

Das Virtuelle Rechenzentrum Karlsruhe – Beispiel einer engen Kooperation zwischen Großforschung und Universität

K. Mickel, HIK; W. Juling, Universität Karlsruhe

Einleitung

Seit 1993 veröffentlichen die Universitäten Mannheim und Tennessee gemeinsam jeweils im Juni und im November jedes Jahres die Liste TOP500, die einen aktuellen Überblick über die 500 leistungstärksten Computer der Welt gibt und auf deren Erscheinen die Fachwelt stets mit großer Ungeduld wartet [1]. Die theoretisch erreichbare Spitzenleistung von Hoch- und Höchstleistungsrechnern wird in dieser Liste in der hier üblichen Einheit Flop/s (floating point operations/second) angegeben; dieses Maß gibt an, wie viele Rechenschritte der jeweilige Computer pro Sekunde theoretisch maximal durchführen kann. Im Juni 1993 lag die summierte Leistung aller damals in der Liste TOP500 aufgeführten 500 Hochleistungsrechner bei $1,7 \times 10^{12}$ Flop/s, also bei 1,7 Teraflop/s. Nur neun Jahre später, im Juni

2002, betrug die summierte Spitzenleistung der 500 leistungstärksten Computer der Welt bereits 220 Teraflop/s; der auf Platz 1 stehende leistungstärkste Computer der Welt, der japanische „Earth Simulator“, leistet alleine 35,8 Teraflop/s. Aus Abbildung 1 ist zu entnehmen, dass die Rechenleistung der Höchstleistungsrechner dieser Welt sich alljährlich etwa um den Faktor 1,79 erhöht. Knapp die Hälfte der in der TOP500-Liste aufgeführten Computer ist dabei wissenschaftlichen Einrichtungen zuzurechnen, woraus man erkennen kann, dass auch und gerade der Rechenzeitbedarf der Wissenschaft ungestüm zunimmt, ohne dass ein Ende dieser Entwicklung absehbar wäre. Das gilt ganz besonders für naturwissenschaftlich-technisch orientierte Einrichtungen wie die Universität und das Forschungszentrum Karlsruhe.

Universität und Forschungszentrum – zwei namhafte Forschungseinrichtungen in Karlsruhe

Die Universität Karlsruhe (14.600 Studierende, etwa 4.000 Beschäftigte) ist die älteste technisch orientierte Universität in Deutschland. Nur 10 km von ihr entfernt befindet sich das Forschungszentrum Karlsruhe; hier arbeiten etwa 3.500 Mitarbeiter auf den Gebieten Struktur der Materie, Erde und Umwelt, Gesundheit, Energie sowie Schlüsseltechnologien. Die Institute des Forschungszentrums und der Universität arbeiten seit jeher auf zahlreichen Gebieten sehr eng zusammen, und es gibt in großem Umfang gemeinsame wissenschaftliche Arbeitsgruppen und Institute. Als sich das wissenschaftliche Rechnen in den 60er-Jahren zu einer

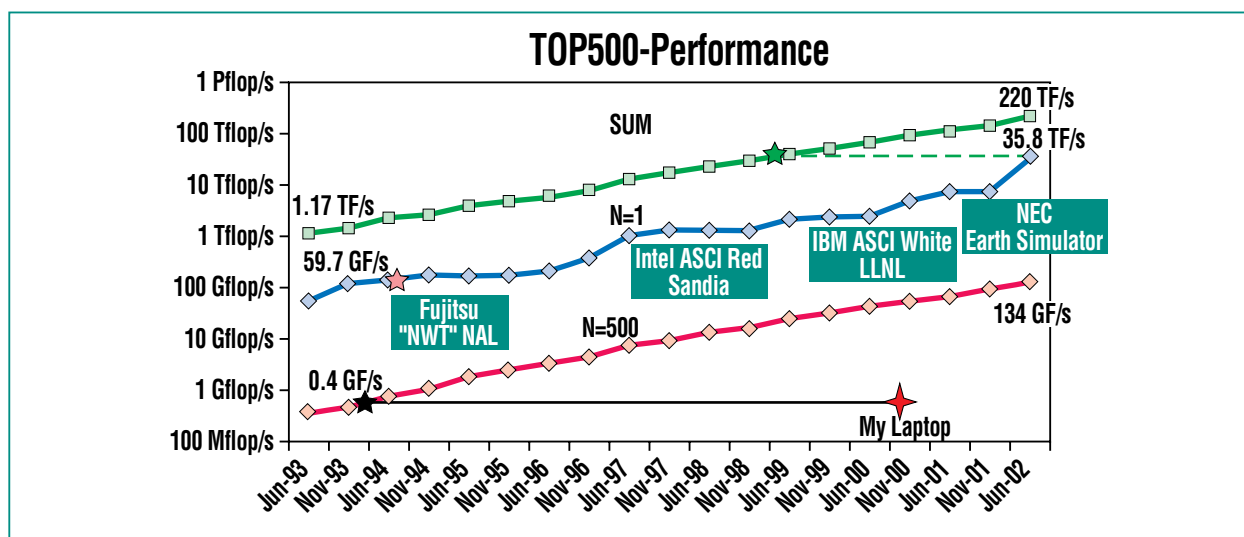


Abb. 1: Entwicklung der Leistungsfähigkeit der 500 weltweit leistungstärksten Höchstleistungsrechner von 1993 bis 2002. Die mit N = 1 markierte Kurve zeigt die Entwicklung der Leistungsfähigkeit des jeweils erstplatzierten, N = 500 die des jeweils letztplatzierten Computers in den einzelnen Listen. „SUM“ gibt die summierte Leistungsfähigkeit aller 500 Höchstleistungsrechner der jeweiligen TOP500-Liste an. (Quelle: <http://www.top500.org>)

zunehmend wichtigeren Komponente naturwissenschaftlicher und technischer Forschung entwickelte – heute gilt es neben Theorie und Experiment als dritte eigenständige wissenschaftliche Disziplin – wurden in beiden Einrichtungen große wissenschaftliche Rechenzentren eingerichtet, die bis heute zu den leistungsfähigsten ihrer Art in Deutschland zählen. Diese beiden Rechenzentren bieten seither in ihren jeweiligen Einrichtungen den Anwendern die ganze breite Palette der Informations- und Kommunikationstechnik an, ohne die eine naturwissenschaftlich-technische Forschungseinrichtung heutzutage nicht mehr konkurrenzfähig sein kann. Beide damals gegründeten Rechenzentren arbeiteten in der Folge und bis heute auf allen Gebieten der Informations- und Kommunikationstechnik und insbesondere bei Betrieb und Betreuung von Höchstleistungsrechnern sehr eng und vertrauensvoll zusammen, so dass beispielsweise schon immer Bedarfsspitzen je nach aktueller Ressourcen- und Bedarfsverteilung wechselseitig ausgeglichen werden konnten.

Die Idee des Virtuellen Rechenzentrums – doppelter Nutzen bei halbem Aufwand

Die systemtechnische Betreuung von Höchstleistungsrechnern ist überaus personalaufwändig, wengleich der Aufwand erfreulicherweise nicht proportional mit der erreichbaren Rechenleistung der Systeme ansteigt. Hier kommt jedoch erschwerend hinzu, dass Höchstleistungsrechner in unter-

schiedlichen „Architekturen“ angeboten werden, was den Betreuungsaufwand deutlich erhöht. Die einzelnen Architekturen, zum Beispiel „Vektorrechner“ oder „SMP-Rechner“ (SMP = symmetric multiprocessor), sind jeweils für bestimmte Anwendungsfelder besonders gut geeignet. Die wissenschaftlichen Rechenzentren des Forschungszentrums Karlsruhe und der Universität Karlsruhe stellten ihren Anwendern bis 1995 jeweils Höchstleistungsrechner dieser beiden Architekturen zur Verfügung, es wurden also in beiden Rechenzentren sowohl Vektorrechner als auch SMP-Rechner betreut und betrieben. Angesichts der nur beschränkt verfügbaren Haushaltsmittel und der sehr angespannten Situation auf dem Arbeitsmarkt für hoch qualifizierte IT-Spezialisten entstand die damals fast revolutionäre Idee, die beiden genannten Rechenzentren zu einem „Virtuellen Rechenzentrum“ zusammenzuführen, ohne die realen Rechenzentren in ihrem Bestand anzutasten. Der Grundgedanke war, dass jedes der beiden Rechenzentren sich auf Betrieb und Betreuung jeweils genau einer Rechnerarchitektur beschränken sollte, so dass auf diese Weise der jeweilige Betreuungsaufwand deutlich vermindert werden könnte. Die Anwender beider Institutionen, also von Universität und Forschungszentrum, sollten jedoch unabhängig von ihrem eigenen Arbeitsplatz über ein Hochleistungsdatenetz ungehinderten Zugriff auf die Ressourcen beider Rechenzentren haben. Die im Frühjahr 1996 getroffene Vereinbarung besagte, dass im Rechenzentrum der Universität fortan

schwerpunktmäßig SMP-Rechner betrieben werden sollten und dass das Rechenzentrum des Forschungszentrums sich auf Vektorrechner konzentrieren sollte. Anfängliche politische, organisatorische und finanztechnische Schwierigkeiten zwischen den beiden Partnern Universität und Forschungszentrum (bzw. zwischen Land Baden-Württemberg und Bund) konnten geregelt werden, so dass seit Mitte 1996 die Anwender beider Einrichtungen ungehinderten Zugriff auf die Computer-Ressourcen beider Rechenzentren haben und so die für ihre jeweiligen wissenschaftlichen Aufgaben am besten geeignete Rechnerarchitektur nutzen können.

Die Struktur des Virtuellen Rechenzentrums – Technik und Organisation

Der Schwerpunkt der Zusammenarbeit der beiden realen Rechenzentren des Forschungszentrums und der Universität im gemeinsamen Virtuellen Rechenzentrum liegt bei der gegenseitigen Nutzungsmöglichkeit der vorhandenen Höchstleistungsrechner. Von Beginn an hatte man sich darauf geeinigt, dass Computer in SMP-Architektur ihren Platz im Rechenzentrum der Universität haben sollten, Vektorrechner hingegen im Rechenzentrum des Forschungszentrums. Im Zuge des ständig wachsenden Ressourcen-Bedarfs der Wissenschaftler wurden die installierten Höchstleistungsrechner zeitlich mehrfach erneuert und deutlich verstärkt. Heute ist in der Universität ein SMP-Computer

IBM RS/6000 SP installiert, im Forschungszentrum ein Vektorrechner das Typs Fujitsu VPP5000. Abbildung 2 zeigt symbolisch die Struktur des Virtuellen Rechenzentrums: Auf der linken Seite findet sich die im Rechenzentrum des Forschungszentrums vorhandene Technik, auf der rechten das System des Rechenzentrums der Universität. Verbunden sind beide Rechenzentren über eine 155-Megabit/s-ATM-Strecke in Glasfasertechnik. Über die ATM-Verbindung ist von den angedeuteten Workstations beider Einrichtungen auch ein Zugriff auf die Ressourcen des Rechenzentrums der jeweils anderen Einrichtung möglich.

Fujitsu VPP5000 im Rechenzentrum des Forschungszentrums [2]

Im Rechenzentrum des Forschungszentrums Karlsruhe wird ein Hochleistungs-Vektor-Parallel-Rechner VPP5000 des Herstellers Fujitsu betrieben. Dieser Computer besteht in der hier vorhandenen Konfiguration aus acht Prozessorelementen (PE), von denen eines für interaktives Arbeiten freigegeben ist. Jedes einzelne Prozessorelement verfügt über eine Skalar- und eine Vektoreinheit sowie jeweils über einen eigenen SDRAM-Arbeitspeicher (SDRAM: Synchronous Dynamic Random Access Memory, ein moderner und besonders schneller

RAM-Typ). Dieser SDRAM-Speicher weist bei sechs Prozessorelementen eine Größe von je acht Gigabyte auf, bei den restlichen beiden eine Größe von je 16 Gigabyte. Jedes dieser Prozessorelemente erreicht eine vektorielle Spitzenleistung von 9,6 Gigaflop/s (Milliarden Gleitpunktoperationen pro Sekunde). Die einzelnen Prozessorelemente sind über ein Kommunikationsnetzwerk in Crossbar-Technologie miteinander verbunden (bidirektional 1,6 Gigabyte/s). Das Gesamtsystem verfügt somit über insgesamt 80 GigaByte Hauptspeicher und eine theoretische Spitzenleistung („peak performance“) von 76,8 Gigaflop/s. Die VPP5000 wird mit dem UNIX-Betriebssystem

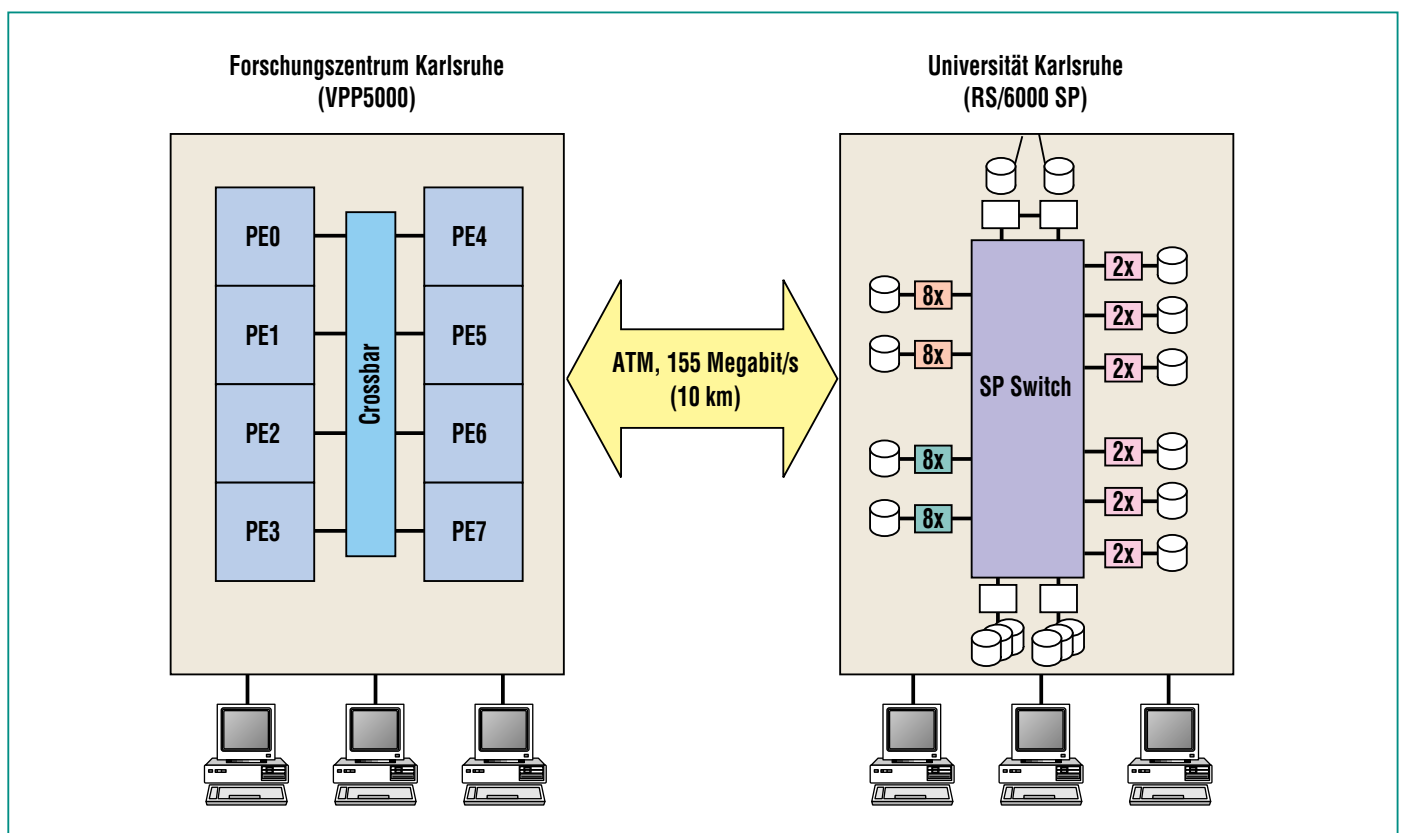


Abb. 2: Die Struktur des Virtuellen Rechenzentrums. Über die ATM-Vernetzung zwischen beiden realen Rechenzentren ist ein Zugriff aller Wissenschaftler auf die Ressourcen beider Rechenzentren möglich.

UXP/V betrieben, das auf UNIX System V Rel. 4 basiert. Auf jedem Prozessorelement läuft ein eigenes UXP/V, das – je nach Prozessorelement – interaktiven oder Batch-Betrieb ermöglicht. Benutzer können von anderen Systemen, z. B. von Workstations, über TCP/IP mit dem VPP5000-System interaktiv kommunizieren und beispielsweise Batch-Jobs absetzen, die dann über NQS (Network Queuing System) auf der VPP5000 gestartet werden. Aus der Architektur der VPP5000 ergibt sich, dass dieser Hochleistungsrechner besonders gut für serielle, jedoch vektorisierte Anwendungen geeignet ist, aber eben nicht für parallelisierte.

IBM RS/6000 SP im Rechenzentrum der Universität [3]

Im Rechenzentrum der Universität Karlsruhe ist dagegen ein Hochleistungsrechner des Typs IBM RS/6000 SP installiert. Bei diesem modernen Computer in SMP-Architektur handelt es sich um einen Parallelrechner mit 116 Mehrprozessorknoten mit je zwei oder acht Prozessoren (112 WinterHawk-II-2-Wege-SMP-Knoten mit je zwei POWER3-II Prozessoren, 375 MHz und zwei Gigabyte Hauptspeicher, sowie vier NightHawk-II-8-Wege-SMP-Knoten mit je acht POWER3-II Prozessoren, 375 MHz und acht Gigabyte Hauptspeicher). Insgesamt besteht das System somit aus 256 Prozessoren, die eine theoretische Gesamtspitzenleistung von 384 Gigaflop/s erbringen. Das System verfügt außerdem mit 256 Gigabyte über einen der europaweit größten Hauptspeicher, so

dass es sich besonders gut für Programme mit extrem großen Speichieranforderungen eignet. In aller Regel werden hier Paralleljobs auf bis zu 64 Prozessoren bearbeitet. Es lassen sich aber auch ohne weiteres Jobs mit gleichzeitiger Nutzung von bis zu 160 oder in Spezialfällen von bis zu 256 Prozessoren rechnen. Die IBM RS/6000 SP läuft vollständig integriert unter AIX 4.3.3, PSSP 3.1, Parallel Environment 2.4 und dem Distributed Computing Environment (DCE). Zur Steuerung des Batchbetriebes wird der IBM LoadLeveler eingesetzt. Aufgrund seiner Architektur eignet sich dieser Hochleistungsrechner besonders gut für sogenannte parallele Programme, die mithilfe des Tools MPI (message passing interface) parallelisiert wurden, für parallele Anwendungen, welche auf einem gemeinsamen Hauptspeicher arbeiten, aber auch ohne weiteres für normale serielle Anwendungen.

Die Organisation

Geleitet und koordiniert wird das Virtuelle Rechenzentrum Karlsruhe von einem virtuellen Direktorium, das jedoch aus zwei sehr realen Personen besteht, nämlich den Leitern der beiden beteiligten wissenschaftlichen Rechenzentren. Das Direktorium hat die Aufgabe, neue und laufende Vorhaben im Umfeld des Virtuellen Rechenzentrums zu planen und zu beobachten, sowie die beiderseitigen Investitionsplanungen jeweils schon im Vorfeld abzustimmen und zu koordinieren. Diesem Ziel dient auch, dass die beiden Leiter dem IT-Planungsausschuss der jeweils anderen Insti-

tution als beratende Mitglieder angehören. Die gegenseitige Inanspruchnahme von Ressourcen hat im Übrigen dem Grundsatz der vollen Kostendeckung zu entsprechen. Dabei wird angestrebt, dass die von den beiden Partnern im Jahresmittel erbrachten Kooperations- und Sachleistungen in etwa gleichwertig sind, so dass von finanziellen Ausgleichsleistungen abgesehen werden kann.

Zusammenfassung und Ausblick

Der effiziente Einsatz vorhandener Mitarbeiter und Hochleistungsrechner ist angesichts teurer Ressourcen und kaum noch verfügbarer IT-Spezialisten zu einer zwingenden Notwendigkeit geworden. Die Rechenzentren des Forschungszentrums Karlsruhe und der Universität Karlsruhe haben deshalb schon 1996 ein „Virtuelles Rechenzentrum“ gegründet, um durch eine sehr enge Kooperation einen besonders wirtschaftlichen Einsatz von Menschen und Maschinen zu erreichen. Der Grundgedanke des Virtuellen Rechenzentrums Karlsruhe besteht darin, gleichartige und bei beiden Partnern nachgefragte Dienste nur noch von einem Partner betreuen zu lassen, sie aber dennoch bei beiden Partnern anzubieten. Diese Vorgehensweise erlaubt es den beteiligten Partnern, sich auf die Betreuung jeweils einer Computerarchitektur zu spezialisieren, wodurch die angebotenen Dienste deutlich wirtschaftlicher zu erbringen sind. Die andauernden Fortschritte in der Informationstechnologie ermöglichen es beiden Einrichtungen, auf diesem Gebiet seit mehreren Jah-

ren eine sehr enge und vertrauensvolle Kooperation einzugehen und mit Leben zu füllen, die beispielhaft ist für die zukünftig geplanten weltumspannenden Grid-Aktivitäten verschiedener wissenschaftlicher Disziplinen. So konzipiert und realisiert beispielsweise die weltweite Community der Hochenergie- und Elementarteilchenphysik derzeit ein global an-

gelegtes Virtuelles Rechenzentrum, welches nach gegenwärtigem Planungsstand aus sieben über die ganze Welt verteilten und durch extrem leistungsfähige interkontinentale Datennetze verbundenen großen realen Rechenzentren bestehen wird. Eines dieser sieben sehr großen Rechenzentren entsteht gegenwärtig im Forschungszentrum Karls-

ruhe. Auf diese Weise kann das Forschungszentrum Karlsruhe die einst auf lokaler Ebene geborene Idee des Virtuellen Rechenzentrums nun im globalen Maßstab fortführen.

Literatur

[1] <http://www.top500.org>

[2] <http://hikwww2.fzk.de/hik/orga/horas/hlr/vpp/VPP5000.html>

[3] <http://www.rz.uni-karlsruhe.de/Uni/RZ/Hardware/SP2>