

Grid-Computing und e-Science

M. Kunze, H. Marten, HIK

Einleitung

Einer der wichtigsten Erfolgsfaktoren für die Spitzenforschung und Industrie wird zukünftig darin bestehen, jederzeit schnell und standortunabhängig auf weltweit verteilte Daten und IT-Ressourcen zugreifen zu können. Die Grundlage dazu bildet eine hochkomplexe, weltweit vernetzte Informationsinfrastruktur mit differenzierten Zugangs- und Administrationsmechanismen, für die sich allgemein der Begriff „Grid-Computing“ etabliert hat [1]. Der Ausdruck Grid-Computing wurde dabei geprägt durch die Assoziation mit dem elektrischen Stromnetz (Power Grid). In der Tat war die ursprüngliche Motivation für Grid-Computing, dass Rechenkapazität in gleicher Weise universell und transparent zur Verfügung gestellt werden soll, wie dies heute für elektrische Energie der Fall ist. Allerdings ist dieser Vergleich nicht voll zutreffend, da es beim elektrischen Strom nur wenige anzu-passende Parameter gibt (Spannung und Frequenz), wohingegen beim Austausch von Rechnerleistung wesentlich mehr Grundeigenschaften zu berücksichtigen sind: So können sich Zielrechner z.B. unterscheiden in Architektur, Betriebssystem, Anbindung an das Netzwerk und vielem mehr. Gerade in dieser technischen Vielfalt liegen viele grundsätzliche Probleme, die noch nicht alle vollständig untersucht und gelöst sind. Ausgehend von dieser ursprünglichen Sichtweise wird das Grid-Computing heute vielfach umfassender definiert als die sichere, flexible, koordinierte und gemeinsame Nutzung von Ressourcen innerhalb virtueller Organisationen

[4]. Als Ressourcen sind in diesem Zusammenhang neben Rechenkapazität auch Daten und Instrumente, sowie im weitergehenden Sinne Personen zu verstehen. Virtuelle Organisationen werden hierbei dynamisch gebildet aus einer Menge von global verteilten Institutionen. Beispiele für Virtuelle Organisationen sind Application Service Provider oder Konsortien von Firmen die gemeinsam ein neues Produkt entwickeln wollen (z.B. ein Auto oder Flugzeug), aber auch internationale wissenschaftliche Kooperationsprojekte: Es ist abzusehen, dass kooperative Problemlösungsumgebungen zukünftig in vielen Bereichen von Industrie und Wissenschaft eine signifikante Rolle spielen werden und damit einen wesentlichen Einfluss auf die Entwicklung globaler Informationsinfrastrukturen, insbesondere das Internet, ausüben.

e-Science

Der Begriff e-Science (im Sinne von „enhanced“ Science) wurde geprägt von Dr. John Taylor, dem Vorsitzenden des britischen Wissenschaftsrates: „e-Science is about global collaboration in key areas of science, and the next generation of infrastructure that will enable it.“ Die e-Science ermöglicht eine neuen Qualität der wissenschaftlichen Zusammenarbeit weltweit agierender Kollaborationen: Die grundlegende Voraussetzung dafür ist die allgemeine Verfügbarkeit umfangreicher Datensammlungen im Internet, sowie der Zugang zu sehr großen verteilten Computer-Ressourcen und hoch performanten Visualisierungstools an den Arbeitsplät-

zen der beteiligten Wissenschaftler.

Das World Wide Web hat Standards geschaffen für den weltweiten Zugang zu Information jeglicher Art. Zur Unterstützung der e-Science ist eine weitergehende Standardisierung und die Bildung einer ungleich mächtigeren Infrastruktur zwingende Voraussetzung. Neben den Informationen auf Webseiten benötigen die Wissenschaftler einfachen Zugang zu teuren Instrumenten, zu verteilten Teraflop-Maschinen und Farmen preiswerter Personalcomputer, sowie Hochgeschwindigkeitsnetze, um Terabytes an Informationen in verteilten Datenbanken abzufragen.

Das Grid definiert eine Architektur, die alle diese Dinge zusammenbringt und damit die Vision der e-Science in greifbare Nähe rückt: e-Science umfasst als Konzept die Anwendung der Grid-Technologie für vielfältige Disziplinen, wie etwa für Hochenergie- und Astrophysik, Biowissenschaften und Medizin oder Geo- und Umweltforschung, unter Einbeziehung von Experimentgroßgeräten (Beschleuniger, Satelliten, Tomographen u. a.) einerseits und den Aufbau von regional verteilten Massendaten-Archiven und deren Bereitstellung für differenzierte Informationsanalysen andererseits. In diesem Sinne wäre eine Konsolidierung von Datenbankformaten über Grenzen von Arbeitsgruppen hinweg denkbar etwa im Bereich der Genomforschung oder Astronomie. So könnten z.B. im Falle der Beobachtung einer künftigen Supernova-Explosion Wissenschaftler die Aufzeichnungen aus der Astronomie mit den

Beobachtungen der Gravitationswellen-Experimente sowie mit den Messdaten von Neutrino-detektoren aus der Teilchenphysik korrelieren: Der erkenntnistheoretische Mehrwert einer solch umfassenden Methodik liegt auf der Hand.

Grid-Architekturen

Eines der schwierigsten Probleme beim Entwurf von Grid-Systemen liegt in der allgemeinverbindlichen Definition von Protokollen und Diensten, die eine Interoperabilität von Systemen und Anwenderprogrammen überhaupt erst garantieren. Als Sammelbegriff für die benötigte standardisierte Vermittlungs- und Verwaltungssoftware wird allgemein der Begriff „Middleware“ verwendet. Die Middleware stellt die untere Schicht des Grid-Computing dar, auf welche verteilte Anwendungen aufbauen können. Beispiele für derartige Anwendungen sind Simulationsrechnungen in der Hochenergie- und Astroteilchenphysik sowie in der Medizin oder der Zugriff auf verteilt gespeicherte sehr große Datenbanken. Die Middleware zur Konstruktion eines Grid muss dabei folgendes leisten [3]:

- Koordination und Koallokation von Ressourcen, ohne einer zentralen Kontrollinstanz unterworfen zu sein
- Verwendung offener Standardprotokolle und Schnittstellen
- Realisierung nichttrivialer komplexer Dienstqualitäten durch Zusammenschalten von globalen Ressourcen

In der Praxis führen diese Forderungen zur Einrichtung von sog. Web-Services für die zu verwendenden Ressourcen, die global sichtbare Funktionalitäten bieten wie z.B. Verzeichnisdienste zum Aufspüren von Ressourcen, Resource-Broker zur dynamischen Vermittlung, sowie Scheduler zum Buchen und zur Inanspruchnahme von Ressourcen. Die Sicherheitsproblematik kann gelöst werden durch den Einsatz von PKI¹⁾-gestützten Verfahren zur Authentifizierung auf der Basis von ISO-konformen Zertifikaten.

Ein lokales Computercluster mit einem zentral verwalteten Batch-System bildet nach diesen Vorgaben allerdings noch kein Computing Grid (Ein solches Angebot würde analog in etwa dem Fall entsprechen, dass ein Kunde seine Elektrogeräte zum Betrieb in ein bestimmtes Kraftwerk transportieren müsste). Die genannten Kriterien werden aber realisiert in den aktuellen groß angelegten Grid-Projekten, wie z.B. GriPhyN, PPDG, EU DataGrid, CrossGrid oder LHC Computing Grid: Alle diese Projekte integrieren dynamisch Ressourcen aus verschiedenen Institutionen, von denen jede mit ihren eigenen Betriebsregelungen und Sicherheitsmechanismen aufwartet; als gemeinsame Basis für die Middleware wird das am Argonne Lab entwickelte Globus Toolkit [2] verwendet zur Koallokation von Ressourcen und der Adressierung von Problemen im Bereich Sicherheit, Zuverlässigkeit und Durchsatz. Die neueste Entwicklung geht dabei in Richtung standardisierter Web-Services, sog. Grid-Services, welche

es erlauben, eine verteilte Applikation aus normierten, weltweit verstreuten Komponenten mit allgemein anerkannten und offenen Schnittstellen aufzubauen. Unter Einhaltung des künftigen Industriestandards „Open Grid Services Architecture“ (OGSA) [5] spielt es dabei auch keine Rolle, ob zusammen geschaltete Komponenten und Dienste aus der Unix-Welt oder aus der Windows Welt stammen. Generell wird so auch eine Zusammenarbeit zwischen Applikationen ermöglicht, die auf verschiedener Middleware-Technologie basieren, wie z.B. UNICORE, DotNet usw.

Netzwerke

Eine zwingende Voraussetzung zur Realisierung von Grid-Computing ist die Existenz einer Breitbandvernetzung mit Quality-of-Service-Garantie. Mit dem vom DFN-Verein betriebenen G-WiN steht der Wissenschaft in Deutschland eine der weltweit modernsten Kommunikationsinfrastrukturen zur Verfügung. Hierdurch entsteht ein nachhaltiger Standortvorteil, der vor dem Hintergrund einer zunehmenden Globalisierung über die Wissenschaft hinaus von sehr großer Bedeutung ist. Den Kern des G-WiN bildet ein bundesweites Hochgeschwindigkeitsdatennetz auf modernster Glasfasertechnologie. Die Teilnehmer des G-WiN können Anschlüsse mit bis zu 2,5-Gigabit/s-Kapazität, später auch bis zu 10 Gigabit/s erhalten, wobei die etwa 700 deutschen Wissenschaftseinrichtungen Zugang erhalten über 29 Knotenpunkte. Der

¹⁾ Public Key Infrastructure

regionale G-WiN-Knoten für Nordbaden und die Südwestpfalz befindet sich im Rechenzentrum des Forschungszentrums Karlsruhe.

Europa ist ebenfalls gut gerüstet: Mit Förderung der Europäischen Union wurde das GEANT-Netzwerk eingerichtet, welches die europäischen Länder über eine Datenautobahn im Bereich von bis zu 10 Gigabit/s verbindet; der deutsche Aufpunkt befindet sich in

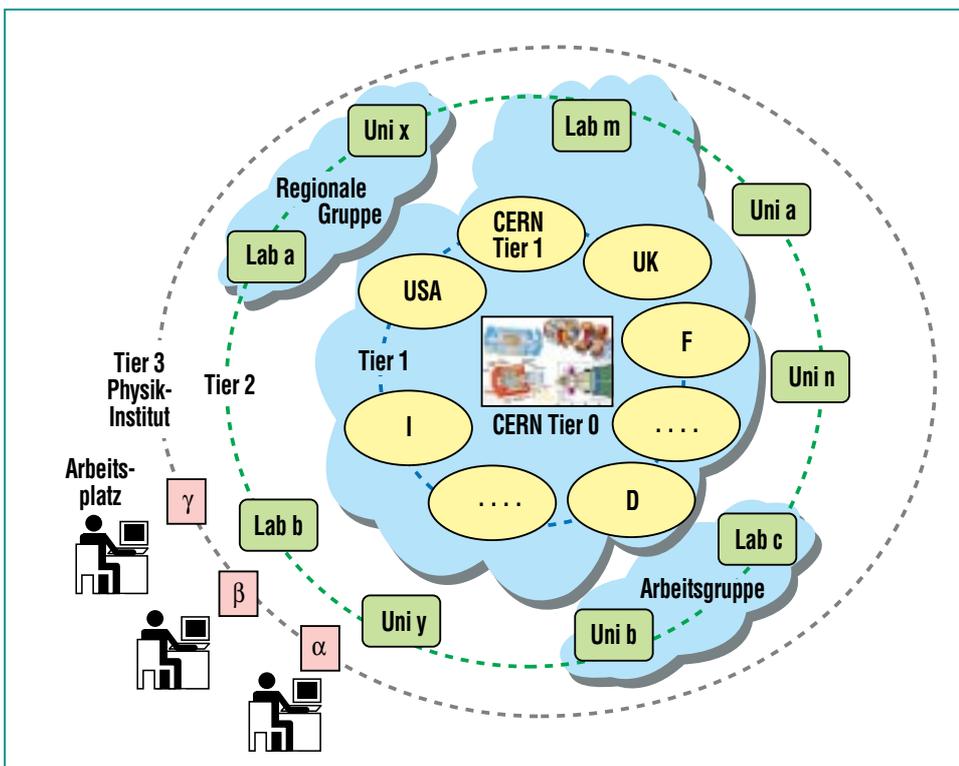
Frankfurt. Die Anbindung des GEANT-Netzwerks zu amerikanischen Partnern wird realisiert durch eine 2.5-Gigabit/s-Leitung zum StarLight-Knotenpunkt in Chicago. In den Vereinigten Staaten wird das momentan wohl ehrgeizigste Vernetzungsvorhaben vorangetrieben: TeraGrid. Es ist hier das Ziel, über StarLight in Synergie Ressourcen zu nutzen zwischen dem Argonne-Laboratorium und NCSA im Osten einer-

seits sowie dem Supercomputerzentrum in San Diego (SDSC) und Caltech im Westen andererseits. Die Anbindung der Zentren untereinander wird realisiert mit einer Bandbreite von zunächst 40 Gigabit/s: Bis zu 10 Terabyte Daten können somit in nur einer halben Stunde über den amerikanischen Kontinent hinweg transferiert werden. Darüber hinaus stehen für verteilte Anwendungen insgesamt 14 Teraflop Computerleistung und 750 Terabyte Online-Speicher zur Verfügung.

Die Internationalität der Verbundanstrengungen im Kontext des Grid-Computing wird über die Einbeziehung des Angebots des G-WiN hinaus auch hierzulande die Auseinandersetzung mit innovativen Kommunikationstechniken wie optische Netztechnik und Wellenlängen-Multiplexing unabdingbar machen und eine entsprechende DGRID-Initiative wäre geeignet, in Zukunft die Kapazitäten in den deutschen Forschungszentren für die Forschung zu erschließen.

Das LHC-Computing-Grid-Projekt

Als Beispiel für ein aktuelles Grid-Computing-Vorhaben soll an dieser Stelle das LHC-Computing-Grid-Projekt besprochen werden: Das laufende Forschungsprogramm bei CERN erfordert den Bau des bisher weltweit leistungsfähigsten Teilchenbeschleunigers, des Large Hadron Collider (LHC). Mit dem LHC soll der Ursprung der Masse untersucht werden, eine der grundlegendsten Fragen der Wissenschaft. Das Institut erwartet im



Das Computing-Modell des LHC. Die Grundlage bilden weltweit verteilte Ressourcen, wobei jede der Ebenen (Tier) eine bestimmte Funktion hat. Die Rohdaten der Experimente werden am CERN gespeichert und vorverarbeitet (Tier-0), große Regionalzentren übernehmen die Speicherung der rekonstruierten Daten und produzieren mit Monte-Carlo-Methoden simulierte Ereignisse (Tier-1), gefilterte Datenströme fließen zu nationalen Rechenzentren (Tier-2) und zu lokalen Rechenzentren (Tier-3), ausgewählte Datensätze stehen schließlich an den Arbeitsplätzen der Wissenschaftler zur Verfügung (Tier-4). Alle einer bestimmten virtuellen Organisation dynamisch zugeteilten Ressourcen bilden ein verteiltes, virtuelles Rechenzentrum, auf das alle Mitglieder der Organisation transparenten Zugriff haben, vermittelt durch die Grid Middleware (Grid-Wolke).

Rahmen seiner Untersuchungen ein immenses Aufkommen an Daten, die ausgewertet und verarbeitet werden müssen. Dazu sollen weltweit freie oder ungenutzte Prozessor- und Speicher-Kapazitäten von Zehntausenden von Computern zu einem Daten-Netzwerk (einem sog. DataGrid) zusammengefasst werden. Das Grid Computing stellt einen der neuesten Ansätze dar, um den enormen Bedarf an Rechen- und Speicher-Kapazitäten solch umfassender Projekte zu decken und nutzt das Internet und die darin enthaltenen Computerressourcen. Tausende Wissenschaftler von Universitäten auf der ganzen Welt werden bei der Analyse der gesammelten Daten zusammenarbeiten. Hierbei ist die Idee, die Daten nicht wie bisher an einem Ort vorzuhalten und zu verarbeiten, sondern diese auf mehrere Zentren zu verteilen und transparent zu nutzen [6]: In der MONARC-Studie [7] wurde gezeigt, dass ein hierarchisches System mit verschiedenen Ebenen (Tiers) den Anforderungen gerecht wird. In diesem Modell hat CERN als Tier-0 die Aufgabe, Ex-

perimentdaten zu speichern und zu rekonstruieren. Die Analyse sowie die Erzeugung simulierter Ereignisse wird vor allen Dingen in regionalen Tier-1-Zentren stattfinden, gefolgt von nationalen Tier-2-Zentren, Institutsrechnern (Tier-3) und Arbeitsplatzrechnern (Tier-4).

Neben CERN, RAL, IN2P3 und vielen anderen hochrangigen Forschungszentren wird sich auch das Forschungszentrum Karlsruhe an diesem Projekt beteiligen: Die Hauptabteilung Informatik- und Kommunikationstechnik (HIK) wird als Kompetenzzentrum zur Weiterentwicklung und Anwendung der Grid-Technologie beitragen; auf der Ressourcenseite wird mit dem „Grid-Computing Centre Karlsruhe (GridKa)“ in den nächsten Jahren ein beachtliches Potenzial an Computerleistung und Speicherplatz geschaffen, welches Zugang zu einer neuen Qualität wissenschaftlichen Arbeitens eröffnen wird [8,9]. Obwohl die Datennahme der vier Großexperimente ATLAS, ALICE, CMS und LHCb bei LHC erst im Jahre

2007 beginnt, werden schon jetzt Prototypen für die Datenverarbeitung gebaut, sog. Testbeds, mit jährlich wachsender Funktionalität und Komplexität, um die kritischen Parameter des weltweiten Computing-Modells zu untersuchen und zu optimieren. Darüber hinaus bietet GridKa schon jetzt Ressourcen zur Auswertung der Daten für vier weitere in Produktion befindliche Experimente der Kern- und Teilchenphysik (BaBar am SLAC, D0 und CDF am FermiLab, COMPASS am CERN). Es ist das Ziel der Aufbauarbeiten, Ressourcen für alle Experimente möglichst gemeinsam bereitzustellen, um durch Synergie-Effekte Einsparungen bei den Gesamtkosten zu erreichen; an den durch GridKa versorgten Experimenten nehmen in Deutschland insgesamt mehr als 400 Wissenschaftler aus 41 Instituten teil. Eine weitere wichtige Aufgabe besteht darin, dass GridKa weltweit als zentrale Instanz zur Ausstellung von Grid-Computing Zertifikaten für die deutsche Kern- und Teilchenphysik anerkannt ist.

Literatur

- [1] I. Foster, C. Kesselman, *The Grid: Blueprint for a New Computing Infrastructure*, Morgan Kaufmann Publ. 1999.
- [2] *The Globus Project*, <http://www.globus.org/>
- [3] I. Foster, *What is the Grid?*, <http://www.gridtoday.com/02/0722/100136.html>
- [4] I. Foster, C. Kesselman, S. Tuecke, *The Anatomy of the Grid: Enabling Scalable Virtual Organizations*, *International J. Supercomputer Applications*, 15(3), 2001.
- [5] I. Foster, C. Kesselman, J. Nick, S. Tuecke, *The Physiology of the Grid: An Open Grid Services Architecture for Distributed Systems Integration*. June 22, 2002. <http://www.globus.org/research/papers/ogsa.pdf>
- [6] Report of the Steering Group of the LHC Computing Review, CERN/LHCC/2001-004, http://lhc-computing-review-public.web.cern.ch/lhc-computing-review-public/Public/Report_final.PDF
- [7] *MONARC Phase 2 Report*, CERN/LCB 2000-001, <http://monarc.web.cern.ch/MONARC/docs/phase2report/Phase2Report.pdf>
- [8] P. Braun-Munzinger et al., *Requirements for a Regional Data and Computing Centre in Germany (RDCCG)*, <http://grid.fzk.de/grid/LHCComputing-1july01.pdf>
- [9] H. Marten et al., *A Grid Computing Centre at Forschungszentrum Karlsruhe*, <http://grid.fzk.de/grid/RDCCG-answer-v8.pdf>