

# Verteilte Simulationen auf einem Grid

K.-U. Stucky, S. Halstenberg, W. Jakob, A. Quinte, W. Süß, IAI

## Einleitung

In Technik und Wissenschaft sind computergestützte Simulationen und Optimierungen heute zu einer wesentlichen, nicht mehr wegzudenkenden Grundlage geworden. Ihr Einsatz erlaubt in sehr frühen Entwicklungsphasen eines Produkts die Überprüfung von technischen Konzepten und Designs. Eine große Anzahl von Entwurfsvarianten kann ohne kosten- und zeitaufwändigen Bau von Prototypen bewertet werden. Die exponentiell wachsende Rechnerleistung und die ständige Fortentwicklung der Software-Werkzeuge bestimmen die Dynamik auf diesem Gebiet.

Bei Simulationen handelt es sich um die Beschreibung komplexer Systeme auf Basis von parametrierbaren Modellen und die Berechnung des Systemverhaltens mithilfe mathematischer Formulierungen. Optimierungen verfolgen das Ziel, aus einer Menge von Alternativen die unter Berücksichtigung bestimmter Kriterien beste Lösung zu finden, mathematisch entspricht das der Minimierung bzw. Maximierung einer gegebenen Funktion unter Randbedingungen.

Im IAI konnte in den letzten Jahren viel Know-how auf diesem Gebiet erarbeitet werden. Dabei standen das Design von Mikrosystemen und die Medizintechnik im Vordergrund. Die Finite-Elemente-Methode (FEM) zur Simulation der Strukturmechanik, Verhaltenssimulationen auf Basis von Netzwerkmodellen (Makromodellierung) und die Simulation optischer Abbildungen sind hier zu nennen. Evolutionäre Algorithmen

[1] bilden die Grundlage für die Lösung verschiedener Optimierungsaufgaben.

Die Einsatzmöglichkeiten von Simulation und Optimierung sind stark von der Verfügbarkeit von Rechenleistung und anderer Computerressourcen abhängig. Die Genauigkeit von Vorhersagen wird bestimmt von der Genauigkeit der Modelle. Verbesserungen bedeuten hier meist ein Anwachsen der Datenmengen und eine Zunahme der Berechnungen während der Simulation. Ebenso wachsen die Modellgrößen mit der Komplexität der zu simulierenden Systeme, was ebenfalls größere Datenmengen und höhere Anforderungen an die Software bedingt. Parameterstudien und der Wunsch nach mehr und komplizierteren Optimierungen stellen ebenfalls steigende Anforderungen an Ressourcen, sowohl quantitativ als auch qualitativ.

In dieser Situation bietet die Technologie des Grid Computing neue Möglichkeiten. Bei einem Grid handelt es sich um ein System von standardisierten, allgemein einsetzbaren Protokollen und Schnittstellen zu Servicediensten (Services) in einem weiträumigen heterogenen Computernetzwerk. Hauptaufgabe besteht darin, über die Dienste einen koordinierten Zugriff von Anwendern auf Ressourcen zu ermöglichen. Sogenannte virtuelle Organisationen sind Gruppen von Anwendern oder Institutionen, die über die Grid Services verteilten Zugriff auf bestimmte Ressourcen haben [2]. Ressourcenmanagement, Informationsdienste und ausreichende Sicherheitsmechanismen sind Be-

reiche, in denen Grid Services bereitgestellt werden.

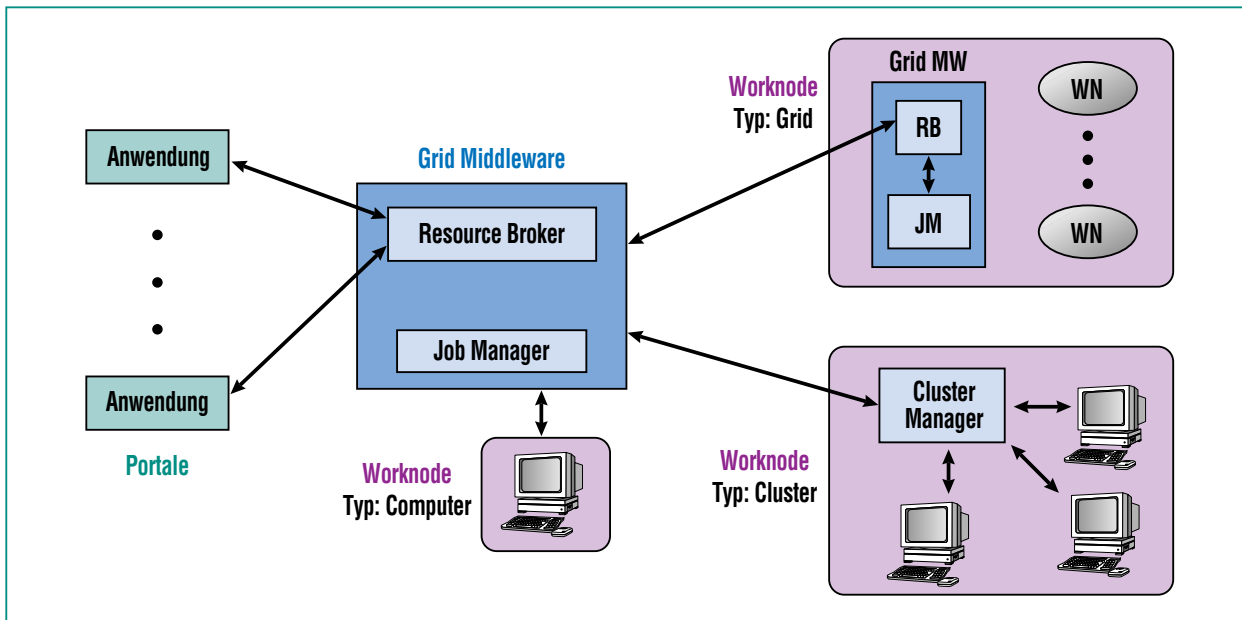
Open Grid Services Architecture (OGSA) ist ein Framework für Grid Standards [3]. Wichtige Gridsoftware sind das Globus-Toolkit [4], Condor [5] und UNICORE [6]. Gridsysteme, die speziell für den Bereich Simulation und Optimierung entwickelt wurden sind zum Beispiel Geodise [7] und Nimrod/G [8].

## Global optimierender Resource Broker

Die Servicedienste eines Grids werden auch Middleware genannt, da sie eine anwendungsunabhängige Ebene zwischen den Applikationen und den Ressourcen bilden. Hinsichtlich der Bereitstellung von Informationen kann ein Grid mit dem Internet verglichen werden. Es bietet aber darüberhinaus weitere grundlegende Ressourcen; die wichtigsten Typen sind Rechenleistung, Speicherkapazität, Daten und Software.

Die Entwicklungen im IAI gehen von dem in Abb. 1 dargestellten Gridaufbau aus:

- Der Zugang zu Anwendungen erfolgt über Gridportale. Die Anwendungen selbst werden als Workflows beschrieben, die aus einzelnen, verteilt im Grid zu bearbeitenden Jobs bestehen. Den Jobs sind Daten und Beschreibungen der benötigten Ressourcen zugeordnet.
- Die Ressourcen sind sogenannten Worknodes (Hardware) zugeordnet. Derzeit wer-



**Abb. 1: Gridaufbau mit Middleware-Schwerpunkt Ressourcenmanagement. Gridanwendungen haben Zugriff auf unterschiedliche Ressourcentypen, die im Grid auf mehrere Arten von Worknodes verteilt sind.**

den drei Typen unterschieden: Einzelrechner, Cluster mit einem individuellen Clustermanagement und – rekursiv definiert – komplette Grids.

- Im Zentrum der Middleware befindet sich das Ressourcenmanagement. Andere Services – etwa für die Sicherheit – sind nicht dargestellt. Der Resource Broker ist für die Planung und Festlegung der Ressourcenverteilung zuständig, während der Job Manager die ausführende Komponente ist. Grundlage für die Funktion beider Komponenten ist der Workflow.

Die verteilte Ressourcennutzung ist das bestimmende Kennzeichen eines Grids. Deshalb widmet sich ein wesentlicher Teil der Grid-Arbeiten im IAI dem Thema Resource Broker. Aus den früheren Arbeiten zur Optimierung mit

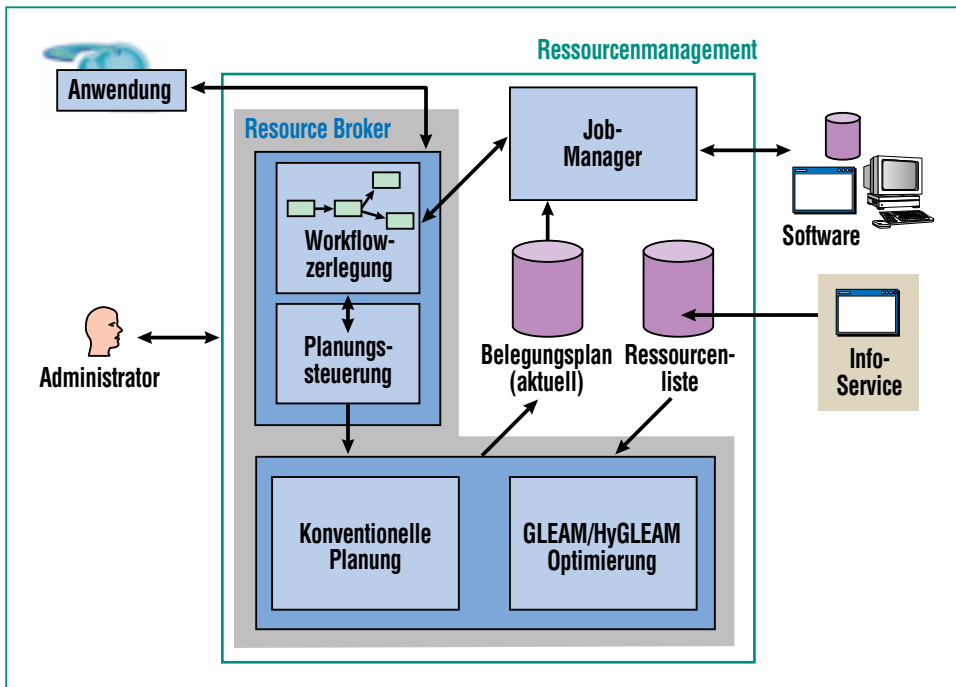
Evolutionären Algorithmen ist das allgemein einsetzbare Werkzeug HyGLEAM [1] hervorgegangen. Es kombiniert den Evolutionären Algorithmus GLEAM [9] mit lokalen Suchverfahren und erzielt in verschiedenen Anwendungen gute Ergebnisse. Aufbauend auf HyGLEAM wurde das Konzept eines global optimierenden Resource Brokers entwickelt, um den Gridanwendern im konkurrierenden Zugriff auf verfügbare Ressourcen eine optimale Zuteilung zu ermöglichen.

Die ersten zu realisierenden Optimierungsziele sind in Bezug auf die Ressource Rechenleistung die Zeiten und Kosten für Berechnungen im Grid. Dabei wird die Sicht des Anwenders verfolgt. So hat etwa bei den Kosten der Anbieter einer Ressource eher gegensätzliche Optimierungsziele. Diese wären dann aber lokal beim

Anbieter und nicht global zu verfolgen. Ähnliche Zielsetzungen hat auch der Resource Broker, der für Nimrod/G [8] entwickelt wurde. Der Resource Broker des IAI soll jedoch alle Optimierungsziele und alle noch nicht begonnenen Jobs berücksichtigen und dabei den gesamten Suchraum und nicht nur eine lokale Umgebung der aktuellen Lösung betrachten (Globale Optimierung). Außerdem soll er auf weitere Optimierungsziele und andere Ressourcentypen ausgedehnt werden.

Abb. 2 zeigt die Architektur für das Ressourcenmanagement:

- Der Resource Broker muss zunächst den Workflow der Anwendung geeignet zerlegen.
- Über eine Planungssteuerung erfolgt zuerst eine konventio-



**Abb. 2: Aufbau des Ressourcenmanagements. Zentrale Bedeutung hat ein global optimierender Resource Broker, der ausgehend von der Workflowdarstellung der Anwendungen eine optimale Ressourcenverteilung ermöglicht. Die Optimierungen basieren auf dem hybriden Evolutionären Algorithmen HyGLEAM. Für die Umsetzung ist ein Job Manager zuständig.**

- Die unter dem ständig wechselnden Zustand des Grids im laufenden Betrieb aufwändige globale Optimierung erfolgt nur bei Bedarf. Sie wird umso lohnender sein, je mehr dispo-nible Jobs im Verhältnis zu den verfügbaren Ressourcen vorhanden sind.
- Informationsdienste liefern notwendige Daten zu den verfügbaren Ressourcen.
- Planungsergebnisse werden im Belegungsplan eingetragen.

- Der Job Manager ist für die Ausführung auf der Grundlage des Workflows und des Belegungsplans zuständig. Er überwacht die Ausführung und sorgt auch für den Datentransfer.

Wichtig ist zudem, dass der gesamte Ablauf in der Regel automatisch erfolgen kann. Eine umfangreiche Steuerung durch den Anwender, wie bei anderen Lösungen vorgesehen, soll es nicht geben. Daher ist in Abb. 2 auch nur für den Systemadministrator ein direkter Zugriff auf den Resource Broker dargestellt. Der Nutzer arbeitet nur über das Gridportal mit seiner Applikation. Gridspezifische Aufgaben sind für ihn transparent.

## Referenzapplikation „Virtuelles Auge“

Beim „Virtuellen Auge“ handelt es sich um ein im IAI entwickeltes Softwaresystem zur Planung chirurgischer Eingriffe an der Hornhaut des Auges [10]. Grundlage des Systems sind biomechanische FEM-Simulationen und Optik-Simulationen. Die verwendeten Werkzeuge sind ANSYS [11] für die Biomechanik und SOLSTIS [12] für die Optik. Ursprünglich wurde das „Virtuelle Auge“ als Web Service realisiert. Die Anwenderschnittstelle basiert auf Java Servlets und JSP, der Zugang für den Anwender erfolgt über das Internet. Die Kommunikation zwischen einzelnen Systemteilen, die auf verschiedenen Rechnern installiert sind, ist über XML und SOAP realisiert.

Eine Referenzapplikation für den Aufbau eines Simulationsgrids dient sowohl zum Test der Ideen der Gridentwickler als auch zur Demonstration des Erreichten. Das „Virtuelle Auge“ ist aus folgenden Gründen bestens geeignet:

- Es benötigt alle wichtigen Ressourcentypen: Rechenleistung für Simulationen je nach erforderlicher Genauigkeit, Speicherkapazitäten für Modelle und Ergebnisarchivierung sowie Anwendungssoftware wie etwa Simulatoren.
- Die Voraussetzungen für eine weiträumige Verteilung sind gegeben mit Anwendern in Kliniken und Firmen, die häufig auch zusammenarbeiten und oft nicht jeder für sich teure Softwaresysteme oder ausrei-

chende Speicherkapazitäten vorhalten können.

- Einzelne Systemteile laufen unter verschiedenen Betriebssystemen (UNIX/Linux, Windows), es wird verschiedene Datenbanksysteme geben und sowohl Einzelrechner als auch Cluster werden einbezogen. Damit ist das System unter verschiedenen Blickwinkeln heterogen.
- Bei einem weiteren Ausbau wird das „Virtuelle Auge“ zu einem Operations- und Therapieplanungssystem für den gesamten Sehapparat. Ferner ist ein Einsatz in der klinischen und industriellen Forschung denkbar sowie eine Integration in weitere Simulationssysteme der Humanmedizin. Das System und seine Anwender erfüllen damit die Voraussetzungen für eine virtuelle Organisation.
- Das Arbeitsfeld Gridportale ist abgedeckt. Bereits jetzt wird intensiv an der Thematik Visualisierung gearbeitet. Komfortable Möglichkeiten sind hier entscheidend für die Akzeptanz der Endanwender.
- Nicht zuletzt ist der direkte Kontakt zu den Entwicklern der Anwendung im IAI und über diese zu einer großen Zahl potentieller Anwender ein wichtiger Vorteil bei der Realisierung anspruchsvoller Gridbausteine wie etwa dem global optimierenden Resource Broker.

Eine erste Gridversion des „Virtuellen Auges“ wurde realisiert. Sie erlaubt die Durchführung be-

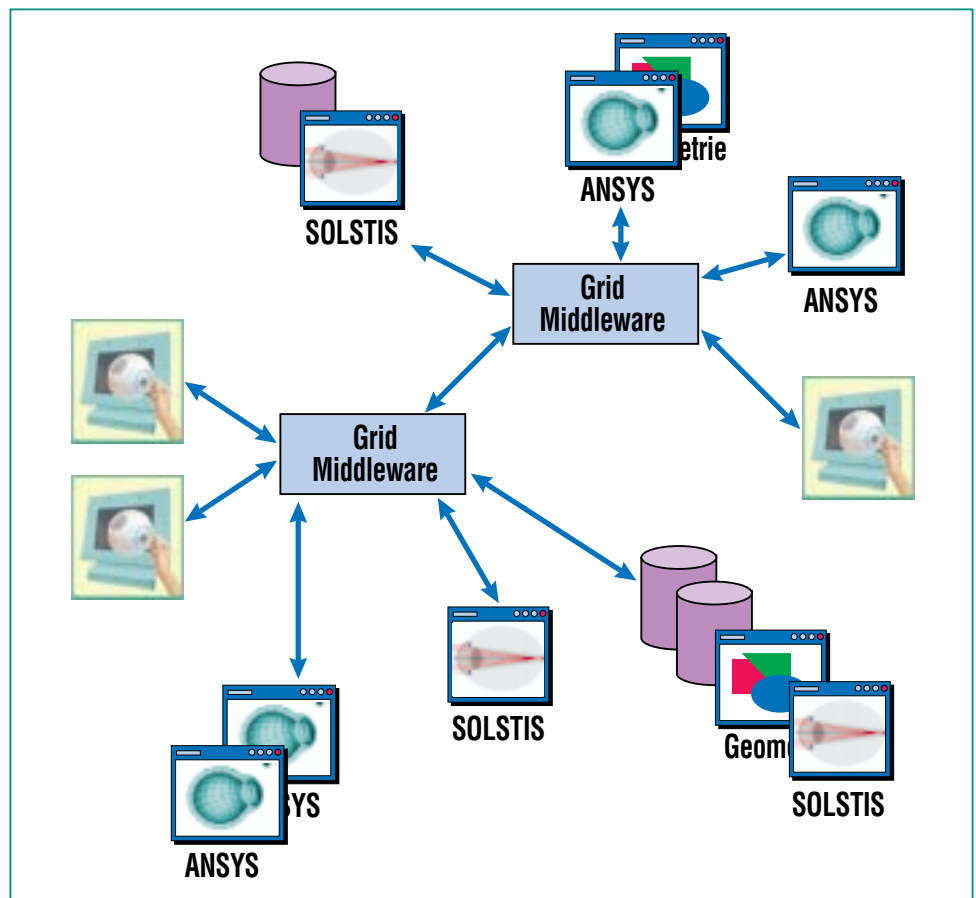
stimmter Parameterstudien in der Biomechanik. Basis ist das Globus-Toolkit in der Version 2.0 und als Programmierschnittstelle Java CoG; passend zur Programmiersprache Java, in der ein erster Prototyp eines Job Managers realisiert wurde. Die Wahl einer objektorientierten Programmiersprache wird auch dem serviceorientierten Ansatz im Grid Computing gerecht.

Aktuell wird an einer umfassenden Gridanwendung „Virtuelles

Auge“ gearbeitet, die Anwender mit einbezieht und damit zum ersten Mal das lokale Testgrid verlässt. Abb. 3 vermittelt einen Eindruck des Gridsystems mit verteilten Ressourcen und mehreren Anwendern, die zusammen eine virtuelle Organisation bilden.

### Ausblick

Die Entwicklungen im Grid Computing des IAI werden zunächst von der Referenzapplikation „Virtuelles Auge“ bestimmt sein.



**Abb. 3:** Das „Virtuelle Auge“ im Grid. Dargestellt sind Softwareressourcen, ANSYS für die Biomechanik und SOLSTIS für die Optik, sowie Datenbanken. Die Ressource Rechenleistung steht überall zur Verfügung. Die Gridsoftware selbst ist kein einzelnes Programm sondern hat ebenfalls einen verteilten Charakter in Form von Services. Mehrere Anwender teilen sich die vorhandenen Ressourcen.

Kontakte zur klinischen Forschung und zu Firmen zeigen die Notwendigkeit für eine verstärkte Beschäftigung mit Möglichkeiten zur Parallelisierung. Für Parameterstudien und Optimierungen müssen einfach zu handhabende Simulatoren vorliegen, die vielfach installiert auf Clustern und Einzelrechnern paralleles Simulieren ermöglichen. Je nach Genauigkeitsbedarf kann auch die Parallelisierung einzelner FEM-Simulationsläufe im Grid zu ei-

nem wichtigen Schwerpunkt werden.

Nach der Implementierung des global optimierenden Resource Brokers mit den vorerst anvisierten Optimierungszielen Zeit und Kosten ist als nächstes Ziel die Optimierung von Datenbankzugriffen, also eine Erweiterung um den Ressourcentyp Speicherkapazität, abzusehen.

Neue Referenzapplikationen auf dem Gebiet der Designoptimie-

rung oder der Strukturbestimmung von Biomolekülen werden diskutiert. Paralleles Rechnen für Optimierungen basierend auf Evolutionären Algorithmen wird hier angestrebt.

## Literatur

- [1] W. Jakob, *Dissertation, Universität Karlsruhe, Bericht FZKA-6965, 2004.*
- [2] I. Foster, C. Kesselman, S. Tuecke, *Intern. Journal of Supercomputer Applications, Vol 15(3), 2001, 200-222.*
- [3] I. Foster, C. Kesselman, J. Nick, S. Tuecke, *Open Grid Service Infrastructure WG, Global Grid Forum, June 22, 2002.*
- [4] I. Foster, C. Kesselman, *in I. Foster, C. Kesselman, eds., The Grid: Blueprint for a New Computing Infrastructure, Morgan Kaufmann, 1999, 259-278.*
- [5] D. Thain, T. Tannenbaum, M. Livny, ([www.cs.wisc.edu/condor/doc/condor-practice.pdf](http://www.cs.wisc.edu/condor/doc/condor-practice.pdf)), *erscheint 2004.*
- [6] D.W. Erwin, *Concurrency Computat.: Pract. Exper., 2002, 14, 1395-1410.*
- [7] G. Xue, M.J. Fairman, G.E. Pound, S.J. Cox, *In: H. Kosch, L. Böszörményi, H. Hellwanger (eds.), Proc. of Euro-Par 2003. Lecture Notes in Computer Science, Springer-Verlag, 2003, 357-365.*
- [8] D. Abramson, J. Giddy, L. Kotler, *International Parallel and Distributed Processing Symposium (IPDPS), pp 520-528, Cancun, Mexico, May 2000.*
- [9] C. Blume, *Proc. of PPSN I, LNCS 496, Springer-Verlag, S. 48-54, 1991.*
- [10] H. Eggert, H. Guth, A. Hellmann, K.P. Scherer, P. Stiller, W. Süß, *in Proceedings of the IASTED International Conference on Internet and Multimedia Systems and Application, Honolulu, Aug. 2001, Acta Press, 148-153.*
- [11] ANSYS, Inc. ([www.ansys.com](http://www.ansys.com)).
- [12] OPTIS ([www.optis-world.com](http://www.optis-world.com)).