

Hannes Hartenstein*, Thomas Walter und Peter Castellaz

Aktuelle Umsetzungskonzepte der Universitäten des Landes Baden-Württemberg für Hochleistungsrechnen und datenintensive Dienste

Zusammenfassung: Dieser Artikel beschreibt die Umsetzungskonzepte bwHPC und bwDATA, mit denen sich die Universitäten sowie weitere Einrichtungen des Landes Baden-Württemberg angesichts der weiter zunehmenden Bedeutung des Hochleistungsrechnens sowie der rasant anwachsenden digitalen Datenmengen und ihrer Analyse aufstellen. Die Umsetzungskonzepte basieren auf dem Prinzip von kooperativer Erbringung und Nutzung von Ressourcen und Diensten, so dass durch arbeitsteiliges Vorgehen und durch Verbreiterung der Nutzungsbasis von Diensten und Systemen die Wissenschaftler und Studierenden bestmöglich unterstützt werden können. Für das Hochleistungsrechnen erfolgt zum einen eine Differenzierung der so genannten Tier-3-Ebene in ein Versorgungssystem sowie in vier Forschungscluster, welche durch zusätzliche Ausbildung von Kompetenzzentren unterschiedliche Fachcommunities unterstützen. Zum anderen erfolgt ein technisch einfacher und organisatorisch abgestufter und abgestimmter Zugang zu allen HPC-Ressourcen auf den unterschiedlichen Ebenen. Für die Fortentwicklung datenintensiver Dienste und der zugehörigen Speichersysteme wird basierend auf einer Analyse der aktuellen Datenmengen sowohl eine Prognose für den notwendigen Ausbau als auch ein Vorgehensmodell für die zukünftige Verortung dargelegt. Zudem werden die laufenden, vom Land geförderten Innovationsprojekte sowie geplante Projekte in den beiden Bereichen beschrieben.

*Hannes Hartenstein: E-Mail: hannes.hartenstein@kit.edu

Thomas Walter: E-Mail: thomas.walter@uni-tuebingen.de

Peter Castellaz: E-Mail: peter.castellaz@mwk.bwl.de

Einleitung

Die Digitalisierung nahezu sämtlicher Wissenschaftsbereiche und der damit verbundene weitreichende Einsatz von Simulation und Datenanalyse als dritte und vierte Säule des wissenschaftlichen Erkenntnisgewinns führen zu einem drastischen Anstieg des Bedarfs an Hochleistungsrechnerressourcen, an datenintensiven Diensten sowie an

entsprechender methodenwissenschaftlicher Forschung und Unterstützung. In ihrem Strategiepapier [1] haben die Rechen- bzw. Informationszentren der Universitäten des Landes Baden-Württemberg ein grundsätzlich kooperatives Vorgehen bei der Erbringung und der Nutzung von IT-Diensten verabredet. Dieses Vorgehen wird im Land auch von Landesrektorenkonferenz und Kanzlerarbeitskreis mitgetragen. Für die Bereiche des Hochleistungsrechnens und der datenintensiven Dienste hat der Arbeitskreis der Leiter der wissenschaftlichen Rechenzentren in Baden-Württemberg (ALWR-BW, ein Ausschuss der Landesrektorenkonferenz) die Umsetzungskonzepte bwHPC und bwDATA erstellt, die in diesem Artikel in gekürzter Form zusammen mit laufenden und geplanten Innovationsprojekten beschrieben werden.

Das Land Baden-Württemberg fördert aufgrund der immer weiter ansteigenden Bedeutung des Hoch- und Höchstleistungsrechnens auf allen Ebenen und hat hierzu am 15. Juni 2010 eine Investitionsplanung für den Zeitraum bis in das Jahr 2016 verabschiedet [2]. Auf Basis der Planung der Landesregierung, der IT-Strategie für die Universitäten des Landes Baden-Württemberg sowie der aktuellen Betriebs- und Projektkooperationen der Rechenzentren der Universitäten in Baden-Württemberg sowie unter Berücksichtigung der Empfehlungen des Wissenschaftsrats [3, 4] und der DFG [5] beschreibt das bwHPC-Konzept die Fortentwicklung und Ausgestaltung der beabsichtigten HPC-Installationen für die Forschung sowie für die Versorgung mit HPC-Ressourcen. Kernelemente in diesem Umsetzungskonzept sind dabei der Forschungshochleistungsrechner am KIT (ForHLR, auf Ebene 2) sowie Forschungscluster (bwForCluster, auf Ebene 3) mit ausgewiesenem anwendungs- und methodenwissenschaftlichem Profil und ein HPC-Versorgungssystem (bwUniCluster, *Universal/University Cluster*, auf Ebene 3), welches ehemals lokal vorgehaltene HPC-Ressourcen der einzelnen Landesuniversitäten zur Grundversorgung bündelt und insbesondere auch in der Lehre Verwendung findet. Im Einklang mit den Empfehlungen des Wissenschaftsrats wird eine Neuordnung vorgeschlagen, welche auf Ausdifferenzierung der Rechnerressourcen, sich ergänzende Strukturen und den Aufbau von Kompetenzzentren setzt.

Der Bedarf an Kapazität für die Speicherung von Daten hat in den vergangenen Jahren stark zugenommen. Im wissenschaftlichen Umfeld wird diese Entwicklung beispielsweise durch umfangreiche hochauflösende Messdaten und zunehmend leistungsfähigere Sensorik unterstützt. Nahezu alle Wissenschaftsbereiche arbeiten „datengetrieben“ und tragen zum exponentiellen Wachstum der zu speichernden Datenmenge bei [6]. Dieser Bedarfszuwachs ist jedoch nicht auf den Bereich der Forschung beschränkt, da neue Dienste sowohl im Bereich der Lehre als auch der Verwaltung ebenfalls erhebliche zusätzliche Datenmengen produzieren. Zu nennen sind hier etwa die Aufzeichnung von Vorlesungen im Rahmen von E-Learning Aktivitäten, der Einsatz höchst auflösender Bilder im Rahmen der medizinischen Ausbildung oder auch ein Dokumentenmanagement, etwa von elektronischen Studierenden- und Personalakten. Der Ressourcenaufwand des dabei zu erwartende Speicherbedarfs steigt deutlich schneller als dies durch die mit neuen Speichertechnologien verfügbare höhere Kapazität kompensiert werden kann. Die Universitäten und Hochschulen stehen somit vor der Herausforderung, den Betrieb der Datenspeicherung nachhaltig zu gewährleisten und für eine Unterstützung der Wissenschaft auszubauen. Eine Förderung des konsequenten Ausbaus benötigt daher ein Konzept für die Bündelung von Speicherressourcen sowie für eine föderative Erbringung und gemeinsame Nutzung der daten- und somit speicherintensiven Dienste, im Folgenden als *Speicherdienste* bezeichnet, an landesweit verteilten Standorten, um die Diskrepanz zwischen benötigter und finanzierbarer Kapazität nachhaltig zu minimieren. Das Umsetzungskonzept bwDATA bildet den Rahmen für die Kooperation sowie Konsolidierung und Fortentwicklung bei der Erbringung und Nutzung von datenintensiven Diensten an den baden-württembergischen Universitäten. Es beschreibt Maßnahmen und Projekte, die in den Jahren 2013 und 2014 angestoßen werden sollen, sowie ein Vorgehensmodell zur weiteren Ausgestaltung der daten- und somit speicherintensiven Dienste in den nachfolgenden Jahren. Das entwickelte Konzept (Phase I) konzentriert sich zunächst auf die neun Universitäten des Landes, es wird im nächsten Schritt auf weitere Hochschularten und Einrichtungen (Landesbibliotheken, Archive) erweitert werden (Phase II).

Im Folgenden werden zunächst die bereits bestehenden kooperativen Infrastrukturen und Dienste beschrieben. Die Überlegungen und Ausgestaltungen zu den Konzepten bwHPC und bwDATA werden im Anschluss dargelegt. Einige ergänzende Schlussbemerkungen runden den Beitrag ab.

Ausgangslage

Basis für zuverlässige verteilte und kooperative IT-Dienste ist ein leistungsfähiges Netz. Mit dem Landesforschungsnetz BelWü (<http://www.belwue.de/>) sind alle Universitäten des Landes Baden-Württemberg redundant über 10 Gigabit/s miteinander verbunden. Der Ausbau auf 100 Gigabit/s wurde bereits mit der Kopplung der beiden Standorte der Large Scale Data Facility (s. u.) in Karlsruhe und Heidelberg gestartet und wird sukzessive auf den BelWü-Backbone ausgeweitet.

Neben der leistungsfähigen Verbindung spielt der standortübergreifende Zugriff auf IT-Ressourcen und IT-Dienste eine fundamentale Rolle. Das vom Land geförderte Innovationsprojekt „Föderatives Identitätsmanagement in Baden-Württemberg“ (bwIDM, Projektbeginn Juli 2011, Projektende Dezember 2013, www.bwidm.de) ermöglicht den Zugriff auf entfernte Ressourcen aus dem „Heimatlokalen“ Kontext heraus. Es ergänzt die vorhandene, auf Shibboleth basierende Authentifikations- und Autorisierungsinfrastruktur (AAI) des DFN um den nicht Web-basierten Zugriff (etwa mit ssh) [7]. Das Metadaten-Management wird in Absprache mit dem DFN durch die DFN-Föderation erbracht. Mit dem Ansatz des föderativen Identitätsmanagements werden nicht die jeweiligen lokalen IDM-Systeme vereinheitlicht, sondern deren Schnittstellen und die zuzusichernde Datenqualität.

Für das Backup von Arbeitsplatzrechnern und Servern bestehen vier regionale Verbünde, welche als Softwarelösung auf Tivoli Storage Management (TSM) aufbauen. TSM wird als Landeslizenz zur Verfügung gestellt. Die regionalen Verbünde speichern auch gegenseitig Zweitkopien für den Katastrophen-Fall. Für das Speichern großer wissenschaftlicher Datenmengen wurde die Large Scale Data Facility (LSDF) in Karlsruhe und Heidelberg errichtet. Die LSDF dient sowohl als lokaler „Performance-Speicher“, etwa für das BioQuant in Heidelberg, wie auch für das Backup und zur Archivierung. Das laufende Innovationsprojekt bwLSDF (Projektbeginn Oktober 2011, Projektende März 2014, bwlsdf.scc.kit.edu), gefördert durch das Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg, erarbeitet Lösungen für den landesweiten Zugriff auf die LSDF. Hierbei werden vier Speicherdienste betrachtet: Blockzugriff, File-basierter Zugriff, eine „Sync&Share“-Lösung ähnlich der Dropbox-Funktionalität sowie die Einbindung von Cloud-Schnittstellen und externem Cloud-Speicher. Blockzugriff und „Sync&Share“ befinden sich in landesweitem Testbetrieb. Durch das Projekt bwFLA wird zudem an dem Aspekt der funktionalen Langzeitarchivierung gearbeitet [8].

Im Bereich des High Performance Computing befindet sich mit dem HLRS ein nationales Höchstleistungsrechenzentrum in Baden-Württemberg, gefördert von Bund und Land. Mit HERMIT und ab 2014 HORNET betreibt das HLRS derzeit einen Petaflops-Rechner, der zukünftig eine Spitzenleistung von fünf Petaflops anbietet. Die Ebenen zwei und drei der klassischen HPC-Pyramide, bislang vertreten durch den Landeshochleistungsrechner am KIT sowie das Baden-Württemberg-Grid bwGRiD, werden durch die Konzepte bwHPC und bwDATA neu aufgestellt (siehe folgende Abschnitte). Das bwGRiD hat seit 2008 eine an sieben Universitätsstandorten sowie an der Hochschule Esslingen betriebene homogene Grid-Infrastruktur bereitgestellt. Eine Übersicht der Nutzung und der durch bwGRiD ermöglichten Forschungsprojekte und Publikationen findet sich unter www.bw-grid.de. Aktuelle Projektarbeiten sowie die Transformation von bwGRiD zu dem bwHPC-Konzept sind in [9] dargestellt.

Für die Koordinierung der Planung und des Betriebs überregionaler Ressourcen für HPC, verteilte Systeme und große Daten haben das KIT und die Universität Stuttgart die SICOS GmbH gegründet (www.sicos-bw.de). Dabei steht SICOS für „Simulation, Computing und Storage“.

Darüber hinaus wurden für verschiedene Softwarepakete landesweite oder Grid-weite Lizenzen erworben. Hier sind beispielsweise Ansys, ESRI, MOAB und Turbomole zu nennen. Im Rahmen der in den folgenden Abschnitten vorgestellten bwHPC- und bwDATA-Konzepten wird derzeit zudem eine landesweite Matlab-Lizenz angestrebt.

Das bwHPC-Konzept (2013–2018)

Die HPC-Leistungspyramide besteht entsprechend der Darstellung des Positionspapiers „Strategische Weiterentwicklung des Hoch- und Höchstleistungsrechnens in Deutschland“ des Wissenschaftsrats [3] in Deutschland heute aus folgenden vier Ebenen:

- Als Systeme der Ebene 0 (Tier 0-Systeme) werden diejenigen Systeme bezeichnet, die von den „Hosting Members“ in PRACE als nationale Beiträge zur europäischen Infrastruktur vertragsgemäß im Zeitraum von 5 Jahren (2010–2015) Rechenzyklen im Wert von je 100 Millionen Euro einbringen.
- Systeme der Ebene 1 (Tier 1-Systeme) sind nationale Höchstleistungsrechner mit deutschlandweiten Zugangsverfahren.
- Systeme der Ebene 2 (Tier 2-Systeme) sind Landeshochleistungsrechner sowie fachspezifische Rechner

(z. B. für die Klimaforschung) mit überregionaler Bedeutung und definierter Forschungsprogrammatur.

- Den Systemen der Ebene 3 (Tier 3-Systeme) sind typischerweise Rechencluster in Instituten und regionalen Rechenzentren an Hochschulen und Forschungseinrichtungen zuzuordnen.

Die im Gauss Centre for Supercomputing e. V. zusammengefassten nationalen Höchstleistungszentren in Garching (LRZ), Jülich (FZJ) und Stuttgart (HLRS) tragen zu dem europäischen Versorgungskonzept PRACE bei (Ebene 0). Sie bilden gleichzeitig die nationalen Höchstleistungsrechenzentren der Ebene 1. Die Aktivitäten des Landes und des Bundes auf dem Gebiet des Höchstleistungsrechnens (Ebenen 0 und 1) in Baden-Württemberg sind nicht Gegenstand des Umsetzungskonzepts, werden aber hinsichtlich der Verzahnung, der Abstimmung und des entstehenden Gesamtbilds mitbetrachtet.

In dem bwHPC-Konzept werden die Vorhaben „Forschungshochleistungsrechner am KIT“ (ForHLR) als System der Ebene 2 sowie „Forschungs-Cluster“ (bwForCluster) und „HPC-Versorgungssystem des Landes Baden-Württemberg“ (bwUniCluster) auf der Ebene 3 beschrieben. Die Ausgestaltung der Ebene 3 unterscheidet sich von der „klassischen“ und oben genannten Ebenen-Definition insbesondere dadurch, dass diese Ebene-3-Systeme bezogen auf den Betriebsstandort in Baden-Württemberg zentralisiert und landesweit genutzt werden, entweder für ausgewiesene Fachwissenschaften im Falle der bwForCluster oder als Grundversorgungssystem im Falle des bwUniCluster. Für das Land Baden-Württemberg ergibt sich daraus die nebenstehend abgebildete HPC-Pyramide.

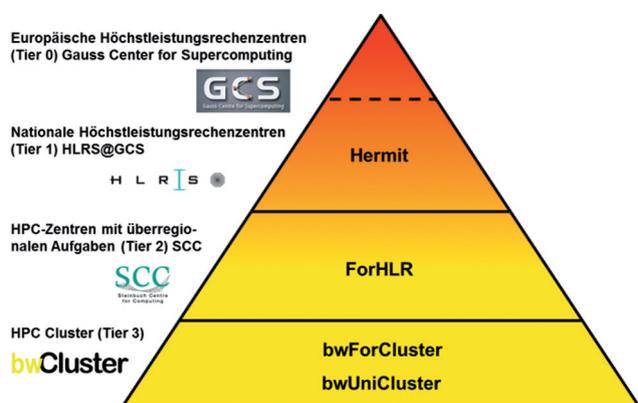


Abb. 1: Einordnung der im Land Baden-Württemberg vorgehaltenen HPC-Systeme in der HPC-Leistungspyramide.

Insbesondere auf der Ebene 3 beruht die Neuordnung auf den Möglichkeiten eines föderativen Betriebs- und Nutzerunterstützungskonzepts, welches sich auf den Erfahrun-

gen im Grid-Umfeld und auf die Landesprojekte bwIDM und bwLDSF abstützt. Die erzielten Errungenschaften für einen verlässlichen verteilten Betrieb werden dabei als Basis für die Neuordnung genutzt, eine Verteilung der Systeme alleine der Verteilung wegen erfolgt nicht. Stattdessen basiert die Neuordnung auf einer Reduktion der Anzahl der Betriebsstandorte sowie auf einer Aufteilung in Versorgungs- und Forschungscluster. Mit dieser Neuordnung wird der Bedeutung der Ebene 3 des HPC-Leistungsstufenmodells als Einstiegsebene für *Computational Science and Engineering* sowie als „HPC Enabler“ Rechnung getragen: der zu erwartende Leistungsanstieg auf den Ebenen 1 und 2 erfordert einen Anstieg der Leistungsfähigkeit auch auf Ebene 3 bei gleichzeitigem Angebot eines einfachen Zugangs und einer Anwendungsdomänen-bezogenen Unterstützung der Nutzer. Der notwendige Leistungszuwachs – auch bezogen auf die Zugangsmöglichkeiten, die Anwendungsunterstützung und die Methodenentwicklung – in Verbindung mit dem notwendigen ökonomischen Mitteleinsatz sowie dem notwendigen Energie-effizienten Betrieb führen zu diesem Umsetzungskonzept.

Ebenen 0 und 1: Höchstleistungsrechnen mit HERMIT

Ausdifferenzierung und Kompetenzzentrierung: Mit dem Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS) befindet sich eines der drei deutschen Bundeshöchstleistungsrechenzentren im Land Baden-Württemberg. Das HLRS ist Mitglied im Gauss Center for Supercomputing (GCS). Gemeinsam mit den Zentren in Jülich (JSC) und Garching (LRZ) deckt das HLRS die europäische Ebene (Tier 0) der Leistungspyramide ab. Gleichzeitig versorgt das HLRS die Bundesrepublik mit einem Tier 1-System.

Die Abstimmung der Versorgungskonzepte und Rechnerarchitekturen erfolgt auf Bundesebene zwischen den drei Zentren des GCS. Die zeitliche Abstimmung sieht die Installation eines Tier 0/1-Systems in jedem Jahr vor. Das HLRS hat daher sein System 2011 installiert. Inhaltlich übernimmt das HLRS im Rahmen des GCS die schwerpunktmäßige Versorgung der ingenieurwissenschaftlichen Communities. Dies reicht vom Automotive Engineering über das Biomechanical Engineering bis zur Energietechnik. Aus der inhaltlichen Ausrichtung ergibt sich ein klares Anforderungsprofil für das Rechnersystem. Im Vordergrund stehen schnelle Speicheranbindung sowie hybride Architekturansätze für gekoppelte Simulationen.

Nutzungsrechte und Steuerungsaufgabe: Die Vergabe von Nutzungsrechten erfolgt im europäischen Kontext durch das europäische Konsortium PRACE AISBL (Partner-

ship for Advanced Computing in Europe). PRACE hat dazu ein Scientific Council eingerichtet, dem Wissenschaftler aus ganz Europa angehören. In Deutschland erfolgt die Vergabe von Nutzungsrechten durch die Lenkungsausschüsse der Mitgliedszentren von GCS. Projekte, die mehr als 5% der Maschine benötigen, werden von einem gemeinsamen Ausschuss begutachtet. Projekte mit einem geringeren Bedarf werden direkt vom Lenkungsausschuss des HLRS begutachtet. Dieser Lenkungsausschuss ist gleichzeitig verantwortlich für das Tier 2-System des Landes Baden-Württemberg und stellt damit eine weitere organisatorische und wissenschaftliche Klammer dar. Gleichzeitig ist damit für die Benutzer ein einfacher Übergang zwischen Tier 2 und Tier 1 gewährleistet.

Technische Auslegung: Das Cray XE6-System basiert auf dem AMD Interlagos-Prozessor. Jeder Prozessor verfügt über 16 Prozessorkerne. Durch den zusätzlichen Einsatz von Graphikkarten können spezielle Anwendungen optimal abgearbeitet werden. Die insgesamt 3552 Knoten mit 7104 Prozessoren werden durch einen von Cray entwickelten Gemini Interconnect verbunden. Bei einem Hauptspeicher von rund 120 TB verfügt das System über eine Plattenkapazität von 2,7 PB. Die Daten sind durch ein entsprechend ausgelegtes HSM-System abgesichert.

Ebene 2: Der Forschungshochleistungsrechner ForHLR

Ausdifferenzierung und Kompetenzzentrierung: Der zukünftige Forschungshochleistungsrechner (ForHLR) mit Standort KIT soll es den Forschungsbereichen Umwelt, Energie, Nanostrukturen und -technologien sowie den Materialwissenschaften ermöglichen, komplexe Anwendungsprobleme in neuen Größenordnungen zu bearbeiten. Die wissenschaftliche Zielstellung liegt in einem vertieften Verständnis bei ausgewählten Fragestellungen aus den genannten Bereichen sowie in methodischen Fortschritten bei der Simulation und Visualisierung komplexer Systeme, die durch Verknüpfung unterschiedlicher physikalischer Modelle bzw. durch die Betrachtung der Systeme und Modelle auf verschiedenen Skalen entstehen.

Die die genannten Forschungsbereiche ergänzende etablierte Methodenforschung am KIT mit dem Engineering Mathematics and Computing Lab (EMCL), den Simulation Laboratories (SimLabs) für die Bereiche Klima und Umwelt, Energie und Nano-/Mikrostrukturen sowie den sich im Aufbau befindlichen Data Life Cycle Labs (DLCL) wird eine optimale Unterstützung der Anwendungswissenschaften für den effektiven und effizienten Einsatz des Systems bieten.

Nutzungsrechte und Steuerungsaufgabe: Die Nutzung des ForHLR-Systems unterliegt der Kontrolle des mit dem HLRS gemeinsamen wissenschaftlichen Lenkungsausschusses (HLRS-Lenkungsausschuss), dem herausragende Wissenschaftler der genannten Forschungsbereiche angehören. Absprachen im nationalen Maßstab erfolgen durch die Mitwirkung in der Gauß-Allianz.

Technische Auslegung: Als Ebene-2-System ist der zukünftige Rechner weder für extrem skalierende Anwendungen (>10.000 Tasks) ausgelegt – hierfür sind die nationalen Höchstleistungsrechner vorgesehen – noch für Anwendungen aus dem schwächer parallelisierten Bereich – hierfür sind die Forschungscluster bwForCluster und das Versorgungssystem bwUniCluster auf Ebene 3 vorgesehen. Aus heutiger Sicht wird das System neben „klassischen“ HPC-Knoten auch SMP-Knoten mit mindestens vier Sockeln und entsprechend großem Hauptspeicher enthalten. Die abgeschätzten Anwendungsanforderungen summieren sich auf einen Bedarf von insgesamt etwa 100.000 Kernen heutiger Leistungsfähigkeit mit einer Peak Performance von etwa einem Petaflops. Weiter wird mit der Ausrichtung auf datenintensives Rechnen neben einem hochperformanten parallelen Dateisystem besonderer Wert auf eine schnelle Anbindung und eine einfache Integration und Nutzung von großskaligen Forschungsdaten aus System-externen Datenquellen, etwa der Large Scale Data Facility (LSDF) am KIT, gelegt.

Ebene 3: Die Forschungs-Cluster (bwForCluster) und das HPC-Versorgungssystem (bwUniCluster)

Ausdifferenzierung und Kompetenzzentrierung: An den vier Standorten Freiburg, Mannheim/Heidelberg, Tübingen und Ulm werden Forschungsrechencluster (bwForCluster) errichtet, die jeweils von spezifischen Fach- und Forschungsdisziplinen *landesweit* für eine Forschungsprogrammatisierung genutzt werden. Die Zuordnung ist in der nachfolgenden Abbildung skizziert.

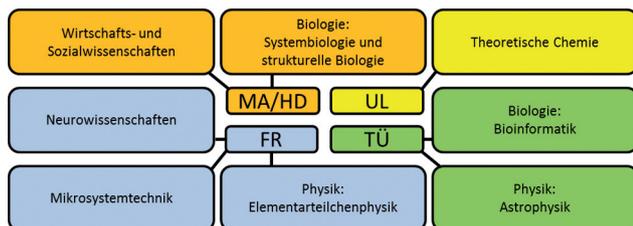


Abb. 2: Ausdifferenzierung der vier bwForCluster nach Fach- und Forschungsdisziplinen.

Die Zuordnungen folgen entsprechend der Wissenschaftsrat-Empfehlungen [3] dem Kriterium der an einem Standort vorliegenden anwendungs- und methodenwissenschaftlichen Kompetenz, der damit einhergehenden Anwenderbetreuung sowie Forschung und Lehre. Die nachstehende Tabelle stellt übersichtsartig die Fachkompetenzen der Standorte hinsichtlich der zugeordneten Forschungsdisziplinen und Anwendungsschwerpunkte der bwForCluster dar.

Tab. 1: Anwendungsschwerpunkte der bwForCluster

Anwendungsschwerpunkte Heidelberg/Mannheim	Anwendungsschwerpunkte Ulm
Lebenswissenschaften Wissenschaftliches Rechnen Volkswirtschaftslehre, Ökonometrie Betriebswirtschaftslehre, Banking, Finance and Insurance Sozialwissenschaften und Informatik, Wissensnetzwerke und Informationsextraktion	Theoretische Chemie und Biochemie Molekularmechanik im Chemiekontext Heterogene und Elektro-Katalyse Chemische Energiespeicherung und -wandlung
Anwendungsschwerpunkte Freiburg	Anwendungsschwerpunkte Tübingen
Simulation von Fluid- & Gasdynamik Modellierung neuronaler Netzwerke/Gehirnaktivitäten Datenanalyse phys. Messungen neuronaler Aktivität Modellierung von Gehirnerkrankungen Brain-Machine-Interfacing/Neuroprothesen Hochdimensionale Integration	Heiße Sterne (Hochenergieastrophysik) Planetenentstehung, Akkretion und Jets Neutronensterne und Gravitationswellen Next generation sequencing für personalisierte Medizin Drug design, high-throughput screening Machine learning in der Bioinformatik

Der vom Wissenschaftsrat hervorgehobenen Bedeutung des wissenschaftlichen Rechnens einerseits und den dort ausgesprochenen Empfehlungen zur Zusammenarbeit von Wissenschaftlern aus dieser Disziplin und den Anwendungsdisziplinen andererseits wird durch eine breite Vertretung des wissenschaftlichen Rechnens an den Standorten in Baden-Württemberg Ausdruck verliehen. In besonderer Weise tragen das Interdisziplinäre Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen der Universität Heidelberg (IWR), das Engineering Mathematics and Computing Lab (EMCL) in Karlsruhe, der Exzellenzcluster „Simulation Technology“ in Stuttgart aber auch andere Standorte in Form gebündelter Kompetenz dazu bei, womit in Baden-Württemberg die Methodenentwicklung im wissenschaftlichen Rechnen unterstützt und umgesetzt wird.

Für die Unterstützung der nicht durch die oben stehenden Forschungsprogrammatiken erfassten Wissenschaftler in Baden-Württemberg sowie zur Bereitstellung von einfach zugänglichen HPC-Ressourcen für gering parallelisierte Anwendungen, z. B. für den Einsatz in der Lehre, wird das HPC-Versorgungssystem namens bwUniCluster am Standort KIT errichtet. Das bwUniCluster-System ersetzt bzw. ergänzt Universitäts-lokale HPC-Ressourcen. Somit können bislang typischerweise lokal gehaltene HPC-Ressourcen der Ebene 3 zentralisiert werden. Eine Grundvoraussetzung hierfür ist der einfache Zugang der entfernten Ressource aus dem Benutzer-lokalen Kontext, der durch die Fortschritte des föderativen Identitätsmanagements (Projekt bwIDM) gegeben ist. Das HPC-Versorgungssystem bwUniCluster wird hälftig aus Mitteln der neun Landesuniversitäten und Mitteln des Landes finanziert.

Nutzungsrechte und Steuerungsaufgabe: Die Nutzung der vier bwForCluster erfolgt jeweils landesweit für die entsprechenden „scientific communities“ der benannten Forschungsthemen. Die Nutzungsberechtigungen werden durch Attribute von dem jeweiligen Heimatstandort mitgeteilt. Die Nutzungsanteile an dem Versorgungssystem bwUniCluster orientieren sich an den Finanzierungsanteilen der verschiedenen Standorte an dem bwUniCluster-System.

Die Steuerungsaufgaben für den Betrieb, den Support und ggf. für Priorisierungsentscheidungen im Falle einer Mangelbewirtschaftung sind wie folgt vereinbart. Entscheidungen für die Fortentwicklung von Betrieb und Support in Zusammenhang mit dem bwUniCluster-System sowie mit den bwForClustern werden vom ALWR-BW gefällt. Die Nutzerunterstützung wird föderativ erbracht, wobei der „Operations Support“ hauptverantwortlich durch den jeweiligen Betriebsstandort erbracht wird und der „User Support“ immer auch an jedem Nutzerstandort lokal ansprechbar ist. Die Aussteuerung der Nutzung unter den bereits genannten Festlegungen obliegt einem landesweiten Nutzerausschuss, in den die Prorektoren/Vizepräsidenten für Forschung pro Standort ein Mitglied entsenden.

Auch an der Investition nicht beteiligte Hochschulen des Landes können – soweit Kapazität vorhanden ist – gegen Kostenersatz das bwUniCluster-System nutzen. Für Industriekooperationen steht das bwUniCluster-System grundsätzlich zur Verfügung. Die HWW GmbH und die SICOS GmbH übernehmen hierbei Vertriebs- und Koordinationsaufgaben.

Technische Auslegung und Softwarebereitstellung: Die vier ForCluster sowie das bwUniCluster-System setzen grundsätzlich auf Standardarchitekturen, insbesondere auch wegen des verbreiteten Einsatzes von ISV-Codes. Ein konservatives „Minimal-Setup“ aus heutiger Sicht umfasst

pro Knoten mindestens eine Ausstattung von zwei x86-64-kompatiblen CPUs, 12 Prozessorkernen, 48 GB Hauptspeicher, Gigabit Ethernet sowie 250 GB lokaler Plattenplatz (SAS oder SATA).

Das Begleitprojekt bwHPC-C5

Für die föderative Wissenschaftsunterstützung, für die föderative Dienstleistung und für Clusterinnovation wird mit Startdatum 1. Juli 2013 ein Begleitprojekt unter dem Titel „bwHPC Coordinated Compute Cluster Competence Centers“ (bwHPC-C5) aufgesetzt. Das Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg beabsichtigt eine entsprechende Förderung. Mit bwHPC-C5 werden insbesondere so genannte Tiger Teams zur Unterstützung von Fachcommunities landesweit etabliert, die Fortentwicklung kooperativer Managementwerkzeuge gefördert sowie die Clusterentwicklung hinsichtlich Virtualisierung, spezialisierter Hardware und Anforderungen eines „Safe Data Centers“ vorangetrieben.

Das bwDATA-Konzept (Phase 1: 2013–2014)

Mit dem bwDATA-Konzept wurden ein Vorgehensmodell mit „Leitplanken“, eine Ist-Analyse sowie konkrete nächste Schritte in Form von Maßnahmen und Projektskizzen vorgelegt. Die grundlegende Idee dabei ist es, den Rahmen zu gestalten, so dass bei zukünftigen Speicherbeschaffungen und Datendienstentwicklungen durch Konsolidierung und Fortentwicklung der Systeme und Dienste dem gewaltigen Anstieg der Datenmengen bestmöglich begegnet werden kann. Als „Hebel“ dient hier Nutzungsverbreiterung des Speichersystems oder des Speicherdienstes. Das Konzept gliedert sich in zwei Phasen: Phase I (2013–2014) umfasst die neun Landesuniversitäten, Phase II (2014–2016) schließt weitere Landeseinrichtungen ein.

Ausgehend von den Speicheranforderungen allgemeiner IT- und Informationsdienste sowie vom Bedarf für das Speichern großer wissenschaftlicher Daten („Big Data in Science“) wurden und werden anhand geeigneter Speichersysteme und -technologien Lösungen für eine landesweite Realisierung untersucht. Um die Eignung der betrachteten Lösungen für die Konsolidierung und den Ausbau von Speicherdiensten zu überprüfen, werden im Konzept Bewertungsaspekte definiert, die es ermöglichen, die technische und qualitative Realisierbarkeit in Bezug auf die Nutzung und Erbringung der Dienste an landesweit

verteilten Standorten zu evaluieren. Hierbei wird einerseits die Entfernung der Dienste zu den Nutzern und andererseits die Entfernung der Dienste zu den Speichersystemen betrachtet. Die nachfolgende Abbildung veranschaulicht dies.

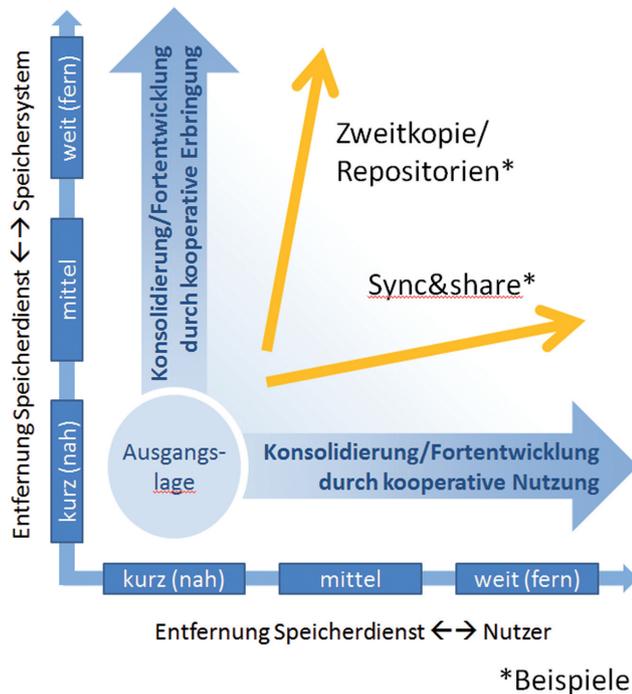


Abb. 4: Vorgehensmodell für die Realisierung zukünftiger Speicherdienste.

Zukünftig soll hierbei, ausgehend von den bestehenden Anforderungen und Diensten, eine zunehmende Verlagerung einzelner Datenspeicherdienste an wenige Standorte im Land in „Daten-Kompetenzzentren“ und in „Data Life Cycle Labs“¹ erfolgen. Hierfür gelten die Grundsätze, dass Performance-Speicher lokal zur datengenerierenden Einheit gestellt wird, wenn der Datentransport an eine weiter entfernte Stelle technisch oder wirtschaftlich nicht sinnvoll ist. In diesem Fall soll grundsätzlich eine landesweite Nutzung vorgesehen werden, entweder allgemein oder für eine spezielle „Community“. In allen anderen Fällen soll die Speicherung nur an wenigen Stellen im Land kooperativ erfolgen. Hierbei kommt der LSDF am KIT eine Musterrolle bei Backup und Archivierung großer wissenschaftlicher Daten zu, ebenso entsprechen die TSM-Ver-

bünde diesem Grundsatz bezogen auf Backup und Archivierung von Arbeitsplatzrechnern und Servern.

Als Beispiele für die Verwendung der Abbildung kann die Verortung der Dienste „Sync&Share“ und „Zweitkopie“ oder „Repositorien“ dienen: wird beispielsweise am KIT unter Nutzung des LSDF-Speichers ein „Sync&Share“-Dienst angeboten, so kann dieser Dienst landesweit genutzt werden, die Entfernung zwischen Nutzer und Dienst ist somit „weit“ (aus Landesperspektive), die Entfernung zwischen Dienst und System ist „nah“. Sollten zukünftig weitere, ggf. auch externe Speichersysteme eingebunden werden, könnte die Entfernung zwischen Dienst und System ebenfalls ansteigen. Letzteres ist auch heute schon der Fall bei der Verwaltung von Zweitkopien für „Disaster Recovery“-Fälle oder bei Diensten oberhalb verteilter, teilweiser globaler Repositorien.

Erfassung Ist-Zustand und Prognose

Als Basis für die Ermittlung der Anforderungen an die Datenhaltung an den Universitäten des Landes Baden-Württemberg wurde im Rahmen der Erstellung des bwDATA-Umsetzungskonzepts eine Erhebung des Ist-Zustands durchgeführt. Für eine Stärkung und bessere Nutzung der föderativen Strukturen ist eine dienstbezogene Betrachtung förderlich. Um eine Identifizierung von zukünftig kooperativ zu erbringenden Speicherdiensten zu ermöglichen, wurden die Ergebnisse für Dienstkategorien in Tabelle 1 zusammengefasst. Für jede Kategorie wurden die aktuell vorhandene Kapazität, die momentane Eignung für die föderative Erbringung sowie die Investitions- und Betriebskosten erhoben. Für den Zeitraum bis 2017 wird neben einer Schätzung des notwendigen Kapazitätszuwachses eine Abschätzung der zukünftigen Entwicklung für die einrichtungsübergreifende kooperative Erbringung/Nutzung der Dienste angegeben.

Für den E-Mail-Dienst kann aufgrund der niedrigen Durchsatzanforderungen der Nutzer ein dezentrales Nutzungskonzept zentralisierter Dienste erarbeitet werden. Das gleiche gilt für landesweite Backup und Archiv-Lösungen, die zusätzlich auch von der räumlichen Verteilung der Standorte und der damit verbundenen dezentralen Speicherung profitieren. Darüber hinaus stellen Backup und Archiv sowie insbesondere auch die wissenschaftlichen Anwendungen den größten Anteil der zu realisierenden Speicherkapazität. Daher sind große Skaleneffekte und Synergien bei einer landesweit kooperativen Diensterbringung zu erreichen. Für die Speicherung von E-Learning Inhalten ermöglicht die Entwicklung neuer landesweiter Konzepte für Informationsdienste eine nachhaltige

¹ Der Begriff entstammt der „Large Scale Data Management and Analysis (LSDMA)“-Portfolioerweiterung der Helmholtz Gemeinschaft [10] und wird entsprechend verwendet.

Tab. 2: Ergebnisse der Ermittlung des IST-Zustands 06/2012, Angaben beruhen zum Teil auf Schätzungen und Erwartungen für die technologische Entwicklung.

Dienste/Kategorien	Kooperative Nutzung/Erbringung des Diensts möglich?		Kapazität (in TB)	Kapazitätswachstum bis 2017	Kosten €/TB/Jahr
	2012 (IST-Zustand)	2017 (Prognose)	2012 (Schätzung)	2017 (Schätzung)	2012 (Schätzung)
E-Mail und Groupware	nein	ja	500	200%	600
Fileservices	teilweise	ja	1.150	300%	400
Informationsdienste	teilweise	ja	150	300%	400
Datenbanken	teilweise	teilweise	250	100%	600
Virtualisierung	nein	ja	400	300%	600
Wiss. Anwendungen	ja	ja	20.200	1.000%	400
Backup	ja	ja	15.750	500%	150
Archiv	ja	ja	11.600	500%	150

Konsolidierung. Im Bereich der Fileservices ist dies in Teilbereichen ebenfalls möglich, was bereits im Projekt bw-LSDf adressiert wird. Applikationen, die aufgrund hoher I/O-Last starke Anforderungen an die Latenzen zum nachgelagerten Speichersystem aufweisen (vgl. Datenbanken), werden auf absehbare Zeit nahe am Speichersystem realisiert bleiben müssen.

Die in diesem Abschnitt aufgezeigte Bestandsaufnahme verdeutlicht die heterogenen Anforderungen an nachhaltige Datenspeicherdienste. Vor dem Hintergrund des fortwährenden technologischen Fortschritts sowie den zu erwartenden neuen Anforderungen an die Speicher-Infrastruktur der Universitäten ist eine kontinuierliche bzw. erneute Erfassung der Dienste und deren charakteristischer Anforderungen während der Umsetzung erforderlich.

Abgeleitete Maßnahmen

Die in der vorgestellten Tabelle genannten Dienstkategorien wurden detailliert analysiert. Im Folgenden werden die abgeleiteten Maßnahmen beschrieben. In einem ersten Schritt werden die Skaleneffekte der großen Speicherkapazitäten wissenschaftlicher Anwendungen sowie bei Backup und Archiv weiter ausgenutzt werden. Hierbei werden die TSM-Verbünde weiter konsolidiert, der Datenspeicher für Simulationsdaten in Stuttgart ausgebaut und die Übergabe der zu archivierenden Daten vom HLRS an

das KIT entwickelt. In den anderen genannten Kategorien erscheinen die Möglichkeiten der Konsolidierung nicht kurzfristig erreichbar. Daher wird in landesweiten Innovationsprojekten die mögliche Effizienzsteigerung durch Kooperationsmodelle evaluiert. Deren Ergebnisse fließen dann direkt in das ständig fortzuschreibende Umsetzungskonzept ein und sollen Anpassung an technologische Entwicklungen garantieren. Darüber hinaus ist die Bildung von Kompetenzzentren, die sich mit unterschiedlichen Aspekten des gesamten Data Life Cycle beschäftigen, vorgesehen. Die Erfassung von Anforderungen und möglichen Betriebs- und Nutzungsszenarien wie in Tabelle 1 für die Landesuniversitäten dargelegt, wird bezüglich der Bedürfnisse und Sichten weiterer Hochschularten und Landes-einrichtungen fortgeschrieben. Hierzu wird im Dialog deren Bedarf quantitativ und qualitativ erfasst und in die Fortschreibung des Landeskonzeptes ab 2014 integriert.

Die landesweiten Entwicklungsprojekte widmen sich folgenden Themenbereichen:

1. Gemeinsame technische Konzeption der Servervirtualisierung, welche eine Migration virtueller Systeme zwischen verschiedenen Standorten erlaubt
2. Gemeinsame Konzeption für die föderative Erbringung des E-Mail-Dienstes
3. Gemeinsame Konzeption für Archivdienst, Preservation und Curation
4. Gemeinsame Konzeption für die Behandlung des „Data Life Cycle“ wissenschaftlicher Daten in der föderativen Speicherinfrastruktur

Schlussbemerkungen

Mit den beschriebenen Konzepten bwHPC und bwDATA richten sich die Universitäten konsequent auf kooperative Erbringung und Nutzung von IT-Diensten in den Bereichen Hochleistungsrechnen und datenintensive Dienste aus. Hierdurch werden Dienste, die ehemals als „Ebene-3-Dienste“, also auf standortlokaler Basis gesehen worden waren, zu Landesdiensten. Diese Veränderung wird die Wissenschaft „gebündelt“ unterstützen, verlangt aber auch Fortentwicklungen, die neben Rechner- und Speichersystembeschaffungen vor allem „Brainware“ in Form von Innovationsprojekten benötigen, wie sie vom Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg gefördert werden. Neben den in diesem Artikel genannten Innovationsprojekten sind zudem Arbeiten im Bereich IT-Sicherheit und Datenschutz vonnöten sowie das Etablieren eines Landesnutzerausschusses. Beides ist bereits initiiert. Dem Landesnutzerausschuss kommt insbesondere die Aufgabe zu, bei Veränderungen hinsichtlich des Bedarfs bei den bw*Clustern und den großen wissenschaftlichen Daten das notwendige Ausbalancieren zu gestalten. Die vorgestellten Konzepte sind auch keinesfalls als „Closed Shop“ der Universitäten zu verstehen: bei bwHPC sind die Hochschulen für angewandte Wissenschaften beteiligt, die Matlab-Landeslizenz wurde zusammen mit der Dualen Hochschule des Landes Baden-Württemberg beantragt und die Phase II von bwDATA sieht den Einbezug weiterer Partner, insbesondere der Hochschulen für Angewandte Wissenschaften und der Landesbibliotheken, vor.

Danksagung

Die Autoren und die Mitglieder des ALWR-BW danken der Deutschen Forschungsgemeinschaft und ihren Gutachtern für die Begutachtung und Unterstützung der beiden Landeskonzepete. An der Erstellung des bwHPC-Konzepts waren neben den ALWR-BW-Mitgliedern folgende Personen beteiligt: Rolf Bogus, Steffen Bücheler, Werner Dilling, Marek Dynowski, Stefan Friedel, Martin Hecht, Sven Hermann, Michael Janczyk, Heinz Kredel, Matthias Landwehr, Holger Marten, Christian Mosch, Thomas Nau, Achim Streit, Stefan Wesner. An der Erstellung des bwDATA-Konzepts waren neben den ALWR-BW-Mitgliedern folgende Personen beteiligt: Jörn Beutner, Thomas Bönisch, Rolf Bogus, Steffen Bücheler, Mathias Feiler, Ulrich Hahn, Marc Hemberger, Heinz Kredel, Thomas Nau, Sebastian Rieger, Klaus Scheibenberger, Jos van Wezel.

Literaturverzeichnis

- 1 Arbeitskreis der Leiter der wissenschaftlichen Rechenzentren der Universitäten in Baden-Württemberg (ALWR-BW), Strategiepapier „IT an den Universitäten Baden-Württembergs“, August 2010
- 2 Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg, Pressemitteilung „236 Millionen Euro für Ausbau der Höchstleistungsrechnerinfrastrukturen – Kabinett beschließt Ausbauplanung bis 2016“, 15. Juni 2010
- 3 Wissenschaftsrat, Positionspapier „Strategische Weiterentwicklung des Hoch- und Höchstleistungsrechnens in Deutschland“, Drs. 1838-12, Januar 2012
- 4 Wissenschaftsrat, Hintergrundinformation zu Hoch- und Höchstleistungsrechnen in Deutschland, Januar 2012
- 5 Deutsche Forschungsgemeinschaft, Kommission für IT-Infrastruktur (KfI), „Informationsverarbeitung an Hochschulen – Organisation, Dienste und Systeme – Empfehlungen der Kommission für IT-Infrastruktur für 2011–2015“, 2010, insbesondere Seiten 39–41
- 6 A. Szalay, „Extreme Data-Intensive Computing in Science“, Vortrag im Rahmen des LSDMA-Symposiums, SCC/KIT, 25. September 2012, online via: indico.desy.de/conferenceTimeTable.py?confId=6264#20120925
- 7 J. Köhler, S. Labitzke, M. Simon, M. Nußbaumer und H. Hartenstein, „FACIUS: An Easy-to-Deploy SAML-based Approach to Federate Non Web-Based Services,“ Proceedings of the IEEE International Conference on Trust, Security and Privacy in Computing and Communications (TrustCom), 2012.
- 8 Klaus Rechert, Isgandar Valizada, Dirk von Suchodoletz und Johann Latocha, „bwFLA – a functional approach to digital preservation“, Praxis der Informationsverarbeitung und Kommunikation (PIK), Heft 4, Band 35, 2012, Seiten 259–267
- 9 J. Chr. Schulz und S. Hermann (Hrsg.), „Hochleistungsrechnen in Baden-Württemberg – Ausgewählte Aktivitäten im bwGRiD 2012“, KIT Scientific Publishing, 2013
- 10 Large Scale Data Management and Analysis (LSDMA), <http://www.helmholtz-isdma.de/>



Der ALWR-BW wurde 1981 als Arbeitskreis der Landesrektorenkonferenz Baden-Württemberg eingerichtet. Mitglieder sind die Leiter der neun Universitätsrechenzentren bzw. Informationszentren; ein Vertreter des Wissenschaftsministeriums wirkt als ständiger Gast mit. Aufgabe des ALWR-BW ist die Koordination der IT-Dienste und deren Management sowie zugehörig die Kooperation bei der

Diensterbringung. Der ALWR-BW steuert insbesondere die vielfältigen landesweiten Innovationsprojekte. Seit 1986 koordiniert der ALWR-BW auch den Auf- und Ausbau des wissenschaftlichen Landesnetzes BelWü. Der ALWR-BW tagt mindestens viermal jährlich. Die aktuellen Mitglieder sind: Hannes Hartenstein (Karlsruher Institut für Technologie), Michael Hebgen (Universität Heidelberg), Karl-Wilhelm Horstmann (Universität Hohenheim), Peter Leinen (Universität Mannheim), Michael Resch (Universität Stuttgart), Gerhard Schneider (Universität Freiburg), Marcel Waldvogel (Universität Konstanz), Thomas Walter (Universität Tübingen) und Stefan Wesner (Universität Ulm); ständiger Gast: Peter Castellaz (MWK).



Hannes Hartenstein:
Karlsruhe Institute of Technology,
Steinbuch Centre for Computing,
76128 Karlsruhe



Thomas Walter:
Eberhard Karls Universität Tübingen,
Zentrum für Datenverarbeitung,
Wächterstraße 76,
72074 Tübingen



Peter Castellaz:
Ministerium für Wissenschaft,
Forschung und Kunst Baden-Württemberg,
Königstraße 46,
70173 Stuttgart