



D-Grid: Schritte zu einer nationalen e-Science-Initiative

Heinz-Gerd Hegering

Ludwig-Maximilians-Universität München
Leibniz-Rechenzentrum
Barer Straße 21,
80333 München
Heinz-Gerd.Hegering@lrz.de

1 Die Bedeutung von Grids

Das Wort „Grid“ wird in jüngster Zeit so oft und in verschiedenen Kontexten benutzt, dass die Frage berechtigt ist, ob es sich um ein weiteres „buzzword“ mit dem üblichen „hype“ handelt. Um es gleich klarzustellen, der Autor ist nicht dieser Meinung. Vielmehr handelt es sich um eine weltweit stattfindende Bewegung zu einer neuartigen kooperativen Nutzungsmöglichkeit virtualisierter Ressourcen, die insbesondere auch die Bildung dynamischer und temporärer Nutzergruppen unterstützt und damit besonders interdisziplinärem und institutionsübergreifendem wissenschaftlichen Arbeiten entgegenkommt.

Die ersten Ideen dazu stammen aus dem Umfeld des Hochleistungsrechnens, wo man Rechner über das Netz zu Metacomputern zusammenschalten wollte. Die Idee ist dann Ende der 90er Jahre erweitert worden zu allgemeinen Ressourcenverbänden. Die Pioniere auf diesem Gebiet, Ian Foster und Carl Kesselman [1] drücken das so aus: „The word GRID is chosen by analogy with the electric powergrid which provides pervasive access to power... We believe that by providing pervasive, dependable, consistent, and inexpensive access to advanced computational capabilities, databases, sensors, and people, computational grids will have a similar transforming effect ... and impact on human capabilities and society.“

Als Grid-Anwendungen werden oft verteiltes Hochleistungsrechnen, On-Demand-Computing, datenintensives Computing und Collaborative Computing genannt. Natürlich war von Anfang an klar, dass der Grundidee Grid eine Reihe offener Problemstellungen gegenüber steht, z.B.

- welche Anwendungsklassen sind geeignet?
- welche Programmiermodelle und -werkzeuge sind adäquat?
- welche Algorithmen und Lösungsmethoden sind Grid-angemessen?
- wie können Ressourcenmanagement, Sicherheit, Leistungsüberwachung etc. organisiert werden?
- welche Anforderungen stellen sich an Grid-fähige Endsysteme, Protokolle u. dgl.?

Der Begriff Grid ist nicht scharf definiert. Reinefeld [2] unterscheidet Informations-Grids, Ressourcen-Grids und Dienste-Grids und nennt als charakteristische Eigenschaften von Grid-Systemen, in Abgrenzung zu anderen Organisationsformen: Lokale Autonomie der Ressourcen-Bereitsteller, Heterogenität der Ressourcen, Skalierbarkeit (Grid-Systeme





können wenige lokale Ressourcen beinhalten oder weltumspannend sein) und schließlich Dynamik und Adaptivität.

Grids können ohne Unterstützungswerkzeuge (Grid-Middleware) auf der Basis von Standards nicht wirksam werden. Als bedeutendstes Konsortium sei hier das Global Grid Forum (GGF, <http://www.ggf.org/>) genannt, das auch eine Grid-Rahmenarchitektur Open Grid Service Architecture (OGSA) entwickelt hat. In zahlreichen Projekten wurde und werden Grid-Systeme angewendet bzw. evaluiert, so z.B. European Data Grid (EDG), European Grid of Solar Observations (EGSO), Earth Systems Grid (ESG), Grid Resources of Industrial Applications (GRIA), Grid Physics Networks (GriPhyN), Globus, International Virtual Data Grid Lab (iVDGL), LHC Computing Grid (LCG), Open Archives Initiative usw.

Auch haben sich eine Reihe von nationalen und sonstigen wissenschaftspolitischen Grid-Initiativen entwickelt. Zu nennen sind etwa in USA die NSF mit ihren Vorhaben Cyber-Infrastructure [3] und NSF Middleware Initiative oder das DoE [4]. Auf nationaler Ebene in Europa sind erwähnenswert die e-Science-Bewegung in Großbritannien [5], die Niederlande [6] mit Dutch Grid und Virtual Lab, die nordischen Länder (NORDUGRID) und Italien (INFN-Grid). Als europäische Anstrengungen müssen genannt werden das EGEE-Projekt im 6. Rahmenprogramm, das von CERN initiierte LHC-Computing Grid (LCG) und das Forschungsprogramm der EU Expert Group [7].



2 Situation in Deutschland bis 2003

Natürlich haben sich einzelne Wissenschaftler, einzelne Wissenschaftscommunities und einzelne Institute in Deutschland mit Grid-Fragestellungen und -Nutzungsformen auseinandergesetzt. Es seien beispielweise genannt

- die UNICORE-Projekte, die von einer Initiative der Höchstleistungszentren, insbesondere FZ Jülich, ausgehend zu einer SW-Entwicklung für verteilte Auftragsbearbeitung führten, die vom BMBF gefördert wurde und unter breiterer Industriebeteiligung stattfand. Die Projekte, die zu installierten Produkten führten, sind seit 2002 ausgelaufen.
- das DFN-Entwicklungsprogramm, welches etliche Grid-relevante Projekte enthielt und seit 2001 nicht mehr gefördert wird.
- das von CERN ausgehende LHC-Grid. Es sieht für den Standort des Forschungszentrums Karlsruhe die Einrichtung eines Tier1-Zentrums für die aus dem LHC-Experiment ab 2006 anfallenden Daten für die Community der Teilchenphysiker vor.

Bis 2003 gab es aber keine etwa zu USA, GB oder NL vergleichbare nationale deutsche Initiative zu Grid und auch keine koordinierten Anstrengungen für eine nationale Grid-Infrastruktur. Diese Situation konnte und durfte nicht beibehalten werden, denn

- Grid macht nicht an nationalen Grenzen Halt,
- deutsche Wissenschaftler sind in internationale Fachgruppen (Communities) eingebunden,
- deutsche Wissenschaftler sind angewiesen auf die Zugriffsmöglichkeit auf internationale Ressourcen (Rechner, Daten, Experimente),



- jede Community muss nicht alle Grid-Aspekte neu erfinden,
- Grid ohne Standardisierung und Koordination auf vielen Ebenen funktioniert nicht,
- Grid-Communities sind nicht statisch,
- Synergieeffekte ergeben sich nur auf der Basis einer möglichst flächendeckenden Grid-Infrastruktur,
- Deutschland kann es sich auch vor dem Anspruch einer (zumindest partiellen) „Technical Leadership“ nicht leisten, die Chancen des Grid zu verschlafen, zumal auf dem Gebiet des Grid noch viele offene Forschungs- und Entwicklungsfragestellungen existieren.

Getrieben durch dieses Bewusstsein trafen sich auf Anregung des Forschungszentrums Karlsruhe Anfang 2003 alle bekannten, mit Grid-Aktivitäten befassten Einrichtungen aus dem Wissenschaftsbereich, inkl. DFN, BMBF und etlichen Industrievertretern, zu mehreren Workshops. Es bestand uneingeschränkter Konsens über die Notwendigkeit der Bündelung der isolierten deutschen Grid-Aktivitäten sowie der Erfordernis eines nationalen Förderprogramms. Es wurde im April 2003 beschlossen, unter dem Namen D-Grid eine deutsche Grid-Initiative zu gründen, um national Synergiepotenziale für globale, verteilte und neuartige Wissenschaftskollaborationen auf der Basis internetgestützter Dienste freizusetzen. Dazu wurde ein Lenkungsausschuss (LA) bestellt, der ein deutsches e-Science Framework und ein entsprechendes Strategiepapier entwickeln sollte. Dem LA gehören an Prof. Hegering (LMU/LRZ München, DFN), Prof. Hiller (AWI Bremerhaven), Prof. Maschuw (FZ Karlsruhe, GridKa), Prof. Reinefeld (ZIB Berlin, GGF), Prof. Resch (HLRZ Stuttgart). Der LA bekam das Mandat, die deutschen Grid-Communities in der D-Grid-Initiative zu vertreten, ein techn.-wiss. Programm bis zum Sommer 2004 zu erstellen und gemeinsam mit dem BMBF ein Förderprogramm zu diskutieren.

3 Arbeiten im D-Grid seit 2003

Im Laufe des Sommers 2003 entwickelte der D-Grid-LA ein Strategiepapier [8]. Ein Kern des Papiers ist das e-Science Framework, siehe Abbildung, das das Anliegen von D-Grid verdeutlicht: Es sollen neue Arbeitsformen für die Wissenschaft erschlossen werden, indem neue Community-Bildungen gefördert werden und viel flexibler unter Ausnutzung von Synergiepotenzialen auf Ressourcen und Dienste zugegriffen werden kann. In [8] wird ausgeführt:

- Das horizontale Synergiepotenzial besteht in der Bündelung und gemeinsamen Nutzung von Middleware, Services und e-Science-Methoden über die bisher isolierten Wissenschaftscommunities hinweg. Die damit einhergehende Homogenisierung und Standardisierung ergibt Synergien für das wissenschaftliche Arbeiten.
- Der Community-spezifische Effizienzgewinn für die jeweilige vertikal dargestellte Wissenschaftsdisziplin besteht in der Schaffung und Bündelung sowie der allgemeinen Nutzbarmachung von Diensten, Ressourcen und Infrastruktur. Dies kann auf jeder der in der Abbildung dargestellten Ebenen e-Science-Methoden, Services, Middleware und Infrastrukturen geschehen. Dabei sollen neue und offene, aber auch geschlossene Grid-Communities (z.B. virtuelle private Grids) unterstützt werden, basierend auf einer ansonsten gemeinsam genutzten Infrastruktur.

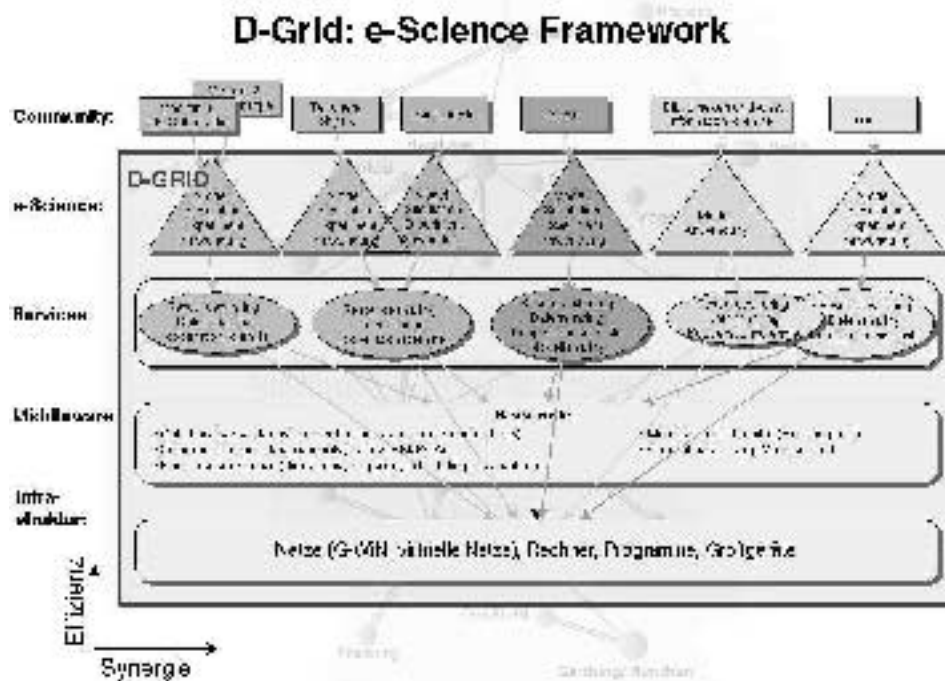


Abbildung 1: e-Science Framework

Die hinter dem Rahmenwerk steckende Vision bedeutet einen Paradigmenwechsel im wissenschaftlichen Arbeiten, der hinzielt auf

- eine Virtualisierung von Organisationen (dynamisch bildbare, temporäre Communities). Dies fördert interdisziplinäres und interorganisationelles Arbeiten.
- eine Virtualisierung von Ressourcen. Heterogene und lokal autonome Ressourcen werden über geeignete Middleware und Dienste system-, orts- und institutionenübergreifend zugreifbar gemacht.
- ein Community-angepasstes Maßschneidern von Diensten.
- eine Flexibilisierung von Kooperationsformen.

Insofern darf man zu Recht bei dieser Vision von einem „next generation framework for scientific work and collaboration“ sprechen. Um diese Ziel zu erreichen, sind noch viele Schritte zu tun. [8] nennt folgende Maßnahmen:

- Etablierung eines E-Science-Kompetenznetzwerkes in Form eines koordinierten Zusammenwirkens von einschlägigen Zentren. In diesem Netz soll das Bereitstellen von Ressourcen und Grid-Know-How geschehen sowie das Entwickeln und Pilotieren von Anwendungsszenarien für Wissenschaft und Industrie.
- Entwicklung von Grid-Software und Grid-Methoden in Kooperation mit internationalen Forschungs- und Industrieprojekten.

- Stufenweise Schaffung einer nachhaltigen Basisinfrastruktur für Grids.
- Etablierung von e-Science-Pilotprojekten.

4 Vorbereitung eines D-Grid-Forschungsprogramms 2004

Vorrangig war zunächst die Vorbereitung eines Forschungs- und Entwicklungsprogramms als Basis für ein Förderprogramm. Dazu wurde noch Ende 2003 ein Fragebogen an alle bekannten Grid-Interessierten geschickt, in dem – getrennt nach den Rollen Ressourcen-Anbieter, Entwickler von Grid-Software, Nutzer von Grid-Systemen – Fragen gestellt wurden nach Community-Zugehörigkeit, Grid-fähigen Applikationsszenarien und Anwendungen, benötigten Basisdiensten und Ressourcen, offenen Problemen, Erfahrungen und Wünschen.

Aufgrund der Antworten schlug der Lenkungsausschuss im Februar 2004 die Bildung von fünf Arbeitskreisen vor mit der Bitte, die im Folgenden genannten Grid-relevanten Themenkreise aufzuarbeiten.

AK1:Kooperationsmodelle für den Betrieb einer Grid-Infrastruktur

- Bestandsaufnahme verfügbarer Ressourcen
- Abrechnungsmodelle für Ressourcennutzung, Ressourcenbewertung
- Rechte für Ressourcennutzung, sonstige weitere rechtliche und organisatorische Fragestellungen
- Bestandsaufnahme von Organisationsformen von Communities (im Sinne virtueller Organisationen)

AK2:Middleware und Services

- Bestandsaufnahme vorhandener Middleware
- Interoperabilitätsanforderungen an Middleware-Komponenten
- Bestimmung des Bedarfs für Sicherheitsinfrastrukturen für D-Grid (u.a. Security, AAA-Maßnahmen, Directory, Roaming)
- Ressourcenbroker und verwandte Dienste
- Dienstbeschreibungen

AK3:Managementmethoden und Autonomic Computing

- Rahmenbetriebsstrukturen für Dienste, Middleware- und Service-Ebene (SLAs, Support- und Operationszentren, Einbindung in vorhandene Infrastrukturen)
- Qualitätsmanagement
- Methoden für Betriebssicherheit, Selfmanagement u. dgl.

AK4:Netz

- Bestandsaufnahme von Netzdiensten und -protokollen
- Bestimmung neuer Grid-spezifischer Netzdienste
- Bestimmung der qualitativen und quantitativen Grid-spezifischen Volumenbedarfe



AK5:Daten- und Informationsmanagement

- Langzeitarchivierung
- Massendatenverwaltung
- Verteilte gemeinsame Dateisysteme
- Metadaten und Informationsdienste

Es wurden auch Anbieter- und Nutzergruppen gebeten, ihre Community-spezifischen Anforderungen an die Arbeitskreise zu formulieren und den Gewinn im Sinne von e-Science-Synergien darzustellen unter der Prämisse, es gäbe eine leistungsfähige Grid-Infrastruktur. Als Gruppen waren beteiligt Vertreter der Teilchenphysik, des Ingenieurwesens, der Medizin und Bioinformatik, der Klimaforschung und der Erdwissenschaften, der Hoch- und Höchstleistungsrechenzentren und des wiss. Informationswesens.

Die Gruppen und Arbeitskreise sollten Berichte liefern, auf deren Basis ein Forschungs- und Entwicklungsprogramm für eine nachhaltige D-Grid-/e-Science-Infrastruktur aufgesetzt werden kann. Bei der Berichtserstellung sollten internationale Grid-Aktivitäten und Erfahrungen einbezogen werden wie z.B. [4, 7, 9]. Alle beteiligten Institutionen hatten zuvor durch die Unterschrift einer Grundsatzerklärung [10] ihren Mitwirkungswillen bekundet.



Derzeit entsteht auf der Grundlage der inzwischen vorliegenden Abschlussberichte [11] der Nutzergruppen und Arbeitskreise eine erste Version eines Arbeitsprogramms, das Anfang Juni 2004 mit dem BMBF zur Konkretisierung eines Förderprogramms diskutiert werden soll. Noch im Spätsommer 2004 sollen dann erste Projekte ausgeschrieben werden, mit einer Förderung ab 2005.



Frau Ministerin Bulmahn hat anlässlich des Treffens des Global Grid Forum in Berlin am 10. März 2004 angekündigt, dass das BMBF die deutsche e-Science-Initiative als Leitthema unterstützen will, und sie hat 100 Mio. Euro über fünf Jahre in Aussicht gestellt. Es laufen zusätzlich intensive Anstrengungen, die Spitzen der Forschungsgesellschaften (z.B. DFG, MPG, HGF, FhG) in diese nationale e-Science-Bewegung mit einzubinden, um auch die institutionellen Förderprogramme auf dieses Anliegen stärker auszurichten. Vielleicht gelingt es ja, anlässlich der 20-Jahre-Feier des DFN am 15. Juni 2004 durch abgestimmte Erklärungen einen spürbaren „Ruck“ auch „von oben“ in die deutsche e-Science-Initiative D-Grid zu bringen, die in den letzten wenigen Monaten „von unten“ Erstaunliches auf den Weg gebracht hat.

Natürlich gibt es noch viel zu tun (u.a. Schaffung eines organisatorischen Rahmens, Bestellung eines Steering Committees zur inhaltlichen Projektkoordination, Festlegung von Richtlinien, Entwicklung von Geschäftsmodellen, Schaffung einer Geschäftsstelle und eines Kompetenznetzes, Konkretisierung des Entwicklungsprogramms, Entwicklung und Einsatz von Grid-Software), bis das angestrebte Ziel erreicht wird, ab 2007/8 eine produktive nationale Grid-Infrastruktur mit gesichertem Betrieb und großer Nachhaltigkeit verfügbar zu haben. Dass dabei auch dem Deutschen Forschungsnetz eine wesentliche Rolle zukommt, steht außer Frage; die DFN-Organe haben sich einmütig dafür ausgesprochen und die DFN-Geschäftsstelle bereitet sich seit geraumer Zeit intensiv darauf vor.



Literatur

- [1] I. Foster, C. Kesselman: *The GRID. Blueprint for a New Computing Infra-structure*. Morgan Kaufman Publ., 1999
- [2] A. Reinefeld, F. Schintke: *Grid Services*. Informatik Spektrum 27 (2), April 2004. Springer-Verlag, S. 129-135
- [3] *NSF: Revolutionizing Science and Engineering Through Cyber Infrastructure*. NSF Blue Ribbon Advisory Panel, January 2003. <http://www.communitytechnology.org/nsfreport>
- [4] DoE: *Science Networking Challenge: Roadmap to 2008*. June 2003. <http://www.es.net/hypertext/welcome/Roadmap/Roadmap-TOC-Sect%202.pdf>
- [5] UK e-Science Core Program. <http://www.escience-grid.org.uk/>
- [6] *Virtual Lab e-Science – Towards a New Science Paradigm*. February 2003. <http://wtcw.nl/en/projects/virtueellab.html>
- [7] EU Expert Group: *Next Generation Grids*. European Grid Research 2005-2010. Technical Report, June 2003. <http://www.cordis.lu/ist/grids/index.html>
- [8] H.-G. Hegering, W. Hiller, R. Maschuw, A. Reinefeld, M. Resch: *D-Grid: Auf dem Weg zur e-Science in Deutschland*. Dezember 2003. <http://www.d-grid.de/>
- [9] Fox, Walker: *e-Science GAP Analysis*. <http://www.grid2002.org/ukescience/gadresources/GapAnalysis30June03.pdf>
- [10] D-Grid-Grundsatzklärung. <http://www.d-grid.de/>
- [11] Abschlussberichte der D-Grid-Arbeitskreise und Nutzergruppen, Mai 2004. <http://www.d-grid.de/>