

# Grid-Computing – Basis für institutsübergreifende virtuelle Organisationen

H. Marten, IWR

## Einleitung

Die rasante Entwicklung von Wissenschaft und Technik während der letzten Jahrhunderte hat sowohl unser tägliches Leben als auch unsere wissenschaftlichen Arbeitsmethoden stark beeinflusst. Erfindungen wissenschaftlicher Instrumente wie das Mikroskop oder das optische Teleskop im 17. Jahrhundert und deren Weiterentwicklungen haben zu revolutionären und immer detaillierteren Einblicken in die Biologie, Medizin, Astronomie etc. geführt. Heute sind wir in der Lage, mit Rasterelektronenmikroskopen atomare Strukturen aufzulösen, mit Computertomographen dreidimensionale Aufnahmen vom Inneren eines Patienten zu machen, oder Teleskope in den Weltraum zu senden, um ganze Himmelsregionen in mehreren Wellenlängenbereichen gleichzeitig zu beobachten.

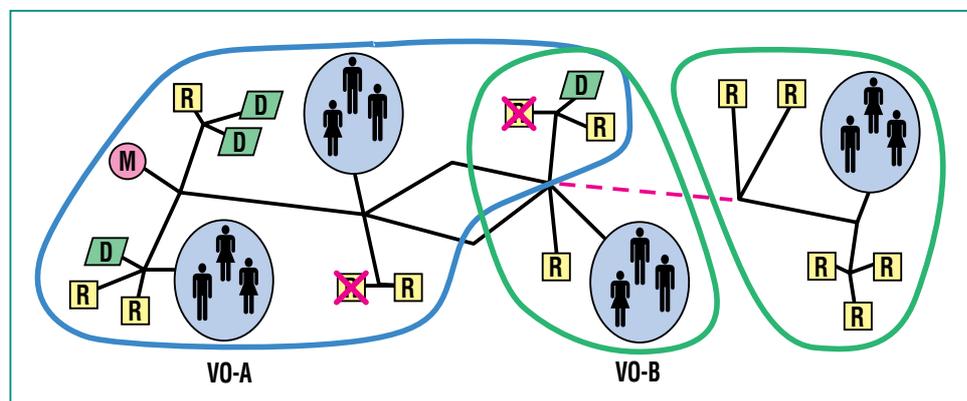
Entwicklung und Bau derartiger „Instrumente“ sind heute im Allgemeinen interdisziplinäre Projekte mit Beteiligung vieler internationaler Partner und erfordern einen effektiven Informationsaustausch über ausgereifte Kommunikationsstrukturen. Aber auch die Datenmengen, die diese Geräte im anschließenden Forschungsbetrieb liefern, haben sich in den letzten Jahrzehnten dramatisch entwickelt; in Einzelfällen reden wir heute von hunderten von Terabyte oder gar mehreren Petabyte pro Jahr (1 Petabyte = 1 Million Gigabyte). Riesige Rechenkapazitäten sind notwendig, um diese enormen Datenfluten auszuwerten. Die Vision der Wissenschaftler ist nun, sämtliche dazu not-

wendigen Ressourcen zusammen zu schließen und so eine weltweite Infrastruktur zu schaffen, die über alle Grenzen hinweg den transparenten Zugriff auf Instrumente, Daten und Rechenleistung erlaubt.

## Die Vision

Die primären Datenstrukturen der einzelnen Komponenten, also Messdaten, Übertragungsprotokolle, Datenbanken usw., sind durch den jeweiligen Einsatzzweck oder die verwendete Technologie bestimmt, und damit zwangsläufig sehr heterogen. Ferner ist davon auszugehen, dass die technischen Einzelkomponenten wie Satelliten, Netzwerke, Rechencluster etc. auch künftig von unabhängigen Institutionen betrieben werden. Damit wird eine weltweite Infrastruktur nicht nur heterogen, sondern kann sich zudem beliebig dynamisch verändern. So könnte z.B. ein Rechenzentrum seine Kapazitäten heute der Meteorologie und morgen einer ganz anderen

Wissenschaftlergruppe zur Verfügung stellen. Den Endbenutzer interessiert jedoch letztlich nur, dass sein Rechenauftrag ausgeführt wird, nicht aber wo. Und er sollte sich auch nicht mit unterschiedlichen Übertragungsprotokollen oder Datenformaten auseinandersetzen müssen. Gefordert ist also eine Infrastruktur, die Rechenleistung, Software-Produkte, Daten, Sensoren, Messinstrumente usw. in Form kompletter Dienste anbietet, die von jedem Arbeitsplatz der Welt zugänglich sind. Zusätzlich muss es (Software-)Dienste geben, die diese Ressourcen selbstständig verwalten und benutzerfreundlich, sicher und zuverlässig anbieten können (so genannte Resource Broker). Daten und Rechenleistung sollen also für jedermann nach Bedarf „aus der Steckdose“ abrufbar sein, und man bezeichnet diese Infrastruktur in Analogie zum elektrischen Stromnetz (engl.: *power grid*) als Grid [1]. Abb. 1 zeigt das Schema einer solchen dynamischen Grid-Welt.



**Abb. 1:** Benutzergruppen, Rechenzentren (R), Datenzentren (D) und Messeinrichtungen (M) bilden im Grid verwaltungstechnisch virtuelle Organisationen (VOs). Einzelne Zentren können ihre Dienste temporär einer oder mehreren VOs anbieten, und VOs können bei Bedarf weitere Benutzergruppen und Ressourcen aufnehmen oder entkoppeln.

Eine solche Infrastruktur bietet unzählige, qualitativ neue Anwendungsmöglichkeiten. So könnte z.B. ein Arzt das Röntgenbild seines Krebspatienten über einen Grid-Auftrag weltweit mit ähnlichen Bildern anderer Patienten vergleichen lassen, um über die Patientenberichte ähnlich gelagerter Fälle eine optimale Behandlungsmethode zu finden. Oder nehmen wir an, die Analysesoftware eines Wettersatelliten entdeckt einen Hurrikan über dem Pazifik, initiiert eine Grid-Simulation um dessen Geschwindigkeit und Richtung vorherzusagen, und sendet Warnungen an die betroffenen bewohnten Regionen. Zur gleichen Zeit hat eine kleine Firma einen neuen Impfstoff gegen ein Virus entwickelt, und verwendet Grid-Ressourcen, um dessen Einfluss in Kombination mit einigen tausend weiteren Wirkstoffen zu simulieren. Irgendwo anders beginnt aufgrund starker Regenfälle ein Fluss über die Ufer zu treten, und ein Krisenstab startet einen Grid-Auftrag zur Flutsimulation unter Berücksichtigung von aktuellen Messungen der lokalen Wetterstationen um Umkreis von 100 Kilometern...

Offensichtlich bietet das Grid insbesondere immer dann große Vorteile, wenn kurzfristig sehr große Rechenkapazitäten benötigt, aus ökonomischen Gründen aber nicht dauerhaft lokal vorgehalten werden können, oder wenn sehr große Datensätze ausgewertet oder korreliert werden müssen. In der Literatur findet man die Begriffe „Computing Grid“ und „Data Grid“ für diese beiden rechenintensiven

oder datenintensiven „Extremfälle“.

### Grid-Bausteine

Eine notwendige Voraussetzung für den Erfolg eines Grid ist die Existenz von Netzwerken mit ausreichend hoher Bandbreite und gegebenenfalls garantierten Service-Qualitäten. In Europa verbindet das gesamteuropäische Netzwerk Géant [2] nationale Forschungsnetze mit Bandbreiten bis zu 10 Gbit/s. Spezielle Knotenpunkte verbinden Géant mit Japan und den USA. In Amerika bildet TeraGrid [3] eine Initiative, fünf Hochleistungsrechenzentren über ein Netzwerk mit 40 Gbit/s zu verbinden. TeraGrid wird mit hoch auflösenden Grafikeinheiten und Werkzeugen für Grid-Computing eine Rechen- und Speicherkapazität aufbauen, die 10.000-15.000 modernen PCs entspricht.

Die Komplexität der physikalischen Infrastruktur sowie einer heterogenen Datenhaltung wird vor dem Benutzer durch eine Virtualisierungssoftware, die so genannte Grid Middleware, versteckt. Was übrig bleibt sind Benutzerschnittstellen ähnlich den Befehlen oder der Oberfläche eines Betriebssystems, die den Zugang zum Grid oder zu einzelnen Diensten von einem stationären Arbeitsplatz oder auch über mobile Geräte wie Handys oder PDAs erlauben. Eines der zur Zeit am häufigsten verwendeten Basis-Pakete für Middleware ist das Globus Toolkit [4]. Es erlaubt, die Identität eines Benutzers zu überprüfen, einzelne Prozesse auszuführen, die zur Verfü-

gung stehenden Grid-Ressourcen zu überwachen und Daten in einer verteilten Umgebung zu lokalisieren bzw. die notwendigen Datenströme zu organisieren. Das Globus Projekt wurde 1995 vom Argonne National Laboratory, der Universität von Süd-Kalifornien und der Universität von Chicago gegründet, und Ende 2003 unter Einbeziehung der Universität von Edinburgh und dem schwedischen Zentrum für Parallelrechner in die Globus Alliance gewandelt.

Globales, virtualisiertes Grid Computing hätte keine Überlebensmöglichkeit ohne klare Definitionen von Software-Schnittstellen und Standards. Das Global Grid Forum, GGF [5], arbeitet als Standardisierungsgremium, ähnlich der Internet Engineering Task Force (IETF) für das World Wide Web. Es wurde gegründet als Zusammenschluss der amerikanischen und europäischen Grid Foren sowie der Interessengemeinschaften im asiatischen Raum unter starker industrieller Beteiligung und organisiert pro Jahr drei große Arbeitstreffen von etwa 50 internationalen Arbeitsgruppen.

Dutzende, wenn nicht sogar hunderte wissenschaftlicher und industrieller Projekte weltweit tragen zur Einführung und weiteren Entwicklung dieser Standards bei. In Europa wurden innerhalb des 5. Rahmenprogramms der EU 24 Grid-Projekte mit insgesamt 58 Millionen Euro gefördert. Zwei dieser Projekte sind für die Arbeiten im Forschungszentrum von besonderer Bedeutung: Das europäische DataGrid Projekt, EDG [6], das im März 2004 ende-

te, hat ein Grid entwickelt und aufgebaut, das Forschungsbereiche mit großen Datenmengen und gleichzeitig großem Rechenzeitbedarf unterstützt. Die Grid-Anwendungen kamen in diesem Fall aus der Hochenergiephysik, der satellitengestützten Erdbeobachtung und der Bioinformatik. Das Projekt CrossGrid [7] hat die Infrastruktur des DataGrid Projektes durch Einbindung weiterer Rechencluster erweitert, und es entwickelt auf der Basis der EDG und Globus Software Werkzeuge und Methoden zur Ausführung von parallelen und interaktiven Anwendungen auf dem Grid.

### Elementarteilchenphysik als Triebfeder für Grid-Entwicklungen

Bei genauerer Betrachtung stellt man fest, dass sehr viele weitere Grid-Initiativen von der Teilchen- oder Hochenergiephysik ausgehen. Dies liegt daran, dass die beteiligten Gruppen bereits traditionell in großen internationalen Kollaborationen organisiert sind und mit Teilchenbeschleunigern (CERN, SLAC, FermiLab, DESY, ...) gigantische Datenmengen produzieren, deren Auswertung einen entsprechend hohen Bedarf an Rechenleistung nach sich zieht. Eines der größten Projekte der Hochenergiephysik in den

nächsten Jahren wird der Bau und Betrieb des Large Hadron Collider, LHC [8], am europäischen Teilchenphysiklabor CERN sein. An diesem Ringbeschleuniger mit einem Umfang von 27 Kilometern wird man ab 2007 mit vier riesigen Detektoren die Struktur der Materie anhand der Bruchstücke von Teilchenkollisionen erforschen. Das geplante Datenaufkommen einschließlich Simulationen liegt bei etwa 12 Petabyte pro Jahr und erfordert circa 70.000 der heute schnellsten PCs. Da diese Datenmengen nicht mehr von einem einzelnen Rechenzentrum bewältigt werden können, wurde 2001 das LHC Computing Grid Project,



Abb. 2: Zu jedem Zeitpunkt wird die Verfügbarkeit der im Resource Broker des LCG Projektes eingetragenen Rechencluster überprüft [11].

LCG [9], als fünftes Teilprojekt neben der Entwicklung der vier LHC-Detektoren gegründet. LCG soll Ressourcen aus Rechenzentren in Europa, Amerika und Asien in mehreren virtuellen Organisationen zusammenfassen und Grid Services für etwa 6.000 Wissenschaftler weltweit zur Verfügung stellen. Das derzeit am IWR entstehende Grid Computing Zentrum Karlsruhe, GridKa [10], wird eines der acht leistungsfähigsten Rechenzentren in diesem Netzwerk sein.

Die Entwicklung des LCG schreitet zügig voran: zwecks Integration und künftiger Interoperabilität mit weiteren Grid-Projekten wur-

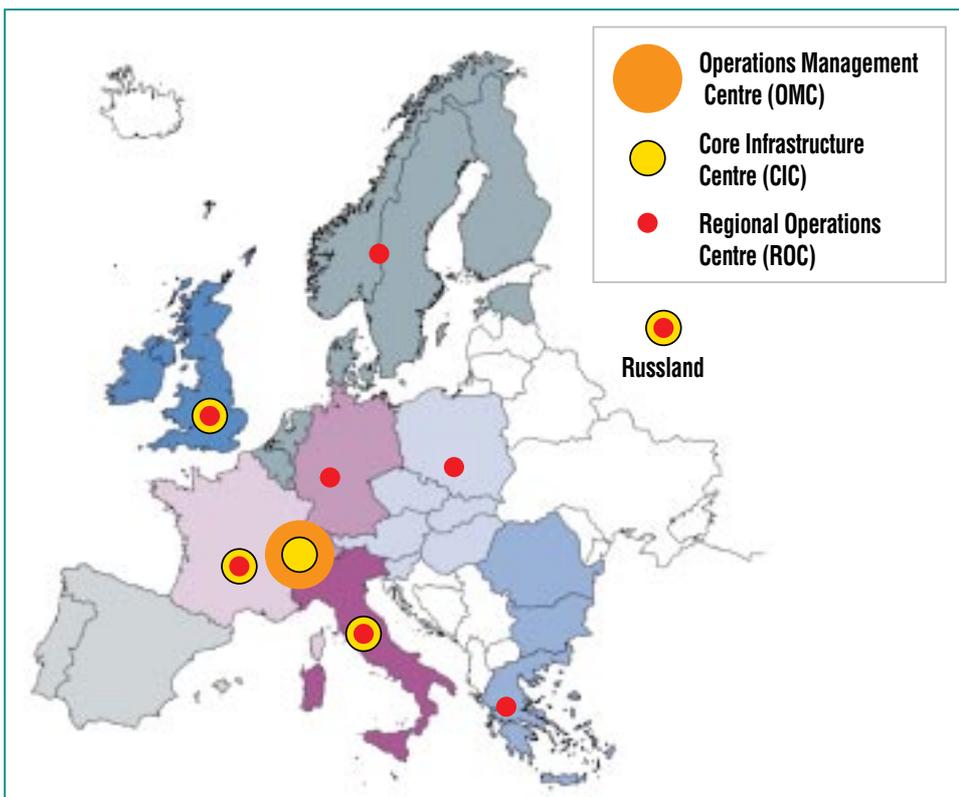
den die Middleware-Komponenten aus verschiedenen europäischen und amerikanischen Projekten neu zusammengestellt und aneinander angepasst, so dass im September 2003 mit LCG-1 auf 12 großen Rechenclustern erste Tests durchgeführt werden konnten. Mit einer verbesserten Version LCG-2 wurde dann im April 2004 in so genannten weltweiten „Data Challenges“ begonnen, die Funktionsfähigkeit, Stabilität und Skalierbarkeit der Software zur Simulation und Datenauswertung der LHC-Experimente auf dem Grid zu testen. Anfang Juni 2004 war die LCG-2 Middleware bereits auf 58 Rechenclustern in 22 Ländern mit einer Ge-

samtkapazität von 3.800 Prozessoren installiert. Untersucht wurde in diesen Data Challenges insbesondere auch die Interoperabilität mit dem amerikanischen Grid3 und dem skandinavischen NorduGrid. Abb. 2 gibt eine Übersicht über die Institute, die ihre Rechnersysteme im Juni 2004 mittels LCG-2 zu einem Grid zusammengeschlossen haben.

### Europa auf dem Weg zur e-Science

Auch wenn in Einzelprojekten wie dem LCG bereits beachtliche Erfolge zu verzeichnen sind, so sind viele Detailfragen noch Gegenstand der aktuellen Forschung und Entwicklung: Wie organisiert und optimiert man große verteilte Datenströme in einem weltweiten Namensraum? Wie gut skalieren die Netzwerktechnologien, Prozessorleistungen, Datenspeicher? Wie administriert man die Accounts und globalen Aktivitäten von tausenden von Benutzern und wie rechnet man sie ab? Wie garantiert man den sicheren Zugriff auf die Daten und wie schützt man die Rechnersysteme in einer prinzipiell offenen Grid-Welt vor Angriffen? Und schließlich – wie organisiert man eine weltweite, qualifizierte Benutzerunterstützung über mehrere Zeitzonen?

Eines der vielleicht wichtigsten europäischen Projekte, das in den nächsten Jahren Antworten auf diese Fragen finden und *demonstrieren* soll, ist das EGEE („Enabling Grids and E-science in Europe“) [12]. Gefördert mit einem Gesamtvolumen von 32 Millionen Euro für zunächst 2 Jahre arbeiten seit April 2004 70 (!) Part-



**Abb. 3:** Das Projekt EGEE unterteilt Europa in Föderationen. Eine Hierarchie von Zentren übernimmt das Gesamtmanagement (OMC), betreibt zentrale Dienste der Grid-Infrastruktur (CIC) bzw. übernimmt bestimmte Aufgaben für Management und Betrieb innerhalb einer Föderation (ROC).

ner in 27 Ländern daran, Rechnersysteme unterschiedlichster Wissenschaftszweige und bereits existierende Grid-Initiativen zu einer gesamteuropäischen Grid-Infrastruktur zusammen zu schließen. Abb. 3 zeigt die organisatorische Zusammenfassung der EGEE-Partnerländer zu Föderationen. EGEE wird Werkzeuge, Verfahrensweisen und Musterverträge für ein europäisches Grid-Management entwickeln, die es erlauben, auch in Zukunft einen gemeinsamen Markt für Rechenzeit zu betreiben und zu erweitern. Aber auch die existierenden Middleware-Technologien werden in Richtung Web-

Services nach den GGF-Standards weiterentwickelt. Neben den deutschen Partnern DESY, DKRZ, FhG, GSI ist auch das Forschungszentrum in diesem Projekt insbesondere in den Bereichen Dissemination, Benutzertraining und Grid-Support, -Betrieb und -Management beteiligt.

### Zusammenfassung

Vor etwas mehr als zehn Jahren hat Tim Berners-Lee am CERN das World Wide Web als Medium für den Austausch zwischen Wissenschaftlern entwickelt, und dessen Öffnung für Firmen und für die Öffentlichkeit hat zu völlig

neuen Kommunikations- und Geschäftsmodellen geführt. Die wachsende Anzahl und Größe von Grid-Projekten in aller Welt sowie die starke industrielle Beteiligung an Standardisierungsprozessen deutet darauf hin, dass wir auf gutem Wege sind, das World Wide Web (WWW) in ein World Wide Grid (WWG) zu verwandeln, in dem jeder Daten und Rechenleistung wie Strom aus der Steckdose beziehen kann.

## Literatur und Abkürzungen

- |  |   |   |
|--|---|---|
| <p>[1] I. Foster, C. Kesselman, „The Grid – Blueprint for a new computing infrastructure“, Morgan Kaufmann Publ. 1999</p> <p>[2] Géant – Das gesamteuropäische Forschungsnetz, <a href="http://www.dante.net">http://www.dante.net</a></p> <p>[3] TeraGrid – Ein amerikanisches Grid von Hochleistungsrechenzentren, <a href="http://www.teragrid.org">http://www.teragrid.org</a></p> <p>[4] Globus – Globus Alliance und das Globus Toolkit, <a href="http://www.globus.org">http://www.globus.org</a></p> | <p>[5] GGF – Global Grid Forum, <a href="http://www.gridforum.org">http://www.gridforum.org</a></p> <p>[6] EDG – Das europäische DataGrid Projekt, <a href="http://www.eu-datagrid.org">http://www.eu-datagrid.org</a></p> <p>[7] CrossGrid – Das europäische CrossGrid Projekt, <a href="http://www.eu-crossgrid.org">http://www.eu-crossgrid.org</a></p> <p>[8] LHC – Large Hadron Collider am CERN, <a href="http://www.cern.ch/lhc">http://www.cern.ch/lhc</a></p> <p>[9] LCG – LHC Computing Grid Projekt, <a href="http://www.cern.ch/lcg">http://www.cern.ch/lcg</a></p> | <p>[10] GridKa – Grid Computing Zentrum Karlsruhe, <a href="http://www.gridka.de">http://www.gridka.de</a></p> <p>[11] LCG Mapcenter – <a href="http://goc.grid-support.ac.uk/mapcenter">http://goc.grid-support.ac.uk/mapcenter</a></p> <p>[12] EGEE – Das europäische Projekt „Enabling Grids and E-Science in Europe“, <a href="http://www.eu-egee.org">http://www.eu-egee.org</a></p> |
|--|---|---|