebswirtschaftliche und informationstechnische Bewertung am Projektende

Wie die Darstellung der vorangehenden Arbeitspakete des Teilprojektes 4 zeigt, konnten die geplanten Ziele weitgehend erreicht werden. Das Plasmarandschichtmodell des Lehrstuhls für Theoretische Elektrotechnik der Ruhr-Universität Bochum konnte erfolgreich für die Nutzung im Grid tauglich gemacht werden und ist über den in die Gesamtinfrastruktur des PT-Grids (Abbildung 5) eingebundenen Server (<http://sheath.tet.rub.de>) direkt bzw. über den PT-Grid-Portalserver (<http://portal.inp-greifswald.de>) erreichbar. Der Randschichtsimulator wurde dazu durch den TET-RUB auf die Beschreibung industrierelevanter Bedingungen erweitert und erfolgreich anhand von Anwendungen aus der Industrie und Wissenschaft getestet. Die Kopplung des validierten Randschichtmodells des TET-RUB an ein globales Modell des TET-RUB und an den Fluidsimulationscode CFD-ACE+ der ESI GmbH erlaubt es nunmehr, grundlegende wissenschaftliche Aussagen zu treffen und den Plasmaprozess im Bereich der Halbleiterherstellung industrierelevant zu simulieren. Die prinzipielle Funktionsweise der Verknüpfung des Randschichtmodells mit dem Plasmametrolgiesystem Hercules[®] konnte gezeigt werden. Die zukünftige Umsetzung kann es ermöglichen, auch durch prozessbegleitende Messungen erhaltene Daten zu verwerten.

Aufgrund der Bedeutung der Ionenenergieverteilungsfunktion bei der Wechselwirkung von Plasmen mit Oberflächen bietet der Grid-fähige Randschichtsimulator verschiedene Optionen zur weiteren Nutzung, die aus Sicht des TET-RUB eher im wissenschaftlichen Bereich gegeben sind. Aber auch Potential für den Einsatz bei Industriekunden wird gesehen. Aus Sicht der Plasmetrex GmbH ist bei der Weiterentwicklung des Online-Beratungswerkzeuges zu beachten, dass man in der Lage ist, die plasmaphysikalischen Modelle einem möglichst breiten Anwenderkreis schnell anzubieten.

AP10-TP4: Erstellung von Dokumentation, Schulungsunterlagen und Berichten

Ergänzend zu den im Arbeitspaket AP8-TP4 aufgeführten Berichten und Dokumenten erfolgte eine abschließende Zusammenfassung der Ergebnisse des Teilprojektes 4 in den PT-Grid-internen Berichten [P27, P29] der ESI GmbH bzw. des Lehrstuhls für Theoretische Elektrotechnik der Ruhr-Universität Bochum.

6.6 Literatur

- [1] I. Foster: „Globus Toolkit Version 4: Software for Service-Oriented Systems“, *J. Comput. Sci. Technol.* **21** (2006) 513-520
- [2] M. E. Porter: „Wettbewerbsvorteile - Spitzenleistungen erreichen und behaupten“, 6. Aufl. 2000, Campus, Frankfurt/Main, S. 66
- [3] <http://www.d-gridgmbh.de/fileadmin/downloads/Grid-Empfehlung-Rechtsform.pdf>, letzter Abruf am 02.08.2012
- [4] M. Schmidt: „Infrastructural Security for Virtualized Grid Computing“, Dissertation, Philipps-Universität Marburg, Marburg, Juni 2011
- [5] N. Fallenbeck: „Virtual Machine Image Management for Elastic Resource Usage in Grid Computing“, Dissertation, Philipps-Universität Marburg, Marburg, Juni 2011
- [6] D. Lebietz: „Computing minimal entropy production trajectories: An approach to model reduction in chemical kinetics“, *J. Chem. Phys.* **120** (2004) 6890-6897
- [7] P. Ziemann: „Modellreduktion der Reaktionskinetik bei der Wasserstoffverbrennung und in thermischen Luftplasmen“, Masterarbeit, Ernst-Moritz-Arndt-Universität Greifswald, Greifswald, Juli 2012
- [8] G. A. Bird: „Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows“, 1994, Oxford Engineering Science
- [9] C. K. Birdsall and A. B. Langdon: „Plasma Physics via Computer Simulation“, 2005, University of California, Livermore
- [10] A. Pflug, M. Siemers, B. Szyszka and H. Gross: „Design tools and simulations for plasma processing in large area coaters“, *SVC - 52nd Annual Technical Conference Proceedings* **52** (2009) 364-369
- [11] A. Pflug, M. Siemers, C. Schwanke und B. Szyszka: „Simulation von Plasma-Beschichtungsprozessen“, *Vakuum in Forschung und Praxis* **22** (2010) 31-34
- [12] A. Pflug, M. Siemers, C. Schwanke, B. F. Kurnia, V. Sittinger and B. Szyszka: „Simulation of plasma potential and ion energies in magnetron sputtering“, *Materials Technology* **26** (2011) 10-14
- [13] G. A. Geist: „PVM 3 beyond network computing“, *Lect. Notes Comput. Sci.* **734** (1993) 194-203

- [14] R. Hempel and D. W. Walker: „The emergence of the MPI message passing standard for parallel computing“, *Computer Standards & Interfaces* **21** (1999) 51-62
- [15] C. Geuzaine and J.-F. Remacle: „Gmsh: A 3-D finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities“, *Int. J. Numer. Meth. Engng.* **79** (2009) 1309-1331
- [16] E. Gabriel, G. E. Fagg, G. Bosilca, T. Angskun, J. J. Dongarra, J. M. Squyres, V. Sahay, P. Kambadur, B. Barrett, A. Lumsdaine, R. H. Castain, D. J. Daniel, R. L. Graham and T. S. Woodall: „Open MPI: Goals, Concept, and Design of a Next Generation MPI Implementation“, *Proc. 11th European PVM/MPI Users' Group Meeting, Budapest/Hungary* (2004) 97-104
- [17] C. Schwanke, A. Pflug, M. Siemers and B. Szyszka: „Parallel Particle-in-Cell Monte-Carlo Algorithm for Simulation of Gas Discharges under PVM and MPI“, *Lect. Notes Comput. Sci.* **7133** (2012) 213-219
- [18] A. Anders, P. Ni and A. Rauch: „Drifting localization of ionization runaway: Unraveling the nature of anomalous transport in high power impulse magnetron sputtering“, *J. Appl. Phys.* **111** (2012) 053304
- [19] A. P. Ehiasarian, A. Hecimovic, T. de los Arcos, R. New, V. Schulz-von der Gathen, M. Böke and J. Winter: „High power impulse magnetron sputtering discharges: Instabilities and plasma self-organization“, *Appl. Phys. Lett.* **100** (2012) 114101
- [20] A. V. Kozyrev, N. S. Sochugov, K. V. Oskomov, A. N. Zakharov and A. N. Odivanova: „Optical Studies of Plasma Inhomogeneities in a High-Current Pulsed Magnetron Discharge“, *Plasma Phys. Rep.* **37** (2011) 621-627
- [21] E. Martines, M. Zuin, V. Antoni, R. Cavazzana, G. Serianni, M. Spolaore and C. Nakashima: „Experimental investigation of low-frequency waves propagating in a direct current planar magnetron plasma“, *Phys. Plasmas* **11** (2004) 1938-1946
- [22] M. Brehler: „Parallelisierung einer Plasma-Randschicht-Simulation“, Bachelorarbeit, Technische Universität Dortmund, Dortmund, Germany, Feb. 2011; in Kooperation mit dem Lehrstuhl für Theoretische Elektrotechnik der Ruhr-Universität Bochum

7 Wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises

Das „Verbundprojekt: PT-Grid - Plasma-Technologie- Grid“ hatte eine Laufzeit von drei Jahren. Es hatte ein Gesamtvolumen von 1,87 Mio. € und wurde vom BMBF mit 1,47 Mio. € gefördert. Etwa 85% der Fördersumme wurde für Personalkosten aufgewendet, wovon etwa drei Viertel für die Vergütung von wissenschaftlichen Mitarbeitern Verwendung fand. Ferner waren Softwareentwickler und -berater, Systemanalytiker und ein betriebswirtschaftlicher Berater aus Projektmitteln finanziert. Zudem wurden studentische und wissenschaftliche Hilfskräfte im Rahmen des Projektes eingesetzt.

Weitere 11% der Fördersumme wurden für Unteraufträge, verwendet. Dabei entfiel der größte Teil auf die Philipps-Universität Marburg für die Umsetzung der Virtualisierung im Rahmen des Teilprojekts 1 und die Firma onScale solutions GmbH, Berlin für informationstechnische Beratung und die Entwicklung des Grid-Datenmanagements. Weitere Mittel gingen an die neoplas GmbH, Greifswald u.a. für Marketingaktivitäten, Webdesign und Webprogrammierung.

Die verfügbaren Mittel für Dienstreisen wurden für Projekttreffen und -schulungen des PT-Grids, die Teilnahme an den Beiratssitzungen des D-Grids sowie an nationalen und internationalen Tagungen und Workshops verwendet. Wichtige wissenschaftlich-technische Veranstaltungen sind in Tabelle 1 zusammengefasst. Zudem waren in geringem Maße Verbrauchsmittel und Materialien im Projekt geplant.

Die konkreten Zahlen der einzelnen Verbundpartner sind dem jeweiligen Verwendungsnachweis zu entnehmen.

8 Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Arbeit

Die Ergebnisse des Projektes konnten nur in der vorliegenden Konstellation, also einem interdisziplinären Konsortium bestehend aus Partnern aus der Industrie und der Wissenschaft aus den Bereichen Plasmaphysik und -technologie, Informationstechnik und Wirtschaftswissenschaften, erreicht werden. Es wurde ein Forschungsaufwand geleistet, der wegen seines Umfangs von den beteiligten Partnern aus Eigenmitteln nicht hätte bestritten werden können.

Die informationstechnische Umsetzung des Online-Beratungswerkzeuges erwies sich als aufwändiger und komplexer als angenommen. Die geplanten Ziele des Projektes wurden weitgehend erreicht. Die Ergebnisse zeigen erfolgreich die Möglichkeiten, aber auch die aktuellen Grenzen der Nutzung von Grid-Ressourcen, insbesondere der Ressourcen des D-Grids, im Online-Beratungswerkzeug und die Optionen seiner Verwertung. Die Weiterführung des Online-Beratungswerkzeug durch einen Teil der Projektpartner ist geplant.

9 Voraussichtlicher Nutzen und Verwertbarkeit der Ergebnisse im Sinne des fortgeschriebenen Verwertungsplanes

Eine innovative Infrastruktur und eine nutzerfreundliche Bedienoberfläche wurden für die Nutzung von Grid-Ressourcen und weiteren kundenspezifisch zur Verfügung stehenden Ressourcen für Anwender plasmatechnischer Modelle aus Industrie und Wissenschaft bereitgestellt. Plasmatechnische Modellrechnungen und umfangreiche Parameterstudien auf der Grundlage wissenschaftlicher Expertenmodelle können so direkt vom Arbeitsplatz aus gestartet und gesteuert werden.

In den vier Teilprojekten aus den Bereichen Schweißtechnik, Plasmaschichtabscheidung, Großflächenbeschichtung und Halbleiterherstellung wurde das Online-Beratungswerkzeug exemplarisch umgesetzt. Ein gemeinsames Portal dient als Benutzerschnittstelle und ermöglicht den Zugang zu den Demonstratoren im Internet über <http://portal.inp-greifswald.de>. Eine Ausweitung des Online-Beratungswerkzeugs auf wissenschaftliche Fachbereiche außerhalb der Plasmatechnologie ist unmittelbar gegeben.

Für die Nutzung der kommerziellen Software ANSYS CFX der CFX Berlin Software GmbH zur Simulation von Schweiß- und Schneidprozessen im Grid wurde unter anderem die notwendige Master-Slave-Architektur für virtuelle Maschinen umgesetzt und ein Verschlüsselungskonzept zur Erhöhung der Datensicherheit realisiert.

Das Modell zur magnetohydrodynamischen Simulation von Plasmabrenneranwendungen auf der Basis der kommerziellen Multiphysics-Software CFD-ACE+ der ESI GmbH und unter Einbeziehung von Codes des INP Greifswald steht zur Pilotanwendung im Grid zur Verfügung. Für die (kostenpflichtige) Nutzung der Software CFD-ACE+ wurde seitens der ESI GmbH ein neues, Grid-geeignetes Lizenz- und Abrechnungsmodell entwickelt und technisch umgesetzt. Dieses Pay-by-Use-Bezahlsystem wird als Abrechnungsverfahren für die kommerzielle Nutzung von Software aus dem Hause ESI offiziell angeboten und ermöglicht nachhaltig die Nutzung der Software.

Für Particle-in-Cell/Monte-Carlo- (PIC-MC-) Simulationen von Niederdruck-Plasmaentladungen in Beschichtungsanlagen wurde eine webbasierte Benutzeroberfläche zur Festlegung von Simulationsparametern und zur Jobkontrolle realisiert. Die parallelisierte Software des Fraunhofer-Instituts für Schicht- und Oberflächentechnik in Braunschweig und die Benutzeroberfläche werden im Produktivbetrieb zur Unterstützung der Entwicklung von Plasmaquellen eingesetzt.

Die Grid-fähige Kopplung eines validierten Randschichtmodells des Lehrstuhls für Theoretische Elektrotechnik der Ruhr-Universität Bochum an ein globales Modell und an

die kommerzielle Software CFD-ACE+ der ESI GmbH ermöglicht es, Ionen- und Neutralteilchenverteilungsfunktionen hinter einer Plasmarandschicht selbstkonsistent kinetisch zu berechnen, grundlegende wissenschaftliche Aussagen zu treffen und den Plasmaprozess im Bereich der Halbleiterherstellung industrierelevant zu simulieren. Bedingt durch die Bedeutung der Ionenenergieverteilungsfunktion bei der Wechselwirkung von Plasmen mit Oberflächen bietet der Grid-fähige Randschichtsimulator wissenschaftliche und wirtschaftliche Optionen zur nachhaltigen Nutzung.

Für die nachhaltige Verwertung des Online-Beratungswerkzeuges wurde ein Geschäftsmodell konkretisiert und ausformuliert, das als Grundlage der Konzeption einer Verwertungsorganisation für das PT-Grid diene. Die geplante Gründung dieser Verwertungsorganisation ist jedoch weiterhin offen, da die Rahmenbedingungen für die Verwertung nicht gegeben sind und die öffentlich geförderten Rechenressourcen des D-Grids nicht für kommerzielle Zwecke verwendet werden dürfen.

9.1 Erfindungen, Schutzrechte, Lizenzen

Erfindungen und Schutzrechte wurden von den Projektpartnern während der Projektlaufzeit nicht realisiert. Vom INP Greifswald wurden keine Middleware-Komponenten entwickelt, so dass keine intellektuellen Schutzrechte zu erwarten sind. Der erstellte Portalentwicklungsarbeitsplatz und das Portal basieren im Wesentlichen auf Open Source Software. Die Portalerstellung kann zukünftig im Rahmen von Dienstleistungsverträgen erfolgen.

Das „Pay-by-Use“-System als Abrechnungsverfahren für die kommerzielle Nutzung von Software aus dem Hause ESI wird ab dem Jahr 2012 offiziell angeboten und ermöglicht Lizezeinnahmen für die ESI GmbH.

Die Virtualisierungslösung der Philipps-Universität Marburg ist für die nichtkommerzielle Nutzung unter der GNU General Public Licence v2 verfügbar.

9.2 Wirtschaftliche Erfolgsaussichten nach Projektende

Mit der innovativen Infrastruktur und der nutzerfreundlichen Bedienoberfläche wurde das geplante Online-Beratungswerkzeug exemplarisch umgesetzt. Es ermöglicht den Zugang zu Ressourcen des D-Grids, zu internen und externen Clustern der wissenschaftlichen plasmatechnischen Berater sowie zu externen kommerziellen Ressourcen, wie z. B. von der GWDG GmbH und der T-Systems SfR GmbH.

Wie in den Geschäftsplanungen der Fachhochschule Stralsund gezeigt werden konnte, ist die wirtschaftliche Verwertung der Ergebnisse des PT-Grid-Projektes als durchaus aussichtsreich einzustufen. Allerdings besteht nach wie vor keine Perspektive für die pri-

vatwirtschaftliche Nutzung der D-Grid-Infrastruktur. Nach Einschätzung des Instituts für Roboterforschung der Technischen Universität Dortmund ist eine kommerzielle Nutzung der D-Grid-Ressourcenlandschaft nicht absehbar. Der weitere Fortgang der diesbezüglichen Klärung muss abgewartet werden, bevor eine wirtschaftliche Verwertung erfolgen kann.

Bei Ausweichen auf kommerzielle Anbieter, was als Option im Rahmen der PT-Grid-Infrastruktur zusätzlich mit vorgesehen wurde, ist eine nicht unbeträchtliche Kostensteigerung zu erwarten. Zumindest müsste hierfür die vorliegende Geschäftsplanung fast komplett überarbeitet werden. Zudem sind die Vorbehalte möglicher Kunden gegenüber Daten auf externen Servern, auch von Cloud-Anbietern, zu berücksichtigen und auszuräumen.

Wie im Abschnitt G des Kapitels 6.2 detailliert beschrieben, kommt die CFX Berlin Software GmbH zu dem Schluss, dass eine vermarktbar und zukunftsfähige Lösung für die kommerzielle Nutzung der von ihr vertriebenen Software ANSYS CFX auf Grid-Ressourcen, insbesondere D-Grid-Ressourcen, derzeit nicht absehbar ist. Sollte sich in Zukunft jedoch ein Grid-Dienstleister etablieren, so könnte sich die CFX Berlin Software GmbH gut vorstellen, als Inhalteanbieter aufzutreten.

Auch wenn für die wissenschaftlichen plasmatechnischen Berater, wie das Fraunhofer-Institut für Schicht- und Oberflächentechnik, das INP Greifswald und die Ruhr-Universität Bochum, die Erfolgsaussichten eher im wissenschaftlichen Bereich zu definieren sind, so besteht die Option, das Online-Beratungswerkzeug als Marketinginstrument einzusetzen. Zudem können die eigenen Portalzugänge und Rechenressourcen in zukünftigen öffentlich geförderten oder auch bilateralen Projekten genutzt werden.

Der Server der ESI GmbH mit dem neuen Grid-fähigen Lizenz- und Abrechnungsmo- dell ermöglicht es, kommerzielle Software aus dem Hause ESI, wie CFD-ACE+, nachhaltig zu nutzen. Das offiziell seitens der ESI GmbH angebotene Pay-by-Use-System bietet somit eine neue Option für zusätzliche Lizenzeinnahmen. Das im Rahmen der Einführung des Pay-by-Use-Systems untersuchte und von der ESI GmbH angeschaffte kommerzielle, auf FlexLM basierende Lizenzmanagementsystem macht hierbei ein abrechnungssicheres Protokollieren von Lizenznutzungszeit möglich.

Die GNS Systems GmbH beurteilt die wirtschaftlichen Erfolgsaussichten der von ihr entwickelten Portalplattform als solche positiv. Für den wirtschaftlichen Erfolg gibt es im Wesentlichen zwei Voraussetzungen: zum einen die Möglichkeit, lokale Ressourcenmanagementsysteme an das Portal anzubinden, und zum anderen die Möglichkeit, die entwickelte Oberfläche auch abseits von Liferay nutzen zu können. Die GNS Systems GmbH unterstützt ihre Kunden bei der Verwaltung ihrer HPC-Infrastruktur⁵⁸ im CAE-Umfeld⁵⁹.

⁵⁸HPC: high-performance computing

⁵⁹CAE: computer-aided engineering

Bei diesen Kunden sind derzeit ausschließlich lokale Ressourcenmanagementsysteme im Einsatz.

Für die Plasmetrex GmbH sind konkrete wirtschaftliche Erfolgsaussichten aufgrund der schwierigen wirtschaftlichen Situation nicht definierbar. Die wirtschaftliche Entwicklung lässt sich schlecht vorhersagen, da trotz positiver wirtschaftlicher Impulse die Investitionen nur zögerlich vorgenommen werden.

9.3 Wissenschaftliche und/oder technische Erfolgsaussichten nach Projektende

Die wissenschaftlich-technischen Erfolgsaussichten werden durch die wissenschaftlichen plasmatechnischen Berater als hoch eingeschätzt. Die Infrastruktur des PT-Grids wird auch zukünftig am INP Greifswald fortgeführt werden, wobei die Ressourcen des D-Grids zumindest bis Ende 2012 durch die D-Grid GmbH weiter gepflegt werden. Sie kann für wissenschaftliche Kooperationen ebenso genutzt werden wie für den Aufbau eines wissenschaftlichen Dienstleistungsnetzes für die Plasmaphysik. Von verschiedenen plasmaphysikalischen Problemstellungen konnte im Teilprojekt 2 bereits die Modellierung zur Reduktion der plasmachemischen Reaktionskinetik in der PT-Grid-Infrastruktur umgesetzt werden. Die Realisierung eigener wissenschaftlicher Programme in der PT-Grid-Umgebung bietet dabei den Vorteil, Modellrechnungen ohne externe Lizenzierung durchzuführen.

Durch die wichtige Rolle der Ionenenergieverteilungsfunktion in geradezu jedem mit einer Oberfläche in Wechselwirkung stehenden Plasmaprozess kann beispielsweise dem in Teilprojekt 4 erweiterten und Grid-fähigen Randschichtsimulator ein großes Potential zugesprochen werden. Ebenso bietet die Steigerung der Performance durch Parallelisierung der PiC-MC-Simulationssoftware im Teilprojekt 3 den Zugang, große Problemstellungen effizienter zu untersuchen. Zudem ist die Ausweitung des Online-Beratungswerkzeugs auf wissenschaftliche Fachbereiche außerhalb der Plasmatechnologie unmittelbar gegeben.

Mit der im Rahmen des Teilprojekts 1 umgesetzten Virtualisierungslösung der Philipps-Universität Marburg wurde ein technisch ausgereiftes und produktiv einsetzbares Werkzeug mit großem Potential geschaffen. Da jedoch die Rechenzentrenbetreiber diesen Lösungen skeptisch gegenüberstehen, da sie mit Sicherheitsproblemen und Performanceeinbußen rechnen, ist kaum zu erwarten, dass dieses Ergebnis im Grid-Kontext weiterentwickelt und erfolgreich eingeführt wird.

Die GNS Systems GmbH schätzt die technischen Erfolgsaussichten ihrer Portallösung als gut ein. Als technische Grundlage der Entwicklung wurde das Google Web Toolkit gewählt, welches als solide Basis einer nachhaltigen Entwicklung dienen kann.

Die Plasmetrex GmbH bietet seit einigen Jahren erfolgreich eine Weiterbildung für die

Halbleiter- und Photovoltaikindustrie an. Es ist zu prüfen, ob die PT-Grid-Ergebnisse als Online-Beratungswerkzeug im Rahmen dieser Weiterbildungskurse und weiterer Ausbildungsveranstaltungen und Schulungen auch der anderen Projektpartner nutzbar sind.

9.4 Wissenschaftliche und wirtschaftliche Anschlussfähigkeit

Die Infrastruktur des PT-Grids wird auch zukünftig am INP Greifswald fortgeführt werden, wobei die Ressourcen des D-Grids zumindest bis Ende 2012 durch die D-Grid GmbH weiter gepflegt werden. Die wirtschaftliche Anschlussfähigkeit wird maßgeblich davon abhängen, welche Grid-Ressourcen für kommerzielle Anwendungen zur Verfügung gestellt werden können und wie eine Verwertung umzusetzen ist. Eine Option zur Nutzung des Portals besteht in der Bereitstellung von Modellen des INP Greifswald und von Kooperationspartnern für wissenschaftliche Zwecke. Für einen kommerziellen Einsatz ist es denkbar, anstelle der D-Grid-Ressourcen die Ressourcen kommerzieller Anbieter (z. B. T-Systems SfR GmbH) oder auch Ressourcen des INP Greifswald zu nutzen. Diese Möglichkeiten sind in der aktuellen Infrastruktur bereits vorgesehen. Fragen der Abrechnung, Sicherheit (Firewall), des Supports usw. sind hierbei unter anderem noch zu klären.

Die Zielsetzung weiterer Arbeiten sollte aus Sicht des INP Greifswald die Integration in eine virtuelle Forschungsumgebung sein. Die in anderen D-Grid-Projekten erarbeiteten Konzepte sind zu prüfen und gegebenenfalls im PT-Grid-Portal umzusetzen. Aufgrund der Flexibilität der gewählten Portalsoftware Liferay ist eine Integration in einen größeren Zusammenhang oder die Nutzung von Ergebnissen anderer D-Grid-Projekte ohne weiteres gegeben. Die Erweiterung der Anwendungsbereiche der PT-Grid-Infrastruktur auf wissenschaftliche Dienstleistungen verspricht eine kontinuierliche Nutzung auch außerhalb der Plasmatechnologie. Es wird erwartet, dass die für den nachhaltigen Betrieb der Infrastruktur geplanten wissenschaftlichen Dienstleistungen wirtschaftlich erfolgreich umgesetzt werden können.

Seitens des Fraunhofer-Instituts für Schicht- und Oberflächentechnik ist geplant, die 3D-Simulationen in verschiedenen Projekten, z. B. dem Projekt Cosmos der Volkswagen-Stiftung und dem Projekt ORAMA im Rahmen des siebten Rahmenprogramms der Europäischen Union, einzusetzen. Im Projekt Cosmos soll versucht werden, Magnetron-Plasmen an kleinen Disc-Sputterkathoden bei relativ hohen Leistungsdichten zu simulieren. Dabei soll die Natur von Plasmafluktuationen aufgeklärt und mit experimentellen Befunden, die an der Ruhr-Universität Bochum per Hochgeschwindigkeitskamera an Magnetron-Plasmaentladungen gefunden wurden, verglichen werden. Angestrebt wird dabei die gemeinsame Veröffentlichung der erzielten theoretischen und experimentellen Ergebnisse. Im Rahmen des EU-Projekts ORAMA mit dem Thema Oxid-Elektronik soll der

Sputterprozess hinsichtlich des Ionenenergiebombardments auf dem Substrat in Abhängigkeit von den Prozessparametern qualifiziert werden. Hierzu sind ebenfalls 3D-Simulationen von Sputter-Entladungsplasmen bei unterschiedlichen Prozessparametern erforderlich.

Die potentielle Nutzung des im Teilprojekt 4 entwickelten Randschichtsimulators besitzt für den Lehrstuhl für Theoretische Elektrotechnik der Ruhr-Universität Bochum einen immensen wissenschaftlichen Mehrwert, auf den in weiteren BMBF- und DFG-Projekten, an denen der Lehrstuhl für Theoretische Elektrotechnik beteiligt ist, aufgebaut werden kann. Darüber hinaus ist geplant, auch wissenschaftliche, nichtkommerzielle Institutionen außerhalb der Ruhr-Universität zu unterstützen. Weiterhin ist konkret geplant, die Zusammenarbeit mit der Robert Bosch GmbH im Nachfolgeprojekt des BMBF-Projektes „Pluto“ fortzuführen.

Die Analysen unter anderem des Fachbereichs Wirtschaft der Fachhochschule Stralsund zeigen, dass auf Anwenderseite hohe Bedenken bezüglich der Datensicherheit in hochsensiblen industriellen Forschungsprojekten einer Anwendung auf externen Ressourcen inhaltlich entgegenstehen. Das industrielle Interesse liegt hauptsächlich auf der flexiblen Lizenzierung der Simulationssoftware, z. B. zur Anwendung auf eigenen Rechenressourcen. Für weniger sensitive Forschungsvorhaben konnte ein weitgehendes Interesse am Rechnen auf externen Rechenressourcen festgestellt werden, aber wenig Bereitschaft für finanzielle Belastungen.

Im Rahmen des Projektverlaufes hat sich die zentrale Bedeutung der Lizenzmodelle der ISV⁶⁰ für das Rechnen auf externen Rechenressourcen konkretisiert. Die abnehmende Bedeutung der Hardware gegenüber der Nutzung über flexible Lizenzen der ISV stellt die ISV in den Kernbereich zukünftiger Anwendungen, wie sie das PT-Grid-Projekt zum Ziel hatte. Ausgehend von einem wachsenden Angebot industrieller Cloud-Lösungen kann von einer zunehmenden Bedeutung der Ausrichtung der Lizenzmodelle der ISV auf Cloud-Anwendungen ausgegangen werden. Das Unternehmen ESI GmbH hat mit der praktischen Umsetzung eines Lizenzservers im Rahmen des PT-Grid-Projektes wichtige Schritte in diese Richtung unternommen. Aus heutiger Sicht wäre es für die ISV ein logischer Schritt, zum einen ihre (zu entwickelnden) Lizenzserver mit industriellen Cloud-Anbietern abzustimmen und zum anderen die Anbieter der geeigneten Plasmamodelle in das eigene Lizenzsystem mit aufzunehmen. Für die Durchführung von Berechnungen auf verteilten Ressourcen stellt dies einen aus derzeitiger Sicht machbaren Weg dar.

Als unmittelbare Perspektive für eine wirtschaftliche Verwertung bleibt aus Sicht der betriebswirtschaftlichen Begleitberatung durch die Fachhochschule Stralsund nur der Weg, dass sich die PT-Grid-Verwertungsorganisation auf fachbereichsnahes Marketing der ei-

⁶⁰ISV: independent software vendor

genen Modelle konzentriert, ohne von der Durchführung und Abrechnung von den Berechnungen auf verteilten Ressourcen betroffen zu sein. Dementsprechend können die Projektpartner diese Aufgabe bezüglich ihrer eigenen Modelle selbst wahrnehmen, mit Unterstützung des Demonstrators im PT-Grid. Zwecks organisatorischer Vereinfachung wird das PT-Grid-Portal im Nachgang vorerst vom INP Greifswald als Marketing-Portal betrieben. Die Finanzierung sollte über die Lizenzgebühren für die verwendeten Plasma-Modelle erfolgen. Mangels Pilotphase konnten detaillierte Vorgaben für ein entsprechendes Geschäftsmodell nicht fundiert entwickelt werden. Trotzdem wurde eine Geschäftsplanung erstellt, die von Erfahrungswerten für IT-basierte Start-ups ausgeht. Diese Planung kann mit zunehmender Erfahrung angepasst und in einen regulären Businessplan überführt werden.

Bezüglich der wissenschaftlichen Anschlussfähigkeit für die Anwendung betriebswirtschaftlicher Instrumente ergaben sich aus Sicht der Fachhochschule Stralsund Erkenntnisse in zwei Bereichen. Zum einen zeigte sich ein Anpassungsbedarf in der Anwendung des Modells nach Porter auf IT-basierte Dienstleistungen. Der Produktionsbereich entspricht hier einem Betriebsbereich mit spezifischen Fragestellungen. Durch den Einsatz von Portalen, die durch die Nutzer der IT-basierten Dienstleistungen selbst genutzt werden können, ergibt sich eine Verschränkung von Ein- und Ausgangslogistik. Die sich hieraus ergebenden Implikationen für auf dem Porter-Modell basierende Geschäftsmodellierungen sollen im Anschluss an das Projekt an der Fachhochschule Stralsund weiter bearbeitet werden.

Zum anderen wurde das Plasma-Technologie-Grid-Portal als Vermarktungsplattform für die am Projekt beteiligten plasmatechnischen Forschungseinrichtungen und Dienstleistungsunternehmen konzipiert. Dementsprechend werden über das Portal des Plasma-Technologie-Grids die Rechenressourcen, die plasmatechnischen Simulationsmodelle und Zusatzdienstleistungen, wie z. B. die technische und die betriebswirtschaftliche Optimierung, vermarktet. Im Rahmen des PT-Grid-Projektes hat sich ein deutlicher Bedarf gezeigt, den potenziellen Kunden des Portals eine Möglichkeit zu eröffnen, den Einsatz der einzukaufenden Ressourcen unter Kostengesichtspunkten zu optimieren. Derzeit sind Berechnungen im Plasma-Technologie-Grid hauptsächlich auf Geschwindigkeit ausgelegt. Eine wesentliche Zielgruppe des zukünftigen Plasma-Technologie-Grids sind kommerzielle Unternehmen. Deren Anforderungen variieren und erschöpfen sich nicht in der Schnelligkeit der Berechnung. Durch die Einfügung eines betriebswirtschaftlichen Kostenmoduls in das Online-Beratungswerkzeug des Plasma-Technologie-Grids sollte das Rechenergebnis zeitlich in betriebliche Abläufe eingetaktet werden. Das Rechenergebnis soll hier nicht so schnell wie möglich, sondern so schnell wie betrieblich erforderlich vorliegen. Im Portal sollte ein Modul als sogenanntes Portlet integriert werden, das dem Anwender die kosten-

günstigste Variante der verfügbaren Ressourcen anzeigt, wenn seine Berechnungen z. B. nicht schnellst möglichst, sondern zu einem bestimmten Zeitpunkt vorliegen sollen. Zu dieser Thematik wurde ein Projektvorschlag zum ersten Wettbewerbsaufruf für den Forschungsfond Mecklenburg-Vorpommern durch die Fachhochschule Stralsund eingereicht. Dieser Antrag ist dokumentiert im PT-Grid-internen Bericht „Projektkonzeption für eine Webanwendung zur betriebswirtschaftlichen Optimierung des Einsatzes von verteilten Rechenressourcen im PT-Grid“ [P18].

Wie in Abschnitt G des Kapitels 6.2 dargelegt, erachtet die CFX Berlin Software GmbH einen Grid-Dienstleister als zentralen Infrastrukturanbieter für eine weitere wirtschaftliche Nutzung des PT-Grid-Portals als notwendig. Dieser sollte die „Gridifizierung“ des Anbieters der Inhalte, d. h. des Plasmaberaters, und des Kunden des Plasmaberaters durchführen. Er würde nach Maßgabe des Plasmaberaters Software installieren, Lizenzen bereithalten und Oberflächen im Portal gestalten, so dass der Plasmaberater über die Grid-Infrastruktur seine Kunden betreuen kann. Der Grid-Dienstleister würde dabei für diese Bereitstellung und Anpassung vom Inhalteanbieter und für genutzte Ressourcen und Lizenzen vom Kunden bezahlt werden.

Für die GNS Systems GmbH erscheint die wissenschaftliche Anschlussfähigkeit ihrer Portallösung gegeben. Die Plattform wird in hohem Maße anpassbar sein, so dass dadurch vielfältige Lösungen möglich erscheinen. Eine wissenschaftliche Nutzung durch GNS Systems GmbH liegt jedoch nicht in ihrem Fokus. Die wirtschaftliche Anschlussfähigkeit wird durch die Web-2.0-Technik und das frei verfügbare Google Web Toolkit gestärkt. Dadurch entsteht eine zeitgemäße Oberfläche, von der eine hohe Akzeptanz erwartet wird. Für die wirtschaftliche Anschlussfähigkeit ist die Unterstützung lokaler Ressourcenmanagementsysteme von herausragender Bedeutung. Eine wirtschaftliche Nutzung des PT-Grid-Schedulers ist für die GNS Systems GmbH nicht vorstellbar.

10 Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen

Ergebnisse von dritter Seite, die die Nachnutzung der Projektergebnisse verhindern, sind nicht bekannt geworden.

Seit der Antragstellung haben sich jedoch die Rahmenbedingungen hinsichtlich der Grid-Technologie geändert. Aufgrund von Weiterentwicklungen im Bereich der Grid-Middleware Globus Toolkit stellt sich zum Projektende eine andere technische Ausgangssituation als zum Zeitpunkt der Antragstellung dar. Inzwischen ist das im Plasma-Technologie-Grid eingesetzte Globus Toolkit 4.0.x durch die neue Hauptversion Globus Toolkit 5 ersetzt worden. Die im PT-Grid verwendete Webservice-basierte Version wird seit Anfang 2011 nicht mehr von den Entwicklern unterstützt. Diese Entwicklung wird eine Trennung der bisherigen Implementierung von dem nicht mehr unterstützten Framework aus Sicht des Instituts für Roboterforschung der Technische Universität Dortmund zu gegebener Zeit nach sich ziehen.

Das im PT-Grid eingesetzte WSS⁶¹ ist für den Betrieb im Laufzeitcontainer des Globus Toolkit 4 konzipiert. Der WS-GRAM-Service von Globus Toolkit 4, der zum Einreichen von Berechnungsjobs bei Ressourcenanbietern Verwendung findet, wird durch den neuen Service GRAM5 aus Globus Toolkit 5 ersetzt. Weil GRAM5 nicht abwärtskompatibel zu WS-GRAM ist, erfordert diese Umstellung unter anderem weitere Arbeiten am WSS.

Der verwendete Informationsdienst MDS, der Teil von Globus Toolkit 4 ist, wird ebenfalls nicht mehr von Globus Toolkit 5 unterstützt. Der für Mitte 2011 angekündigte Nachfolger für Globus Toolkit 5 war auch Anfang 2012 nicht in einer stabilen Version veröffentlicht. Daher muss ein nachhaltiger Ersatz für den Informationsdienst gefunden werden.

Insgesamt bleibt hinsichtlich der Weiterentwicklungen im Bereich der Grid-Middleware Globus Toolkit festzustellen, dass in bezug auf die Nutzbarkeit des WSS für die Zwecke des PT-Grids die End-of-Life-Problematik von Globus Toolkit 4 nicht relevant ist. Dennoch sollte aus Sicht des Instituts für Roboterforschung der Technische Universität Dortmund aufgrund von potentiellen Sicherheitslücken im nicht mehr gepflegten Globus Toolkit 4 mittelfristig eine Umstellung erfolgen, die im Rahmen der Arbeiten des PT-Grid-Projektes nicht zu finanzieren und zu realisieren waren.

Während der Projektlaufzeit haben sich zudem weitere europäische Projekte mit der Integration kommerzieller Ressourcen, auch Clouds, in Simulationsportale befasst. Es wird zu prüfen sein, ob das Plasma-Technologie-Grid von diesen Arbeiten profitieren kann. Eine negative Auswirkung für die Nachnutzung ist nicht zu erwarten, da die Zahl der

⁶¹WSS: Workflow Scheduling Service

Anwendungsbereiche groß und die Zahl der Lösungen noch überschaubar ist.

Ferner wurde im Rahmen des Projektes durch die Projektleitung Kontakt zu verschiedenen D-Grid-Projekten aufgenommen, um nach potentiell interessanten Ansätzen bzw. Erweiterungsmodulen für den Aufbau eines wissenschaftlichen Dienstleistungsnetzes zu suchen. Ansätze wurden in den Bereichen Nutzung von virtuellen Maschinen, Visualisierungstools, Metadatenstrukturen sowie Verwaltung für wissenschaftliche Daten und Software erwartet. Die Integration ins PT-Grid war innerhalb der Projektlaufzeit aus Ressourcengründen nicht zu erwarten.

11 Erfolge und geplante Veröffentlichungen

Neben den Vorträgen auf den PT-Grid-internen Projekttreffen und -schulungen erfolgten die Dokumentation von Projektergebnissen in PT-Grid-internen Berichten, Publikationen in Journalen und Beiträge auf nationalen und internationalen Tagungen und Workshops, die auch in Form von Vorträgen und Postern präsentiert wurden. Zudem gingen aus Untersuchungen im Rahmen des Projektes Bachelor-, Diplom- und Masterarbeiten sowie Dissertationen hervor. Weiterhin wurden Arbeiten und Ergebnisse des PT-Grid-Projektes auf der Projektwebseite <http://www.pt-grid.de/> präsentiert. Die Veröffentlichungen sind im Folgenden detailliert aufgeführt.

11.1 PT-Grid-interne Berichte

- [P1] A. Spille-Kohoff, B. Bosc-Bierne, T. Harder und J. Lepping: „Evaluierung der Virtualisierungslösungen XenBEE und XGE für die Anwendung im Plasma-Technologie-Grid“, CFX Berlin Software GmbH, 30.09.2009
- [P2] M. Goeritz und M. Klotz: „Erhebung der derzeitigen Gridaktivitäten und der geschäftsorientierten Zielvorstellungen (Meilenstein 1) der plasmatechnischen Berater des Plasma-Technologie-Grid-Projektes“, Fachhochschule Stralsund, 30.10.2009
- [P3] T. Harder, M. Grzeganeck, M. Kammeyer und W. Ottow: „Klassifikationsschema für das „Online-Beratungswerkzeug“ - Pflichtenheft in Teilprojekt 2 des Plasma-Technologie-Grid-Projektes“, Leibniz-Institut für Plasmaforschung und Technologie, 09.11.2009
- [P4] J. Lepping und A. Papaspyrou: „Soll-Ist-Erfassung der Informationstechnik-Infrastruktur im PT-Grid“, Technische Universität Dortmund, 13.11.2009
- [P5] A. Spille-Kohoff und B. Bosc-Bierne: „Meilensteinbericht MT1.1“, CFX Berlin Software GmbH, 30.11.2009
- [P6] M. Goeritz: „Stellungnahme zur IT-Konzeption im PT-Grid aus betriebswirtschaftlicher Sicht“, Fachhochschule Stralsund, 07.12.2009
- [P7] T. Hemke, M. Shihab, R. P. Brinkmann, W. Ottow, M. Kammeyer und M. Klick: „Pflichtenheft in Teilprojekt 4 des Plasma-Technologie-Grid-Projektes“ Ruhr-Universität Bochum, Theoretische Elektrotechnik, 05.01.2010

- [P8] A. Spille-Kohoff und B. Bosc-Bierne: „Anforderungen an das Portal aus Teilprojekt: Simulation von Schweiß- und Schneidprozessen mit ANSYS CFX“, CFX Berlin Software GmbH, 05.02.2010
- [P9] J. Lepping, A. Papaspyrou, F. Schintke, S. Plantikow, M. Jorra und J. Niemann: „IT-Konzeption im PT-Grid“, Technische Universität Dortmund, 18.02.2010
- [P10] M. Becker: „Einrichtung eines virtuellen Computerclusters am INP Greifswald zur Nutzung im PT-Grid“, Leibniz-Institut für Plasmaforschung und Technologie, 23. Juli 2010
- [P11] T. Harder: „Optimierungsfunktionen im PT-Grid-Portal“, Leibniz-Institut für Plasmaforschung und Technologie, 20.12.2010
- [P12] A. Wegner: „Pflichtenheft für die Portalentwicklung“, Leibniz-Institut für Plasmaforschung und Technologie, 22.12.2010
- [P13] M. Goeritz: „Ergebnisbericht Meilenstein 2 Teil I (Gap-Analyse - Ergebnis der Phasentätigkeiten I.3 und Ableitung des Handlungsbedarfs - Ergebnis der Phasentätigkeiten I.4)“, Fachhochschule Stralsund, 12.04.2011
- [P14] M. Goeritz: „Kooperation PT-Grid mit GROUP Live“, Fachhochschule Stralsund, 24.04.2011
- [P15] M. Goeritz: „Kooperation PT-Grid mit GWDG“, Fachhochschule Stralsund, 24.04.2011
- [P16] T. Harder: „Konzeption einer Online-Umfrage zur Ermittlung der PT-Grid-Verwertungspotentiale im wissenschaftlichen Umfeld“, Leibniz-Institut für Plasmaforschung und Technologie, 18.05.2011
- [P17] A. Papaspyrou: „Online Steering im PT-Grid: Vorschläge zur Umsetzung in Generation 2“, Technische Universität Dortmund, 11.08.2011
- [P18] M. Goeritz, Ch. Wegner und M. Klotz: „Projektkonzeption für eine Webanwendung zur betriebswirtschaftlichen Optimierung des Einsatzes von verteilten Rechenressourcen im PT-Grid“, Fachhochschule Stralsund, 13.09.2011
- [P19] T. Harder: „Ausgangspunkt und Rahmenbedingungen für ein Science Services Network“, Leibniz-Institut für Plasmaforschung und Technologie, 13.10.2011

- [P20] M. Goeritz, R. Bemowsky und M. Klotz: „Ergebnisbericht Meilenstein 2 Teil II (Durchführung der Marktstudie - Ergebnis der Phasentätigkeit II.1)“, Fachhochschule Stralsund, 13.02.2012
- [P21] R. Bemowsky: „Marktüberblick Cloud-Anbieter“, Fachhochschule Stralsund, 29.03.2012
- [P22] M. Goeritz, R. Bemowsky und M. Klotz: „Ergebnisbericht Meilenstein 3 Teil I (Entwicklung des Geschäftsmodells - Ergebnis der Phasentätigkeit II.2)“, Fachhochschule Stralsund, 30.03.2012
- [P23] M. Goeritz, R. Bemowsky und M. Klotz: „Ergebnisbericht Meilenstein 3 Teil II (Konzeption einer „PT-Grid-Verwertungsorganisation“ - Ergebnis der Phasentätigkeit II.3)“, Fachhochschule Stralsund, 04.04.2012
- [P24] M. Klotz: „Anlage zu Ergebnisbericht Meilenstein 3 Teil II (Konzeption einer „PT-Grid-Verwertungsorganisation“ - Ergebnis der Phasentätigkeit II.3) - Geschäftsplanungen für den Planungszeitraum 2013-2017“, Fachhochschule Stralsund, 04.04.2012
- [P25] M. Klotz: „Ergebnisbericht Phase III (Auswertung der Pilotphase - Ergebnis der Phasentätigkeit III.1, Prüfung des Geschäftsmodells und der Konzeption der „PT-Grid-Verwertungsorganisation“ - Ergebnis der Phasentätigkeit III.2, Anpassung des Geschäftsmodells und der Konzeption der „PT-Grid Verwertungsorganisation“ - Ergebnis der Phasentätigkeit III.3 und Erstellung eines Aktionsplans für die Umsetzung, Konzeption der „PT-Grid-Verwertungsorganisation“ - Ergebnis der Phasentätigkeit III.4)“, Fachhochschule Stralsund, 18.04.2012
- [P26] H.-W. Mindt: „Plasma-Technologie-Grid (PT-Grid DGRID3A-01) Teilprojekt 2, Magnetohydrodynamische 3d Simulation Themenschwerpunkt: Lizenzmanagement in einer Gridumgebung“, ESI GmbH, April 2012
- [P27] W. Ottow: „Abschlussbericht zum Teilprojekt 4 des Plasma-Technologie-Grids“, ESI GmbH, April 2012
- [P28] M. Hertel: „Evaluierungsbericht - PT-Grid“, Professur für Fügetechnik und Montage, Institut für Oberflächen und Fertigungstechnik, Technische Universität Dresden, 26.04.2012
- [P29] T. Hemke und R. P. Brinkmann: „Abschlussbericht“ Ruhr-Universität Bochum, Theoretische Elektrotechnik, Mai 2012

- [P30] R. Nogowski: „Evaluierungsbericht - PT-Grid“ Kjellberg Finsterwalde Plasma und Maschinen GmbH, Mai 2012
- [P31] M. Göritz und M. Klotz: „Zuarbeit der FH Stralsund zum Endbericht des Projektkoordinators“, Fachhochschule Stralsund, 23.08.2012
- [P32] A. Spille-Kohoff und B. Bosc-Bierne: „Schlussberichtzuarbeit von CFX Berlin: Virtuelle Infrastruktur für rechenintensive Master-Slave-Prozesse im D-Grid am Beispiel der Software ANSYS CFX“, CFX Berlin Software GmbH, August 2012
- [P33] C. Grimme, M. Kemmerling und A. Papaspyrou: „Schlussbericht“, Technische Universität Dortmund, Oktober 2012
- [P34] A. Pflug und J. Niemann: „Abschlussbericht zum Teilprojekt 3 – PIC-MC-Simulation von Niederdruck-Plasmaentladungen – im Projekt Plasma-Technologie-Grid“, Fraunhofer Institut für Schicht- und Oberflächentechnik und GNS Systems GmbH, Braunschweig, November 2012

11.2 Publikationen in Journalen

- [1] „ESI and the PT-Grid project“, *ESI Talk* **38** (fall/winter 2009) 17
- [2] „ESI unterstützt das PT-Grid“, *NAFEMS Magazin* **3** (2009) 15
- [3] D. Loffhagen: „Plasma-Technologie-Grid“, in: *D-Grid – Die Deutsche Grid-Initiative: Vorstellung der neuen Projekte*, eds. L. Herpay, S. Neweling, U. Schwiegelshohn, D-Grid gGmbH Dortmund (2010) 30-31
- [4] D. Loffhagen: „Plasma-Technologie-Grid“, in: *D-Grid – Die Deutsche Grid-Initiative: Ergebnisvorstellung der Projekte der dritten Phase*, eds. L. Herpay, S. Neweling, U. Schwiegelshohn, gemeinnützige D-Grid Entwicklungs- und Betriebsgesellschaft mbH, Dortmund (2012) 32-33
- [5] C. Schwanke, A. Pflug, M. Siemers and B. Szyszka: „Parallel Particle-in-Cell Monte-Carlo Algorithm for Simulation of Gas Discharges under PVM and MPI“, *Lect. Notes Comput. Sci.* **7133** (2012) 213-219
- [6] M. Shihab, D. Ziegler and R. P. Brinkmann: „Fast, kinetically self-consistent simulation of RF modulated plasma boundary sheaths“, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **45** (2012) 185202

11.3 Konferenzbeiträge

- [1] M. Baeva: „Magnetohydrodynamic modeling of inductively coupled plasma torches with CFD-ACE+“, ESI Global Forum „Global Users Conference on Virtual Prototyping“, München (05/2010)
- [2] R. P. Brinkmann, M. Shihab, A. Wollny, T. Hemke, S. Naggary, W. Ottow und M. Klick: „Gridfähige Anbindung eines Randschichtmodells“, Symposium Plasmatechnologie-Grid, DPG-Frühjahrstagung, Kiel (03/2011)
- [3] R. P. Brinkmann und A. Wollny: „Produktivportal für die selbstkonsistente kinetische Berechnung von Ionen- und Neutralteilchenverteilungsfunktionen hinter einer Plasmarandschicht“, PT-Grid-Workshop „PT-Grid-Services für Wissenschaft und Industrie“, Ergebniskonferenz 2012 des D-Grids, Bonn (03/2012)
- [4] A. E. Elgendy, M. Shihab, D. Eremin, T. Mussenbrock, and R. P. Brinkmann: „Charge-Voltage characteristic of nonharmonically modulated plasma boundary sheaths“, WELT-PP-14, Kerkrade, The Netherlands (12/2011)
- [5] A. T. Elgendy, M. Shihab, D. Eremin, T. Mussenbrock, R. P. Brinkmann: „Nonlinear dynamics of sheath voltage characteristics for arbitrary waveforms in capacitive discharges“, DPG-Frühjahrstagung, Stuttgart (03/2012)
- [6] T. Harder, M. Klotz, U. Schwiegelshohn und D. Loffhagen: „Plasma-Technologie-Grid – PT-Grid“, 3. D-Grid All-Hands-Meeting, Dresden (03/2010)
- [7] T. Harder: „PT-Grid - Science Services Network für die Wissenschaft und den Technologietransfer“, Symposium Plasmatechnologie-Grid, DPG-Frühjahrstagung, Kiel (03/2011)
- [8] T. Harder, A. Spille-Kohoff, F. Sigener, A. Pflug und R. P. Brinkmann: „Plasma-Technologie-Grid: Serviceplattform für Wissenschaft und Industrie“, Symposium Plasmatechnologie-Grid, DPG-Frühjahrstagung, Kiel (03/2011)
- [9] T. Harder, M. Becker, A. Wegner, P. Ziemann, M. Wendt, S. Gorchakov und D. Loffhagen: „Wissenschaftliches Dienstleistungsnetz für die Plasmaphysik“, DPG-Frühjahrstagung, Stuttgart (03/2012)
- [10] T. Harder: „Einführung zum PT-Grid-Projekt“, PT-Grid-Workshop „PT-Grid-Services für Wissenschaft und Industrie“, Ergebniskonferenz 2012 des D-Grids, Bonn (03/2012)

- [11] T. Harder: „Online-Beratungswerkzeug: IT-Infrastruktur - Portalentwicklungsarbeitsplatz - Portal“, PT-Grid-Workshop „PT-Grid-Services für Wissenschaft und Industrie“, Ergebniskonferenz 2012 des D-Grids, Bonn (03/2012)
- [12] T. Harder: „Portalgesteuerte Simulation am Beispiel von PT-Grid“, gemeinsamer Workshop der Projekte MoSGrid, OptiNumGrid und PT-Grid „Simulationsservices für Industrie und Wissenschaft: Chemie, Plasmen und Mechatronik“, Ergebniskonferenz 2012 des D-Grids, Bonn (03/2012)
- [13] Th. Harder und D. Loffhagen: „Plasma-Technologie-Grid“, Ergebniskonferenz 2012 des D-Grids, Bonn (03/2012)
- [14] M. Klick, L. Eichhorn, and R. Rothe: „Quality Management and APC in Large Area PECVD“, ISMI Manufacturing Week, Austin, Texas, USA (11/2010)
- [15] D. Loffhagen und T. Harder: „Plasma-Technologie-Grid (PT-Grid)“, 2. D-Grid All-Hands-Meeting, Göttingen (03/2009)
- [16] A. Pflug, C. Schwanke, M. Siemers, B. Szyszka, and Jan Niemann: „Parallel Particle-in-Cell Monte-Carlo simulation of rarefied gas flow dynamics and gas discharges“, Symposium Plasmatechnologie-Grid, DPG-Frühjahrstagung, Kiel (03/2011)
- [17] A. Pflug: „Produktivportal für die PIC-MC-Simulation von Niederdruck-Plasmamentladungen“, PT-Grid-Workshop „PT-Grid-Services für Wissenschaft und Industrie“, Ergebniskonferenz 2012 des D-Grids, Bonn (03/2012)
- [18] A. Pflug, M. Siemers, T. Melzig, B. Szyszka und D. Rademacher: „Gasfluss- und Plasmasimulation für Niederdruck - Beschichtungsreaktoren“, NAFEMS deutschsprachige Konferenz „Berechnung und Simulation – Anwendungen, Entwicklungen, Trends“, Bamberg (05/2012)
- [19] A. Pflug, M. Siemers, T. Melzig, K. Gehrke, A. Weimar and B. Szyszka: „3D PIC-MC simulation of the ion damage in RF superimposed DC sputtering“, 4th International Symposium on Transparent Conductive Materials, Crete, Greece (10/2012)
- [20] M. Predki, M. Shihab, A. Wollny, T. Mussenbrock und R. P. Brinkmann: „Maßgeschneiderte Ionen-Energie-Verteilungsfunktionen online berechnen für Jedermann“, DPG-Frühjahrstagung, Stuttgart (03/2012)
- [21] C. Schwanke, A. Pflug, M. Siemers and B. Szyszka: „Parallel Particle-in-Cell Monte-Carlo Algorithm“, Para 2010: State of the Art in Scientific and Parallel Computing, Reykjavík, Iceland (06/2010)

- [22] M. Shihab, T. Mussenbrock, R. P. Brinkmann: „The ion energy distribution in dual radio frequency collisionless CCPs, WELTPP-12, Kerkrade, The Netherlands (11/2009)
- [23] M. Shihab, T. Mussenbrock, and R. P. Brinkmann: „The ion energy distribution in dual radio frequency collisionless CCPs“, DPG-Frühjahrstagung, Hannover (03/2010)
- [24] M. Shihab, T. Mussenbrock, and R. P. Brinkmann: „A hybrid model for capacitively coupled plasma sheaths“, Doktoranden-Workshop, Kerkrade, The Netherlands (08/2010)
- [25] M. Shihab, D. Ziegler, T. Mussenbrock, and R. P. Brinkmann: „Kinetic approach to the nonlinearity of RF modulated sheath“, 63rd Annual Gaseous Electronic Conference, Paris, France (10/2010)
- [26] M. Shihab, D. Ziegler, and R. P. Brinkmann: „Parametric study of the IED for the intermediate frequency regime in CCPs“, WELTPP-13, Kerkrade, The Netherlands (11/2010)
- [27] M. Shihab, D. Ziegler, and R. P. Brinkmann: „Self consistent model for capacitive coupled plasmas“, Plasmatechnologie PT 15, Stuttgart (03/2011)
- [28] M. Shihab, D. Ziegler, T. Baloniak, A. von Keudell and R. P. Brinkmann: „The asymmetric sheath dynamics of the intermediate RF sheath“, *Proc. 30th ICPIG, Belfast/Northern Ireland* (2011) B5-108
- [29] M. Shihab, D. Ziegler, and R. P. Brinkmann: „The dynamics of the RF sheath in capacitively coupled Plasma“, DPG-Frühjahrstagung, Kiel (03/2011)
- [30] M. Shihab, D. Eremin, T. Mussenbrock, and R. P. Brinkmann: „Self-consistent simulation of highfrequency driven plasma sheaths“, 64th Annual Gaseous Electronics Conference, Salt Lake City, Utah, USA (11/2011)
- [31] M. Shihab, A. E. Elgendy, and R. P. Brinkmann: „Temporal investigation of ion dynamics in a radio-frequency sheath“, WELT-PP-14, Kerkrade, The Netherlands (12/2011)
- [32] M. Shihab, A. T. Elgendy, I. Korolov, A. Derzi, J. Schulze, D. Eremin, Z. Donko, T. Mussenbrock und R. P. Brinkmann: „Time dependent charge-voltage characteristic for RF modulated sheath“, DPG-Frühjahrstagung, Stuttgart (03/2012)
- [33] M. Shihab, M. Prenzel, A. von Keudell und R. P. Brinkmann: „Nonlinear dynamics of RF sheath: a kinetic self consistent boundary sheath model matched to an experiment“, DPG-Frühjahrstagung, Stuttgart (03/2012)

- [34] F. Sigeneger, M. Baeva, M. Becker, A. Wegner und T. Harder: „Anwendung von MHD-Modellen thermischer Plasmen im Plasma-Technologie-Grid“, Symposium Plasmatechnologie-Grid, DPG-Frühjahrstagung, Kiel (03/2011)
- [35] F. Sigeneger: „Grid-geeignetes Lizenzmodell für Parameterstudien und Steuerung für die Software CFD-ACE+“, PT-Grid-Workshop „PT-Grid-Services für Wissenschaft und Industrie“, Ergebniskonferenz 2012 des D-Grids, Bonn (03/2012)
- [36] A. Spille-Kohoff: „CFX Berlin im Plasma-Technologie-Grid“, BMBF-Veranstaltung „Anwendungsperspektiven des D-Grid“, Bonn (12/2008)
- [37] A. Spille-Kohoff: „Nutzung von Grid-Ressourcen mittels Virtualisierung“, OptiNum-Grid-Workshop „Numerische Simulationen im D-Grid“, Göttingen (11/2009)
- [38] A. Spille-Kohoff, F. Sigeneger, A. Pflug, R. P. Brinkmann und D. Loffhagen: „Teilprojekte des Plasma-Technologie-Grids“, 3. D-Grid All-Hands-Meeting, Dresden (03/2010)
- [39] A. Spille-Kohoff: „Simulation von Schweißprozessen mit kommerziellen CFD-Lösern in Grid-Umgebungen“, Symposium Plasmatechnologie-Grid, DPG-Frühjahrstagung, Kiel (03/2011)
- [40] A. Spille-Kohoff, F. Sigeneger, A. Pflug, R. P. Brinkmann, T. Harder und D. Loffhagen: „Plasma-Technologie-Grid: Serviceplattform für Wissenschaft“, DPG-Frühjahrstagung, Stuttgart (03/2012)
- [41] A. Spille-Kohoff, F. Sigeneger, A. Pflug, R. P. Brinkmann, Th. Harder und D. Loffhagen: „Teilprojekte des Plasma-Technologie-Grid“, Ergebniskonferenz 2012 des D-Grids, Bonn (03/2012)
- [42] A. Spille-Kohoff und B. Bosc-Bierne: „Virtuelle Infrastruktur für rechenintensive Master-Slave-Prozesse im D-Grid am Beispiel der Software ANSYS CFX“, PT-Grid-Workshop „PT-Grid-Services für Wissenschaft und Industrie“, Ergebniskonferenz 2012 des D-Grids, Bonn (03/2012)
- [43] A. Spille-Kohoff und B. Bosc-Bierne: „Virtuelle Maschinen als Simulationsumgebungen im Grid“, gemeinsamer Workshop der Projekte MoSGrid, OptiNumGrid und PT-Grid „Simulationsservices für Industrie und Wissenschaft: Chemie, Plasmen und Mechatronik“, Ergebniskonferenz 2012 des D-Grids, Bonn (03/2012)

- [44] A. Spille-Kohoff, W. Ottow, A. Pflug, R. P. Brinkmann, A. Wegner, Th. Harder und D. Loffhagen: „PT-Grid-Services für Industrie und Wissenschaft“, Ergebniskonferenz 2012 des D-Grids, Bonn (03/2012)
- [45] D. Suchland: „Add-on Sensor Using Object Messaging Protocol E54.9 - Modbus/TCP“, *Proc. 11th European AEC/APC, Dresden* (2011) 263-274

11.4 Arbeiten der wissenschaftlichen Weiterbildung

- [1] F. Atteln: „Integration eines Grid-basierten Plasma-Randschicht-Modells in die Software CFD-ACE+“, Diplomarbeit, Ruhr-Universität Bochum, Bochum, Germany, Feb. 2012
- [2] M. Brehler: „Parallelisierung einer Plasma-Randschicht-Simulation“, Bachelorarbeit, Technische Universität Dortmund, Dortmund, Germany, Feb. 2011; in Kooperation mit dem Lehrstuhl für Theoretische Elektrotechnik der Ruhr-Universität Bochum
- [3] N. Fallenbeck: „Virtual Machine Image Management for Elastic Resource Usage in Grid Computing“, Dissertation, Philipps-Universität Marburg, Marburg, Juni 2011
- [4] M. Schmidt: „Infrastructural Security for Virtualized Grid Computing“, Dissertation, Philipps-Universität Marburg, Marburg, Juni 2011
- [5] P. Ziemann: „Modellreduktion der Reaktionskinetik bei der Wasserstoffverbrennung und in thermischen Luftplasmen“, Masterarbeit, Ernst-Moritz-Arndt-Universität Greifswald, Greifswald, Juli 2012; in Kooperation mit dem INP Greifswald

A Arbeitsplanung und Meilensteine

A.1 Projektleitung

Arbeitspaket (AP)	2009				2010				2011				2012			
	Q1	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4
1. Soll-Ist-Erfassung Projektbeginn																
1a: Bereich Betriebswirtschaft (BW)																
1b: Bereich Informationstechnik (IT)																
1c: Bereich Online-Beratungswerkzeug (OB)																
2. PT-Grid-Server																
2a: Aufbau																
2b: Pilotanwendung/Betreuung und Entwicklung																
3. PT-Grid-Portallösung																
3a: Entwurf und Implementierung																
3b: Entwicklerschulung: Portalprogrammierung																
3c: Optimierung Portalserver																
4. PT-Grid-Verwertungsorganisation																
4a: Gründungsplanung und Strategieentwicklung																
4b: Aufbau und Betrieb																
5. Soll-Ist-Erfassung Projektende																
5a: Bereich Betriebswirtschaft (BW)																
5b: Bereich Informationstechnik (IT)																
5c: Bereich Online-Beratungswerkzeug (OB)																
6. Internetauftritt und Werbemittel																
6a: Gestaltung und Umsetzung																
6b: Pflege und Aktualisierung																
7. Organisation PT-Grid-Projekttreffen und Schulungen																
7a: PT-Grid-Projekttreffen																
7b: PT-Grid-Schulungen																
8. Virtuelle Maschine (VM) für PT-Grid																
8a: Integration der VM																
9. Lektorat, Dokumentation, Schulungsunterlagen																
Meilensteine (MS)																
MS1: Internetauftritt online																
MS2: Zwischenbericht Soll-Ist-Erfassung																
MS3: Gründung der "PT-Grid-Verwertungsorganisation"																
MS4: Endbericht Soll-Ist-Erfassung																

Abbildung 94: Arbeitsplanung im Bereich Projektleitung

A.1.2 Konkretisierung des Geschäftsmodells

Arbeitspaket (AP)	2009				2010				2011				2012			
	Q1	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4
1. Istaufnahme und -analyse																
1a: Erhebung derzeitiger Grid-Aktivitäten		■	■													
1b: Ermittlung der geschäftsorientierten Zielvorstellungen			■													
1c: Gap-Analyse				■	■	■										
1d: Ableitung des Handlungsbedarfs																
2. Gründungsplanung																
2a: Durchführung einer Marktstudie						■	■	■	■							
2b: Entwicklung des Geschäftsmodells											■	■				
2c: Konzeption einer "PT-Grid-Verwertungsorganisation"																
3. Abschließende Soll-Ist-Analyse																
3a: Auswertung der Pilotphase																
3b: Überprüfung des Geschäftsmodells und der Konzeption der "PT-Grid-Verwertungsorganisation"																
3c: Anpassung des Geschäftsmodells und der Konzeption der "PT-Grid-Verwertungsorganisation"																
3d: Erstellung eines Aktionsplans für die Umsetzung Konzeption der "PT-Grid-Verwertungsorganisation"																
4. Lektorat, Dokumentation																
Meilensteine (MS)																
MS1: Istaufnahme abgeschlossen				■												
MS2: Vorliegen der Ergebnisse der Istaufnahme und -analyse sowie der Marktstudie												■				
MS3: Vorliegen der Konzepte zum Geschäftsmodell und der "PT-Grid-Verwertungsorganisation"																
MS4: Vorliegen der finalen Konzepte zum Geschäftsmodell und der "PT-Grid-Verwertungsorganisation"																

Abbildung 96: Arbeitsplanung für die Konkretisierung des Geschäftsmodells

A.2 Teilprojekt 1: Simulation von Schweiß- und Schneidprozessen mit ANSYS CFX im D-Grid

Arbeitspaket (AP)	2009				2010				2011				2012			
	Q1	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4
1. Soll-Ist-Erfassung Projektbeginn																
1a: Bereich Betriebswirtschaft (BW)																
1b: Bereich Informationstechnik (IT)																
1c: Bereich Online-Beratungswerkzeug (OB)																
2. Erste PT-Grid-Administration																
2a: Projekttreffen und Schulung																
2b: Anwendertreffen Pilotanwender																
3. Integration von ANSYS CFX in virtuelle Maschine (VM)																
3a: Erstellung und Pflege eines Pflichtenheftes																
3b: Einrichtung einer Grid-Infrastruktur bei CFX Berlin																
3c: Makros/Skripting für ANSYS CFX-Ausführung in VM																
3d: Vorbereitung von VM mit ANSYS CFX																
3e: Untersuchung/Realisierung VM lokal zu erstellen																
3f: Untersuchung der Lizenzmöglichkeiten																
3g: Sicherheitmechanismen Datenübertragung																
3h: Sicherheitmechanismen für laufende VM																
3i: Sicherheitmechanismen für abgelegte VM																
3j: Sicherheitmechanismen für Meta-Daten																
3k: Evaluierung/Anpassung Authentifizierungsmechanismus																
4. Erstellung einer Benutzeroberfläche																
4a: Erstellung und Pflege eines Pflichtenheftes																
4b: Web-Service-Oberfläche																
4c: Tool für Speicher- und Rechenzeitbestimmung																
4d: Monitoring																
4e: Eingriff in Löser während der Simulation																
4f: Zugriff auf vorhandene VM (Parametervariation)																
4g: Integration der Sicherheitsaspekte																
4h: Erstellung einer Hilfefunktion																
5. Betreuung der Pilotanwender																
5a: Vorbereitung von Simulationsfällen																
5b: Schulung und Unterstützung der Anwender																
5c: Aktualisierung des Lastenheftes																
6. Zweite PT-Grid-Administration																
6a: Projekttreffen und Schulung																
6b: Anwendertreffen Pilotanwender																
7. Integration ins PT-Grid																
7a: Integration der Bedienoberfläche																
7b: Portierung auf weitere Grid-Ressourcen des PT-Grids																
7c: Abrechnungsmodalitäten, Service Level Agreement																
8. Evaluierung der Portierung																
8a: der Virtualisierung auf andere Anwendungssoftware																
8b: der Virtualisierung auf andere Virtualisierungssoftware																
8c: der Virtualisierung auf andere Rechenressourcen																
9. Dritte PT-Grid-Administration																
9a: Projekttreffen und Schulung																
9b: Anwendertreffen Pilotanwender																
10. Erstellung von Dokumentation und Berichten																
11: Soll-Ist-Erfassung Projektende																
11a: Bereich BW																
11b: Bereich IT																
11c: Bereich OB																
Meilensteine (MS)																
MS1: Start der PT-Grid-Installation																
MS2: Ende der Pilotanwendung																
MS3: Abschluss der Soll-Ist-Erfassungen																

Abbildung 97: Arbeitsplanung für Teilprojekt 1

A.3 Teilprojekt 2: Magnetohydrodynamische 3d Simulation

Arbeitspaket (AP)	2009				2010				2011				2012			
	Q1	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4
1. Soll-Ist-Erfassung																
1a: INP: Online-Beratungswerkzeug (OB); Zuarbeit zu Betriebswirtschaft (BW) und Informationstechnik (IT)		■														
1b: ESI: Zuarbeit zu BW, IT, OB		■														
2. Grundinstallation von CFD-ACE+																
2a: INP: Installation		■														
2b: ESI: Basepack-Installation und Lizenzbereitstellung		■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■
3. Aufbau PT-Grid-Server für Teilprojekt 2																
3a: INP: Grid-Server-Installation, Wartung, Upgrade		■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■
3b: ESI: Absprachen Software- und Hardwareanforderungen		■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■
4. Produktion: Lizenzmodell und Abrechnungssoftware																
4a: INP: Zuarbeit			■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■
4b: ESI: Lizenzmodell und Abrechnungssoftware für PT-Grid			■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■
5. Produktion																
5a: INP: Online-Hilfe-Funktion, PT-Grid-spezifische Endnutzeroberfläche			■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■
5b: ESI: Beratung zu AP 5a			■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■
6. Pilotanwendung																
6a: INP: Test Grid-adaptierter Modellrechnungen					■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■
6b: ESI: Nutzerbetreuung					■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■
7. Soll-Ist-Abschlussanalyse																
7a: INP: OB; Zuarbeit zu BW und IT																
7b: ESI: CFD-ACE+ Programmsteuerung; Zuarbeit zu OB																
8. Lektorat, Dokumentation, Schulungsunterlagen																
8a: INP: OB; Zuarbeit zu BW und IT			■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■
8b: ESI: CFD-ACE+ Programmsteuerung; Zuarbeit zu OB			■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■
Meilensteine (MS)																
MS1: Erfassung des Ist-Zustandes abgeschlossen; Pflichtenheft OB erstellt; Schulungen erfolgt.			31.10.2009													
MS2: Test und Pilotanwendungen sowie Prüfungen anhand der Pflichtenhefte durchgeführt.										31.10.2011						
MS3: BW- und IT-Bewertung abgeschlossen; Endbericht erstellt.															29.02.2012	

Abbildung 98: Arbeitsplanung für Teilprojekt 2

A.4 Teilprojekt 3: PIC-MC-Simulation von Niederdruck-Plasmaentladungen

Arbeitspaket (AP)	2009				2010				2011				2012			
	Q1	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4
1. Soll-Ist-Erfassung																
1a: IST: Funktionalität der Software		■														
1b: IST, GNS: Bedienoberfläche																
1c: IST, GNS: Bedarfsanalyse zu Ressourcen, Datensicherheit																
2. D-Grid-Integration																
2a: IST, GNS: Anpassung auf Globus-Toolkit-Middleware																
2b: IST, GNS: Portierung von PVM auf MPI			■													
3. Benutzeroberfläche																
3a: IST: CAD-Modellerstellung																
3b: IST, GNS: Geometrieingabe mittels Benutzeroberfläche																
3c: IST: Durchführen von Simulationen																
3d: IST, GNS: Darstellung von Ergebnisdaten																
4. Pilottests																
4a: IST: Pilotanwender-Testrechnungen																
4b: GNS, IST: Anpassungen der Benutzeroberfläche																
5. Abschließende Soll-Ist-Erfassung																
5a: IST, GNS: Dokumentation																
5b: IST,GNS: Erstellung von Berichten																
Meilensteine (MS)																
MS1: D-Grid-Integration				4.12.2009												
MS2: Oberfläche								02.03.2010								
MS3: Ende Pilottests																01.11.2011

Abbildung 99: Arbeitsplanung für Teilprojekt 3

A.5 Teilprojekt 4: Selbstkonsistente kinetische Berechnung von Ionen- und Neutralteilchenverteilungsfunktionen hinter einer Plasmarandschicht

Arbeitspaket (AP)	2009				2010				2011				2012			
	Q1	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4
1. Erfassung des Ist-Status																
1a: TET: Benchmark Randschichtmodell (RSM)																
1b: ESI: Benchmark CFD-ACE+																
1c: Plasmatrix: Benchmark HERCULES																
2. Einarbeitung und Schulung																
2a: TET: Einarbeitung in CFD-ACE+ und HERCULES																
2b: ESI: Einarbeitung in Randschichtsimulator																
2c: Plasmatrix: Einarbeitung in Randschichtsimulator																
3. Definition von Pflichtenheften																
3a: TET: Globales Modell (GM), Randschichtsimulator (RSS)																
3b: ESI: Kopplung RSS - CFD-ACE+																
3c: Plasmatrix: Kopplung RSS - HERCULES																
3d: Prüfung durch Pilotanwender																
4. Umsetzen des Randschichtsimulators																
4a: TET: Umsetzung auf gridfähige Infrastruktur																
4b: TET: Interface-Implementation RSM-HERCULES																
4c: TET: Modellintegration in CFD-ACE+																
5. Implementierung der Interfaces																
5a: TET: Implementierung Aufruf RSM durch CFD-ACE+																
5b: ESI: Unterstützung von AP 5a																
5c: Plasmatrix: Interface-Implementation in HERCULES																
5d: TET: Unterstützung von AP 5c																
6. Test der erstellten Software																
6a: TET: Gridfähige Kombination aus RSM und GM																
6b: ESI: in Fluidsimulator integrierter Plasmasimulator																
6c: Plasmatrix: Aufruf RSM aus HERCULES																
7. Pilotanwendung																
7a: Evaluierung durch Pilotanwender																
7b: TET: Support des Pilotanwenders																
8. Dokumentation, Schulungsunterlagen																
8a: TET: Erstellung der Dokumente																
8b: ESI: Erstellung der Dokumente																
8c: Plasmatrix: Erstellung der Dokumente																
9. Bewertung																
9a: TET, Plasmatrix: Betriebswirtschaftliche Bewertung																
9b: TET, Plasmatrix: Informationstechnische Bewertung																
10. Erstellung von Dokumentation und Berichten																
10a: TET: Anpassung an PT-Grid-Gesamtstruktur/Korrekturen																
10b: ESI: Korrekturen																
10c: Plasmatrix: Korrekturen																
Meilensteine (MS)																
MS1: Erfassung des Ist-Zustandes abgeschlossen; Pflichtenheft für alle Realisationen erstellt und geprüft; Schulungen haben stattgefunden.																
MS2: Test und Pilotanwendungen sowie Prüfungen anhand der Pflichtenhefte durchgeführt.																
MS3: Betriebswirtschaftliche und informationstechnische Bewertung durchgeführt.																

Abbildung 100: Arbeitsplanung für Teilprojekt 4

B Inhaltsverzeichnis des PT-Grid-Wikis

Inhalt

1. PT-Grid-Referenzsystem
 - (a) Aufbau eines Minimalsystems
 - i. Grid-Middleware
 - ii. LRMS-Headnode
 - iii. Clusterknoten
 - (b) Zugriffsmöglichkeiten
2. Installation von VMware Server 2
 - (a) Hinweise
3. Erstellen des virtuellen Clusters
4. Installation des Betriebssystems
 - (a) Installation von Debian GNU/Linux 5.0 oder Ubuntu Linux
 - i. Hinweise
5. Einrichten des virtuellen Clusters
 - (a) Installation zusätzlicher Software
 - (b) Netzwerkkonfiguration
 - (c) Einrichten eines passwortlosen Rootzugangs
 - (d) Einrichten eines gemeinsamen Dateisystems
6. Einrichtung von Authentifizierungen
 - (a) Erzeugen eines passwortlosen Zugangs mittels Schlüsselpaaren
 - i. Erzeugen eines SSH-Schlüssels auf dem Headnode
 - ii. Kopieren des SSH Key auf jeden Worknode
 - iii. Einrichten des SSH-Dienstes auf jedem Workernode
 - iv. Validierung der korrekten SSH-Konfiguration
 - v. Einrichten eines Bi-direktionalen SCP-Zugangs
 - (b) Herstellung eines Vertrauensverhältnisses zwischen Workernodes und Globus-knoten

- i. Konfiguration des SSH-Dienstes für rechnerbasierte Authentifizierung
 - A. Auf Seite des Globusknotens
 - B. Auf Seite aller Workernodes
 - C. Test der Verbindung
7. Installation eines Batch-Systems
 - (a) Aufbau von Torque/PBS
 - (b) Installationsanleitung für Torque
8. Installation von Globus Toolkit als Basis-Middleware
 - (a) Installationsanleitung für Globus Toolkit 4.0.8
 - i. Voraussetzungen
 - ii. Download des Toolkits
 - iii. Installation zusätzlicher Software
 - iv. Netzwerkkonfiguration
 - v. Installation von Globus Toolkit
 - vi. Installation der Root-CA und des Hostzertifikats
 - vii. Konfiguration des Grid-Mapfiles
 - viii. Konfiguration von GridFTP
 - ix. Konfiguration von GSI-OpenSSH
 - x. Konfiguration von RFT
 - (b) Starten des Globus-Containers
9. Kopplung des Rechenclusters an Globus Toolkit
 - (a) Einrichten eines gemeinsamen Dateisystems
 - (b) Konfiguration des Zugriffs auf das Batchsystem
10. Konfiguration von Ganglia und WebMDS
 - (a) Installation und Konfiguration des WebMDS
 - (b) Einbinden der WebMDS-Informationen
11. Installation und Konfiguration des PT-Grid-Portals
 - (a) Installation

- (b) Konfiguration
 - i. Datenbank
 - ii. E-Mail
 - iii. Authentifizierung
 - (c) Installationsleitfaden für Portalsysteme mit GWT-basierten Grid-Portlets (EN)
 - i. Installation CA-certificates
 - ii. Creating a robot certificate
 - iii. Creating a server certificate
 - iv. Tomcat SSL Installation
 - v. Liferay installation on top of tomcat
 - vi. Installing gridftp
 - vii. Deploying portlets
 - viii. Deploying servlets
12. Portletentwicklung mit Liferay/GWT
- (a) Eine mögliche Entwicklungsumgebung
 - (b) Codegeneratoren
 - i. Weiterentwicklung
 - (c) Beispiel: Portlet für die Lizenzauslastungsanzeige
 - i. Datenbereitstellung (JSON)
 - ii. Abholen der JSON-Daten
 - iii. Einbau Google Chart API
 - (d) Beispiel: Ansprechen des PT-Grid-Schedulers
13. Generation N Data Management System
14. GNDMS Installation Guide
- (a) Prerequisites
 - i. Prepare your local software installation
 - A. Install the Java 2 SE Development Toolkit Version 1.6
 - B. Install Apache Ant 1.7
 - C. Install Local UNIX Software

- D. Install Globus Toolkit 4.0.8
 - E. Optionally Configure Globus Toolkit Logging
 - ii. Preparation of GNDMS Software
 - A. Download and Unpack GNDMS
 - B. Optionally Install Apache buildr 1.4.1 Locally
 - (b) Installation and Deployment from Distribution Package
 - (c) Gridconfiguration of GNDMS Software
 - i. Migrating from a Previous Installation
 - ii. Installation and Initial Deployment
 - (d) Testing your Installation
 - i. About
 - ii. Setup
 - iii. Running the Test Client
 - iv. Testing your C3 Installation
 - v. Trouble Shooting
 - vi. Remote Access to container.log
 - vii. Resetting the Database
 - viii. Inspecting the Database
 - ix. Using the Monitor Shell
 - (e) Building GNDMS from Source
 - i. Quick Rebuild
 - ii. Regeneration of Javadocs
 - iii. Building Manually from Scratch
 - iv. Packaging GNDMS
 - v. Problem Shooting Tips for Development Builds
15. GNDMS Architecture Primer
- (a) The Layers of the Software Stack
 - (b) Components
 - i. Component Categories
 - ii. Components
 - (c) Suggested Code Walkthrough

16. GNDMS Developer Guide

- (a) Writing Webservice Clients
 - i. Setup a Development Environment
- (b) Setup a Development Environment for Debugging
 - i. Writing a Web Service Client
- (c) Notes on Certificate Delegation
 - i. Security Descriptor Basics
 - ii. Authentication and Authorization
 - iii. Client-Side Delegation
 - iv. Server-Side Delegation
 - v. Using Delegation with Proxy Certificate
 - A. Service Orchestration
 - B. Export Proxy Credentials to a File
 - vi. How to send a delegation EPR to the GORFX-service
- (d) Contract Semantics
 - i. Protocol
 - ii. Contract Structure
 - iii. Contract Semantics
 - iv. Generic Client Restrictions
 - v. C3-Grid Data Provider Server Restrictions
 - vi. Support for Missing Timing Estimates
 - vii. Contract Invariants

17. Glossary

18. GNDMS Monitor Shell Guide

- (a) Executing Actions
- (b) Executing Groovy Code
 - i. List of Supported Monitor Shell Run Modes
- (c) Appendix
 - i. Troubleshooting
 - ii. Tips for Script Developers

19. Legal Information

- (a) Impressum (DE)
 - i. Rechtliche Grundlagen
- (b) Impressum (EN)
 - i. Legal Grounds
- (c) License

C Inhaltsverzeichnis des PT-Grid-Portal-Wikis

Inhalt

1. Willkommen

- Administration
 - Projektadministration
 - Nutzerverwaltung
 - Ressourcenverwaltung
 - * Antragsformular
 - * Ressourcenübersicht
 - Verfügbare D-Grid-Ressourcen
 - verfügbare PT-Grid-Ressourcen
 - Verfügbare kommerzielle Ressourcen
 - Integration Ihrer eigenen Ressourcen
 - * PT-Grid-Ressourcenmonitoring
 - * D-Grid-Ressourcen-Monitoring
 - INP-Server-Administration
 - T-Systems-Server-Administration
 - ESI-Server-Administration
 - GWDG-Server-Administration
- Impressum
- Danksagung
- PIWIK-Webseitenanalyse
- Google Analytics - Website Analysis
- Wiki-Bearbeitung

2. Direkter Grid-Zugang

- Run: GSI-SSHTerm

3. Geführter Grid-Zugang

- Zum geführten Grid-Zugang

4. PT-Grid-Demoseiten

- Run: Virtual Machine Creation (extern)
- Run: Welding and Cutting
- Run: Magnetohydrodynamik
- External Server Access: Particle-in-Cell-Monte-Carlo Simulation (extern)
- Run: Plasma-Sheath Calculations (extern)

5. Plasmaphysik

- Run: Plasma-QSSA
- Run: Plasma Transport Parameters
- Run: 0-d Atmospheric Plasma Calculations
- Run: Plasma-Oberflächenwechselwirkung

6. Lehrunterstützung

- Plasma-QSSA - Übung 1

Berichtsblatt

1. ISBN oder ISSN keine	Berichtsart (Schlussbericht oder Veröffentlichung) Schlussbericht	
3. Titel Schlussbericht des BMBF-Verbundprojekts PT-Grid - Plasma-Technologie-Grid		
4. Autor(en) [Name(n), Vorname(n)] Loffhagen, Detlef	5. Abschlussdatum des Vorhabens April 2012	
	6. Veröffentlichungsdatum 22.11.2012	
	7. Form der Publikation -	
8. Durchführende Institution(en) (Name, Adresse) Leibniz-Institut für Plasmaforschung und Technologie e.V. Felix-Hausdorff-Str. 2 17489 Greifswald	9. Ber. Nr. Durchführende Institution entfällt	
	10. Förderkennzeichen 01IG09001 A-I	
	11. Seitenzahl 228	
12. Fördernde Institution (Name, Adresse) Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) 53170 Bonn	13. Literaturangaben 22	
	14. Tabellen 7	
	15. Abbildungen 100	
16. Zusätzliche Angaben keine		
17. Vorgelegt bei (Titel, Ort, Datum) Projektträger Softwaresysteme und Wissenstechnologien im Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V., Rosa-Luxemburg-Str. 2, 10178 Berlin, 26.11.2012		

18. Kurzfassung

Das im Rahmen der Förderbekanntmachung „Grid-Dienste für Wirtschaft und Wissenschaft“ im Förderprogramm „IKT2020 - Forschung für Innovationen“ durchgeführte Projekt „PT-Grid - Plasma-Technologie-Grid“ hatte als Ziel, ein praxisorientiertes Online-Beratungswerkzeug zu etablieren, das eine Grid-basierte Modellierung und Simulation von plasmatechnologischen Anwendungen ermöglicht. Für die Anwender plasmatechnischer Modelle aus Industrie und Wissenschaft sollten eine nutzerfreundliche Bedienoberfläche und eine industrietaugliche Sicherheitsarchitektur bereitgestellt werden, die auf etablierten Diensten des D-Grids basieren und die vertragsgebundene Nutzung der Grid-Infrastruktur ermöglichen.

Die Durchführung des Projektes erfolgte in einer interdisziplinären Zusammenarbeit von Partnern aus der Industrie und der Wissenschaft aus den Bereichen Plasmaphysik und -technologie, Informationstechnik und Wirtschaftswissenschaften. Das PT-Grid-Projekt bestand aus vier Teilprojekten aus den Bereichen Schweißtechnik, Plasmaschichtabscheidung, Großflächenglasbeschichtung und Halbleiterindustrie, in denen im Allgemeinen jeweils ein plasmatechnischer Berater, die notwendigen Partner aus dem Bereich der Informationstechnik und einer oder mehrere Pilotanwender aus der Industrie oder Wissenschaft integriert waren, die Interesse an einer kommerziellen Nutzung der Projektergebnisse hatten. Ausgangspunkt der Teilprojekte war jeweils ein industriell oder wissenschaftlich genutztes plasmatechnisches Modell, das zur Optimierung von plasmatechnischen Anlagen und Verfahren entwickelt wurde und im Rahmen des Projektes auf die Anwendung in einer Grid-Infrastruktur vorbereitet wurde.

Im Ergebnis wurden eine innovative Infrastruktur und eine nutzerfreundliche Bedienoberfläche für die Nutzung von Grid-Ressourcen und weiteren kundenspezifisch zur Verfügung stehenden Ressourcen für Anwender plasmatechnischer Modelle aus Industrie und Wissenschaft bereitgestellt. Ein gemeinsames Portal dient als Benutzerschnittstelle und ermöglicht den Zugang zu den Demonstratoren der vier Teilprojekte im Internet über <http://portal.inp-greifswald.de>. Plasmatechnische Modellrechnungen und umfangreiche Parameterstudien auf der Grundlage wissenschaftlicher Expertenmodelle können so direkt vom Arbeitsplatz aus gestartet und gesteuert werden. Eine Ausweitung des Online-Beratungswerkzeugs auf wissenschaftliche Fachbereiche außerhalb der Plasmatechnologie ist unmittelbar gegeben.

Für die nachhaltige Verwertung des Online-Beratungswerkzeugs wurde ein Geschäftsmodell konkretisiert und ausformuliert, das als Grundlage der Konzeption einer Verwertungsorganisation dient. Die geplante Gründung einer Verwertungsorganisation für das PT-Grid ist weiterhin offen, da die Rahmenbedingungen für die Verwertung nicht gegeben sind und die öffentlich geförderten Rechenressourcen des D-Grids nicht für kommerzielle Zwecke verwendet werden dürfen.

19. Schlagwörter

PT-Grid, Plasma-Technologie-Grid, Plasmaphysik und -technologie, Modellierung und Simulation; D-Grid, Grid-Computing, -Scheduling, -Datenmanagement, -Portal, Virtualisierung, Parallelisierung; Online-Beratungswerkzeug, Geschäftsmodell, Lizenz- und Abrechnungsmodell

20. Verlag
keiner

21. Preis
kostenfrei

Document Control Sheet

1. ISBN or ISSN None	type of document (e.g. report, publication) Final report
3. title Schlussbericht des BMBF-Verbundprojekts PT-Grid - Plasma-Technologie-Grid	
4. autor(s) [family name, first name(s)] Loffhagen, Detlef	5. end of project April 2012
	6. publication date 22.11.2012
	7. form of publication -
8. performing organization(s) (name, address) Leibniz-Institut für Plasmaforschung und Technologie e.V. Felix-Hausdorff-Str. 2 17489 Greifswald	9. organizer's report no. none
	10. reference no. 01IG09001 A-I
	11. no. of pages 228
12. sponsoring agency (name, address) Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) 53170 Bonn	13. no. of references 22
	14. no. of tables 7
	15. no. of figures 100
16. supplementary notes none	
17. presented at (title, place, date) Projektträger Softwaresysteme und Wissenstechnologien im Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V., Rosa-Luxemburg-Str. 2, 10178 Berlin, 26.11.2012	

18. abstract

The project „PT-Grid - Plasma-Technologie-Grid“, performed in the framework of the funding announcement „Grid-Dienste für Wirtschaft und Wissenschaft“ in the funding programme „IKT2020 - Forschung für Innovationen“, aimed at the establishment of a practice-oriented online consulting tool which makes Grid-based modelling and simulation of plasma-technological applications possible. A user-friendly user interface and an industrial-suited security architecture were to provide for users of plasma-technical models which are based on established services of D-Grid and allow for an articulated use of the infrastructure of the Grid.

The project was performed in an interdisciplinary collaboration of partners from industry and science from the areas plasma physics and technology, information technology and economic sciences. The PT-Grid project consisted of four sub-projects from the areas welding technology, film deposition by plasma techniques, large-area glass coating and semiconductor industry where in general a plasma-technical consultant, the necessary partners from the area of information technology as well as one or several pilot users from industry or science were integrated, which had interest in a commercial utilization of the results of the project. The starting point of the sub-projects was always an industrially or scientifically used plasma-technical model that had been developed for the optimization of plasma-technical systems or processes and was prepared for the application in a Grid infrastructure in the framework of the project.

As a result, an innovative infrastructure and a user-friendly user interface for the use of Grid resources and further customer-specifically available resources were provided for users of plasma-technical models from industry and science. A common portal serves as user interface and makes the access to the demonstrators of the four sub-projects on the internet via <http://portal.inp-greifswald.de> possible. Thus, plasma-technical model calculations and extensive parameter studies based on scientific models of experts can be started and controlled directly from the place of work. An extension of the online consulting tool to scientific fields beyond plasma technology is immediately given.

A business model was concretized and formulated for a sustainable utilization of the online consulting tool which serves as basis of the conception of a utilization organization. The planned foundation of a utilization organization for the PT-Grid is still open because the circumstances for a utilization are not given and the publicly sponsored computing resources of D-Grid must not be used for commercial purposes.

19. keywords

PT-Grid, Plasma-Technology-Grid, plasma physics and technology, modelling and simulation; D-Grid, Grid computing, Grid scheduling, Grid data management, Grid portal, virtualization, parallelization; online consulting tool, business model, licence model, accounting and billing model

20. publisher

None

21. price

Free of charge