

TK III: Infrastrukturen für eResearch

Konrad Meier (Vortragender)
konrad.meier@rz.uni-freiburg.de
Telefon: 07612034674
Physikalischen Institut
Universität Freiburg
Hermann-Herder-Str. 3
79104 Freiburg i.Br.

Björn Grüning
gruening@informatik.uni-freiburg.de
Technische Fakultät
Universität Freiburg
Georges-Köhler-Allee 106
79110 Freiburg i.Br.

Clemens Blank
blankc@informatik.uni-freiburg.de
Zentrum für Biosystemanalyse (ZBSA)
Universität Freiburg
Habsburgerstr. 49
79104 Freiburg i.Br.

Michael Janczyk
michael.janczyk@rz.uni-freiburg.de
Rechenzentrum
Universität Freiburg
Hermann-Herder-Str. 10
79104 Freiburg i.Br.

Dirk von Suchodoletz
dirk.von.suchodoletz@rz.uni-freiburg.de
Rechenzentrum
Universität Freiburg
Hermann-Herder-Str. 10
79104 Freiburg i.Br.

Januar 2017

Virtualisierte wissenschaftliche Forschungsumgebungen und die zukünftige Rolle der Rechenzentren

Konrad Meier¹, Björn Grüning², Clemens Blank³, Michael Janczyk⁴, Dirk von Suchodoletz⁵

Abstract: Virtualisierungs- und Cloud-Technologien haben den Wandel der IT-Landschaft der letzten Jahre erheblich geprägt und werden von der Wissenschaft zunehmend für ihre eigenen Zwecke genutzt. Rechenzentren sollten auf den steigenden Bedarf in Forschung und Lehre mit der Bereitstellung geeigneter Infrastrukturen antworten. Das Paper untersucht die Frage, wie Cloud-, Compute- und Lehrpool-Umgebungen so bereitgestellt werden können, dass eine bestmögliche Versorgung der Wissenschaft bei gleichzeitig effizienter Nutzung vorhandener Ressourcen erreicht werden kann. Durch die Erzeugung geeigneter virtueller Forschungs- und Lehrumgebungen können verschiedene Wissenschafts-Communities ihre Vorhaben durchführen ohne hierfür weiterhin eigene Hardware-Infrastrukturen bereitstellen zu müssen. Es wird anhand der Umsetzung zweier prototypischer virtualisierter Forschungsumgebungen im Bereich der Elementarteilchenphysik und der Bioinformatik diskutiert, wie zukünftige Schnittstellen zwischen Forschenden und Infrastrukturbetreibern aussehen sollten. Als Basis kommen die landesweit in Baden-Württemberg angebotenen kooperativen Forschungsinfrastrukturen, das Hybrid-Cluster NEMO, die bwCloud und für den Desktop-Bereich bwLehrpool zum Einsatz. Die auf diesen Systemen eingesetzte Abstraktion durch Virtualisierung ermöglicht eine Skalierung der Ressourcen in den virtualisierten Forschungsumgebungen.

Keywords: VFU, Virtualisierung, Cloud, Rechenzentrum

1 Einleitung

Die Rolle der Informationstechnologie hat sich im letzten Vierteljahrhundert von einer durch wenige Wissenschaftszweige genutzten Hilfstechnologie zu einem absolut zentralen Werkzeug in fast allen Bereichen von Forschung und Lehre der Universitäten entwickelt. Digitale Datenerhebung, -verarbeitung, -verteilung und Archivierung sind Kernbestandteile jeder wissenschaftlichen Arbeit. Diese Entwicklungen spiegeln sich in den veränderten Erwartungen an Rechenzentren wider. Mit der Verbreitung IT-gestützter Forschung und der abnehmenden Stellung von Großrechnern fand eine Verschiebung von IT-Mitarbeitern in die Fakultäten statt. Sie sollten die Freiheit bei der Wahl der eingesetzten elektronischen Werkzeuge sicherstellen und Unterstützung für Forschungsaufgaben und -projekte leisten. Die Komplexität und Vielfalt der eingesetzten Systeme und Software ist in den vergangenen Jahren jedoch erheblich gestiegen und daher nicht mehr mit dem ursprünglichen Personaleinsatz zu bewältigen. Zusätzlich dazu entwickeln sich interdisziplinärer Austausch

¹ Physikalisches Institut, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, konrad.meier@rz.uni-freiburg.de

² Technische Fakultät, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, gruening@informatik.uni-freiburg.de

³ Zentrum für Biosystemanalyse, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, blankc@informatik.uni-freiburg.de

⁴ Rechenzentrum, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, michael.janczyk@rz.uni-freiburg.de

⁵ Rechenzentrum, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, dirk.von.suchodoletz@rz.uni-freiburg.de

und fächerübergreifende Kollaboration zu zentralen Aspekten an heutigen Fakultäten. Entwicklungen wie virtualisierte Forschungsumgebungen (Vgl. hierzu: [Bu14] bzw. [Sc15]) können helfen eine Aufgabenverteilung zwischen Forschenden und Infrastrukturanbietern zu erreichen.

2 Von der Virtualisierung zur Science-Cloud

Der physikalische Ort, an dem eine Software ausgeführt wird, wird durch schnelle Netze und die Virtualisierung von Rechenleistung und Storage zunehmend unwichtiger. Ein Zugriff auf geographisch entfernte Standardanwendungen, die am besten in der Nähe zu den zu verarbeitenden Daten laufen, kann heutzutage sehr performant erfolgen. Die Voraussetzungen an die lokale Hardware des Anwenders sinken. Dieses Konzept der Abstraktion vom physikalischen Ort und der darunterliegenden Hardware verbirgt sich hinter dem Begriff Cloud. Kommerzielle Rechenzentren setzen bei Cloud-Diensten massiv auf die "Economies of Scale"-Effekte und übersteigen die Kapazitäten auch großer Universitäten inzwischen um Größenordnungen. Nach dem Schritt von der Mainframe auf den ubiquitären PC stellt die Cloud den nächsten Schritt in der Reihe der wesentlichen IT-Innovationen dar. Nachdem eine Hardware-Innovation die erste Krise ausgelöst hatte, wird die zweite Krise nun durch eine Software- und Service-Innovation angestoßen und stellt die Alternativlosigkeit von Hochschulrechenzentren in Frage. Auf diese externen Entwicklungen sollten Rechenzentren reagieren und ihr Service-Portfolio geeignet anpassen.

Virtualisierte Forschungsumgebungen (VFU) beginnen sich Cloud-Technologien zu nutzen zu machen und in den verschiedenen Wissenschaftsdisziplinen zu etablieren. Sie schaffen (virtuelle) Arbeitsplattformen, die eine kooperative Forschungs- oder Lehrtätigkeit durch mehrere Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler an unterschiedlichen Orten zu gleicher Zeit ohne Einschränkungen ermöglichen. Eine VFU unterstützt Forschende in verschiedenen Phasen des wissenschaftlichen Prozesses und kann je nach Disziplin von der Erhebung, Berechnung oder Verarbeitung von Eingangsdaten, der Simulation von Prozessen bis hin zur Generierung von Ergebnissen reichen. Vielfach sind Werkzeuge für Recherche, Bearbeitung von Texten und Referenzen zur Erstellung der finalen Publikation enthalten. VFUs konzentrieren sich vor allem auf die Softwareseite, technologisch basieren sie vielfach auf Virtualisierung oder Containerisierung. Sie können damit die gesamte Breite von virtuellen Desktops über Cloud-Instanzen bis hin zu abgeschotteten Umgebungen im High Performance Computing abdecken. Sie vereinigen das disziplinspezifische Know-How in einem Paket, welches aus Sicht eines Rechenzentrums als eine Art Black-Box auf geeigneten Forschungsinfrastrukturen ausgeführt werden kann. Eine ähnliche Entwicklung gehen Virtual Desktop Infrastructures für den Arbeitsplatz mit der Bereitstellung von Lehr- und Lernumgebungen [Ri16].

Durch die so erreichbare Trennung von Inhalt und Infrastruktur muss der wissenschaftliche Nachwuchs nicht mehr seine Zeit auf die Installation von Betriebssystem und Software ohne Garantie auf Erfolg verwenden. Die Aufgabenteilung ist hochgradig standardisierbar, vermeidet Fehler bei der Installation und ist eine Grundvoraussetzung für eine zuverlässig archivierbare und nachnutzbare virtualisierte Forschungsumgebung. Durch standardisierbare und wiederholbare Prozesse wird die Dokumentation der Arbeit der Forschenden ver-

einfacht. Zwar können unbemerkte Veränderungen durch Betriebssystemupgrades nicht komplett verhindert werden, sie sind jedoch zumindest nachvollziehbar dokumentiert und bei Bedarf rückholbar.

Wird eine wissenschaftliche Forschungsumgebung von Beginn an virtualisiert aufgesetzt, ist sie weniger abhängig von der darunter liegenden konkreten Hardware. Ein späteres Verschieben der Umgebung auf eine neue Virtualisierungsplattform wird deutlich erleichtert. So kann ein Wissenschaftler eine Simulationssoftware auf seinem lokalen Rechner entwickeln. Eine dedizierte lokale Hardware-Ressource in Form eines Desktops ist oft von Vorteil, da Algorithmen und Prozesse interaktiv mit direktem Feedback getestet werden können. Die spätere Simulation kann auf einer Cloud oder in einem Cluster berechnet werden, da der Arbeitsrechner üblicherweise mit der Anzahl der Simulationsläufe überfordert ist. Diese Ressourcen dafür können durch das Rechenzentrum in Form einer Compute-Cloud bereitgestellt werden. Die komplette Umgebung für die Simulation könnte hierbei bereits als virtuelle Maschine auf dem Desktop-Computer erstellt werden, damit das Image der virtuellen Maschine direkt in die Cloud-Umgebung kopiert und eine oder mehrere für die Problemstellung angemessene virtuelle Instanzen gestartet werden können. Gleichzeitig kann das Image Kooperationspartnern zur direkten Verwendung oder Anpassung an die eigene Fragestellung wie auch Dritten zur Verifikation des Workflows zur Verfügung gestellt oder im Rahmen einer Lehrveranstaltung genutzt werden.

Die Vorteile solcher Ansätze sind erheblich, so dass Abstraktion von der darunterliegenden Infrastruktur (Hardware) sowie die Bereitstellung von standardisierten Zugriffsschnittstellen (APIs) von der Europäischen Kommission gefördert werden [Eu]. Ziel ist es die interdisziplinäre Kooperation der Wissenschaftsbereiche durch die Bereitstellung von Diensten und Werkzeugen zu fördern. Die dafür bereitgestellten Ressourcen sollten alle Bereiche der Infrastruktur abdecken (Netzwerk, Berechnungen, Daten, Software, Benutzer-Schnittstellen). Die EU Kommission erwartet durch den Einsatz von virtualisierten Forschungsumgebungen eine effizientere Kooperation sowie eine gesteigerte Produktivität durch den einfacheren Zugang zu Daten.

2.1 Veränderte Rolle der Rechenzentren

Rechenzentren (und neuerdings dedizierte E-Science-Abteilungen) sollen als zentrale Einrichtungen Hilfestellung leisten und den Betrieb technischer Infrastruktur sicherstellen. Doch sind diese Einrichtungen derzeit gleichfalls mit diesen neuen Aufgabenstellungen überfordert, da aufgrund der Breite der technischen Anforderungen, zahllosen fachspezifischen Werkzeugen und deren Abhängigkeiten eine fallbezogene Hilfestellung nur noch in Ausnahmefällen geleistet werden kann. So sind beispielsweise die von den Rechenzentren angebotenen Standarddienste wie Storage oder Server-Hosting oft zu wenig passgenau, um eine ausreichende Entlastung der einzelnen Fachdisziplinen zu bieten. VFUs müssen technisch dem Stand der Entwicklung entsprechen, bedürfen zur Entfaltung ihrer vollen Wirksamkeit aber auch der Akzeptanz in den jeweiligen Fach-Communities. Der direkte Kontakt der Rechenzentren zu den Forschenden ist damit notwendige Voraussetzung ihre Angebote besser zu planen und auf die Anforderungen der Wissenschaftlerinnen und

Wissenschaftler bestmöglich einzugehen. Das Standardisieren und Zentralisieren von Infrastruktur am wissenschaftlichen Rechenzentrum entlastet den Wissenschaftler von administrativen Aufgaben, die beim Betreiben einer eigenen Infrastruktur zwangsläufig erforderlich sind. Auf Basis dieser Infrastruktur ist es möglich, virtualisierte Forschungsumgebungen zu betreiben, die speziell auf die unterschiedlichen Anforderungen der wissenschaftlichen Arbeitsgruppen ausgelegt sind. Die Bereitstellung der Ressourcen muss dabei flexibel und zeitnah erfolgen.

Um die notwendigen Entwicklungen gemeinsam durch Wissenschaft und Infrastruktur an Rechenzentren voranzutreiben, wurde das Projekt "ViCE - Virtual Open Collaboration Environment" ins Leben gerufen. Es entwickelt nachhaltige Geschäfts- und Steuerungsmodelle für die Kooperation von unterschiedlichsten Fach-Communities mit Rechenzentren auf Basis von VFUs, die dem dynamischen Charakter der Wissenschaften und ihren wechselnden Anforderungen angepasst sind. Es schafft hierzu eine RZ-übergreifende Kollaborations- und Austauschplattform für virtualisierte Forschungsumgebungen, die versioniert, annotiert und geteilt werden können. Die Beschreibung der enthaltenen Tools und Workflows erlaubt die einfache Nachnutzung für neue Forschungsfragenstellungen, eine schnelle Einbindung des wissenschaftlichen Nachwuchses und den Einsatz in der Lehre. Notwendige Basisinfrastrukturen der Rechenzentren werden so aufbereitet, dass sie abstrakt von verschiedenen Disziplinen einfach und ohne Startverzögerung eingebunden und verwendet werden können. Hierzu wird Know-How aufgebaut, das die Wissenschaft in ihren Bedürfnissen unterstützt und eine einfache Ausdehnung auf weitere Communities erlaubt. Die Situation ist in Abbildung 1 dargestellt.

Schrittweise entstehen Best-Practices für den Betrieb von VFUs, die die Grundlagen für

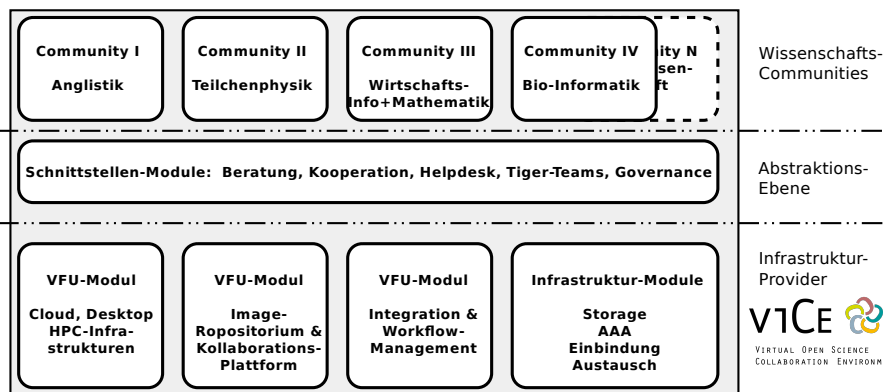


Abb. 1: ViCE sucht gemeinsam mit Infrastruktur-Providern und Wissenschafts-Communities nach einer guten Aufgabenverteilung in Nutzung und Betrieb aktueller Forschungsinfrastrukturen.

einen Austausch innerhalb und zwischen Standorten erlauben und perspektivisch in gemeinsamen Standards für die teilnehmenden IT-Zentren beziehungsweise deren Basisinfrastrukturen münden können. Diese orientieren sich an den Erfordernissen und Schnittstellen nationaler und internationaler Projekte und stellen so sicher, dass die Verschiebbarkeit auf breiter Ebene für weitere Fach-Communities nachnutzbar sind. Die Rekalibrierung der Aufgabenverteilung erlaubt es den Rechenzentren zentrale und skalierende

Infrastrukturen zu betreiben und entlastet gleichzeitig die Wissenschaftler vom Betrieb eigener Infrastrukturen.

3 Virtualisierte Forschungs-, Lern und Lehrumgebungen

Grundlegende Aufgabe beim Bereitstellen von VFUs ist eine flexible und schnelle Provisionierung von Infrastruktur-Ressourcen. Die bei der Bereitstellung entstehenden Herausforderungen gilt es zu lösen, um eine einheitliche Schnittstelle für die Ressourcenverwaltung zu etablieren. Dabei ist vor allem die Skalierung der Infrastruktur für bestehende Systeme eine Herausforderung, die durch neue Konzepte angegangen wird. Die sich schnell ändernden Anforderungen aus der Wissenschaft können sonst nicht adäquat beantwortet werden.

Abbildung 2 demonstriert, wie die Vereinheitlichung der Schnittstellen darauf aufbau-

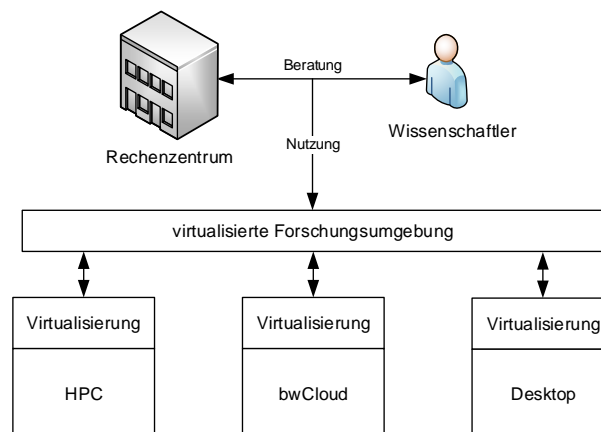


Abb. 2: Die virtualisierte Forschungsumgebung entsteht anfangs auf dem Desktop wird dort getestet und initial simuliert. Zur besseren Skalierung kann sie je nach Ressourcenprofil auf das Hybrid-Cluster (HPC) oder auf die bwCloud zur Berechnung verschoben werden.

ende virtualisierte Forschungsumgebungen erlaubt. Das Beispiel zeigt eine HPC- und Cloud-Ressource eines Rechenzentrums. Auf beiden Umgebungen wird die OpenStack-Virtualisierungsplattform aufgesetzt, die eine OpenStack-API als Schnittstelle bereitstellt. Auch wenn die beiden Ressourcen im Wesentlichen unterschiedliche Anforderungen abbilden und unterschiedliche Betriebskonzepte aufweisen, sind sie aus Sicht der VFU homogen und ermöglichen einen einfachen Wechsel zwischen den Ressourcen ohne aufwändige Schnittstellen-Anpassungen. Ergänzt wird die HPC- und Cloud-Ressource um eine Desktop-Virtualisierung, um dem Wissenschaftler das Arbeiten in speziell angepassten, virtualisierten Desktop-Umgebungen am Arbeitsplatz zu ermöglichen. Wird eine wissenschaftliche Forschungsumgebung von Beginn an virtualisiert aufgesetzt, ist sie nicht abhängig von der darunterliegenden Hardware. Ein späteres Verschieben der Umgebung auf eine neue Virtualisierungsplattform wird somit erleichtert.

bwCloud: Das Landesprojekt bwCloud⁴ betreibt eine Infrastruktur-Cloud (IaaS) auf Basis von OpenStack für Wissenschaftler und Studierende. Das Betriebskonzept umfasst eine standortübergreifende Cloud-Plattform, die es den Benutzern erlaubt, virtuelle Maschinen selbst zu provisionieren. Dies ermöglicht es im Rahmen von Forschung und Lehre die benötigten Ressourcen zeitnah zur Verfügung zu stellen. Die dafür notwendige Hardware wird von den Projektpartnern im Verbund an mehreren Rechenzentren betrieben [DSS15].

bwHPC: Für rechenintensive VFUs sind die Ressourcen einer Cloud-Umgebung nicht immer ausreichend. Rechencluster aus dem High Performance Computing (HPC) stellen die nächste Skalierungsstufe dar und sind für diese Fragestellungen ausgelegt. Den Wissenschaftlern in Baden-Württemberg stehen im Rahmen des bwHPC-Konzepts hochmoderne HPC-Systeme aller Leistungsklassen zur Verfügung [HWC13]. Das vom Rechenzentrum der Universität Freiburg entwickelte neuartige Hybrid-Cluster-Konzept⁵ ermöglicht es, in virtuellen Maschinen auf einem HPC-System zu rechnen. Dies ermöglicht VFUs auf einem HPC-Cluster auszuführen ohne die darunterliegende Hardware des HPC-Systems zu partitionieren [Me16].

bwLehrpool: Die durch bwLehrpool⁶ angebotene Desktop-Virtualisierung kombiniert auf Grundlage eines einzigen Basissystems ein flexibles Angebot verschiedenster Betriebssystemumgebungen mit einer einfachen Administrierbarkeit großer PC-Landschaften [Tr15]. Labor-, Lehr- und Lernumgebungen müssen auf diese Weise nicht mehr auf den Arbeitsplatzrechnern installiert sein, was den Wartungsaufwand der IT-Administratoren erheblich reduziert sowie Lehrenden und Forschenden vollkommen neue Gestaltungsmöglichkeiten der Lehre einräumt. Sie können Arbeitsumgebungen in einem weiten Spektrum selbst gestalten und aufgrund der Abstraktion des Systems sogar einrichtungsübergreifend austauschen. Das erlaubt Hochschulen, auf aktuelle Entwicklungen schnell zu reagieren, eine deutlich flexiblere Nutzung ihrer vorhandenen Ressourcen zu erreichen und die zentralen IT-Dienste von repetitiven Standardaufgaben zu entlasten.

3.1 VFU Anwendungsfall Experimentelle Teilchenphysik

Aktuelle sowie zukünftige Experimente der Hochenergiephysik (High Energy Physics - HEP) generieren enorme Datenmengen. Um diese Daten in angemessener Zeit zu speichern, zu verarbeiten und zu analysieren, sind viele Rechenressourcen notwendig. Zusätzlich zu den aufgezeichneten Daten sind Monte-Carlo-Simulationen in gleichem Umfang erforderlich, um die Beobachtungen aus dem Teilchenbeschleuniger mit theoretischen Modellen zu vergleichen.

In der Vergangenheit wurde die benötigte Rechenleistung von speziellen HEP-Clustern bereitgestellt. Die jeweils benötigten Betriebs- und Softwareumgebungen konnten auf den Clustern ohne Probleme installiert werden, da diese exklusiv zur Verfügung standen. Die

⁴ bwCloud Projektwebseite: <http://www.bw-cloud.org> [letzter Aufruf 11.1.2017]

⁵ Das Konzept des Hybrid-Clusters wurde erstmals als Poster auf dem 2. bwHPC Symposium 2015 in Ulm vorgestellt; Autoren: Konrad Meier, Michael Janczyk, Dirk von Suchodoletz, Bernd Wiebelt; <http://www.uni-ulm.de/index.php?id=69869> [letzter Aufruf 17.5.2016]

⁶ bwLehrpool Projektwebseite: <https://www.bwlehrpool.de> [letzter Aufruf 11.1.2017]

Rechenaufgaben wurden aufgrund ihrer Unabhängigkeit in kleine Compute-Jobs aufgeteilt und gleichmäßig auf die HEP-Cluster verteilt. Eine gleichzeitige Ausführung oder eine Interprozesskommunikation (IPC) war nicht erforderlich. Durch die lose Koppelung der Compute-Jobs gehören sie somit zum High Throughput Computing (HTC). Die HEP-Cluster wurden dementsprechend mit geeigneten Schedulingern und Infrastrukturen betrieben, um diese Compute-Jobs effizient zu verarbeiten.

Demgegenüber stehen Forschungs- und Universalcluster, die eine größere Nutzergruppe haben und damit andere Anforderungen bedienen müssen. Diese Cluster müssen Compute-Jobs ausführen, die auf mehreren Rechenknoten parallel laufen und damit einen Cluster-Interconnect mit geringer Latenz für die Interprozesskommunikation benötigen. Diese Cluster zählen zur Klasse des High Performance Computings (HPC). Auch die Betriebssystem- und Softwarekonfiguration unterscheiden sich teilweise deutlich. Sie sind darauf optimiert, die spezialisierte Hardware für die Interprozesskommunikation möglichst optimal zu unterstützen. So werden beispielsweise spezielle Compiler und Bibliotheken für das HPC-Cluster angeboten. Im Gegensatz dazu benötigen die meisten HEP-Experimente eine genau definierte Softwareumgebung inklusive Betriebssystem und Software aus einem zentralen Software-Repository. Nur so kann die Vergleichbarkeit der Ergebnisse garantiert werden, die auf unterschiedlichen Clustern berechnet werden. Darüber hinaus wird die HEP-Softwareumgebung in regelmäßigen Abständen aktualisiert und muss zeitnah auf den Clustern verfügbar sein. Das kann auf Clustern, die nicht dediziert von der HEP-Community administriert werden, nicht gewährleistet werden.

Diese Ausgangssituation macht es für HEP-Anwender schwierig, die Ressourcen von HPC-Clustern zu verwenden. Da diese Cluster jedoch einen signifikanten Anteil zu den benötigten Rechenressourcen beitragen können, wurde ein Betriebskonzept entwickelt, das es erlaubt VFUs auf einem HPC-System zu starten. Die Ressourcen stehen hier mehreren wissenschaftlichen Fachbereichen und damit nicht exklusiv einem Forschungsschwerpunkt zur Verfügung.

Der entwickelte Ablauf ist in Abbildung 3 dargestellt und zeigt wie die VFU basierend auf dem Hybrid-Cluster-Konzept umgesetzt wurde. Dabei übermitteln die Wissenschaftler ihre Compute-Jobs wie gewohnt an HTCondor. Daraufhin skaliert der Resource-Broker ROCED bedarfsabhängig und automatisiert die virtualisierten Forschungsumgebungen. HTCondor ist dabei ein Scheduling-System, das Priorisierung sowie Ressourcen-Monitoring und -Management erlaubt. ROCED (Rapid On-Demand Cloud-enabled Deployment) wird wiederum verwendet, um HTCondor zu überwachen um je nach Ressourcenbedarf dynamisch virtuelle Maschinen zu starten oder zu stoppen.

Das Setup zeigt eine Möglichkeit wie spezielle Softwareumgebungen auf einem HPC-System ausgeführt werden können und wie die Aufgabenverteilung zwischen Wissenschaftlern und Rechenzentren in der Praxis aussehen können. Das Bereitstellen der virtualisierten Infrastruktur (Hybrid-Cluster NEMO) wird vom Rechenzentrum übernommen. Die VFU wird vom Wissenschaftler erzeugt und nutzt die vom Rechenzentrum bereitgestellten Ressourcen. Im Fall der Teilchenphysik handelt es sich dabei um eine komplexe VFU die unterschiedliche Ressourcen gleichzeitig verwendet. So laufen rechenintensive virtuel-

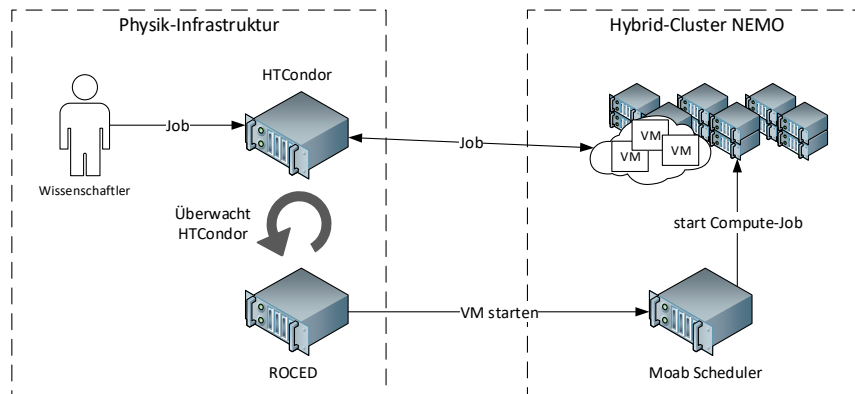


Abb. 3: Forscher übermittelt wie gewohnt seine Jobs. Ein Ressource-Broker skaliert dabei bedarfsorientiert das Hybrid-Cluster.

le Maschinen auf dem Hybrid-Cluster während die für die Umgebung benötigten Dienste (HTCondor und ROCED) auf der bwCloud-Infrastruktur ausgeführt werden.

3.2 VFU Anwendungsfall Bioinformatik

Der Anwendungsfall Bioinformatik zeichnet sich durch seine Heterogenität sowohl im Bezug auf die verwendete Software, als auch den technischen Ressourcenbedarf aus. Bedingt durch die junge Historie dieses Bereiches und der rasanten Erschließung neuer Anwendungsfelder, ermöglicht durch die enorme Entwicklung der letzten Jahre sowohl im Bereich der Rechenleistung als auch der Messgeräte, ist eine Konsolidierung der verwendeten Software, Algorithmen und Standards in naher Zukunft nicht zu erwarten. Fortwährend werden neue Tools und Standards veröffentlicht und es ist eine zunehmende Herausforderung, den produktiven Zugang sowie die transparente und reproduzierbare wissenschaftliche Arbeit zu ermöglichen.

Anhand der Galaxy-Plattform wird in dieser vielfältigen Softwarelandschaft der Bioinformatik eine Infrastruktur aufgebaut, die für den Nutzer das Handling auf Seiten der Software enorm verbessert. Darüber hinaus werden über Virtualisierung und Containerisierung zusätzlich auch die Hardware-Abhängigkeiten auf ein Minimum reduziert. Dadurch ist es möglich, Wissenschaftlern perfekt abgestimmte, virtualisierte Forschungsumgebungen anzubieten, welche sowohl auf Desktop als auch Cloud und HPC laufen [Af16].

Hierzu wurden zusammen mit der Bioinformatik-Community Bestrebungen vorwärts gebracht, verfügbare und zukünftige Software in einer Paketverwaltung (Conda) einzugliedern. Diese läuft im Userspace und erlaubt es, automatisiert, transparent und reproduzierbar vorkompilierte Pakete zu erstellen, welche sich in einem weiteren automatisierten Schritt zusätzlich in verschiedene Container-Formate übersetzen lassen. Dies macht sowohl eine Versionierung, als auch einen Austausch von Forschungsdaten inklusive deren

Reproduzierung und die automatische Erfassung von Metadaten bezüglich eines verwendeten Workflows und dessen Tools besonders einfach.

Die Galaxy-Plattform ist ein auf Unix-Maschinen lauffähiges Software-Framework für das Management von wissenschaftlichen Workflows und Pipelines, für die Datenverarbeitung und für die Durchführung von Rechenjobs. Motiviert insbesondere durch die technischen Probleme, die mit dem Next Generation Sequencing (NGS) und der damit einhergehenden High-Throughput-Datenerzeugung aufkommen, ist es das Ziel, aus den großen Datenmengen möglichst viel wissenschaftliche Information zu gewinnen. Dies bedarf komplexer statistischer und algorithmischer Methoden, die nur aufgrund großer zur Verfügung stehender Rechenleistung realistisch geworden sind. Das führt zwangsweise zu Problemen in biologischen Fachbereichen, da hierdurch Wissenschaftler ohne einen informationstechnischen Hintergrund auf hochkomplexe computergestützte Analysen angewiesen sind. Das seit 2005 bestehende Galaxy-Projekt nutzt ein einfach zugängliches Webinterface, um unabhängig vom IT-Hintergrund jedem Zugang zu umfangreichen Tools und den benötigten technischen Ressourcen zu ermöglichen, um komplexe Analysen durchzuführen.

Im Bereich der Bioinformatik wird seit vier Jahren eine fortwährend wachsende Galaxy-Instanz betrieben, wodurch nicht nur die für die Wissenschaftler notwendige Hard- und Software verfügbar gemacht wird, sondern auch umfangreiche Metadaten über die technischen Anforderungen gesammelt werden können. Job-Logs mit detaillierter Aufzeichnung von Job-Metriken wie dem Speicherbedarf, der CPU-Leistung und der Laufzeit erlauben eine umfangreiche Analyse des Bedarfs sowie des Optimierungspotentials. Durch stetig wachsende Nutzerzahlen, Datenmengen und wachsender Komplexität der Software zeigen sich hierdurch auch Grenzen des bisherigen Setups, welches auf einem eigenen Cluster der Bioinformatik in Freiburg läuft und über die Sun Grid Engine (SGE) angesprochen wird.

Aufgrund von wachsender Nachfrage und der angestrebten Nutzung, den bisher auf Freiburg und Umgebung beschränkten Dienst national und international zu öffnen, ist eine flexible Nutzung bereitgestellter Ressourcen notwendig. Dies ermöglicht es, auch auf zukünftige Veränderungen reagieren zu können und mit dem Dienst weiter zu skalieren.

In Abbildung 4 ist das entwickelte Setup der Freiburger Galaxy-Installation zu sehen. Zusätzlich zum bisherigen Cluster der Bioinformatik können nun über HTCondor Rechenjobs verwaltet werden, um sie unter anderem auf dem Hybrid-Cluster NEMO oder auf Compute-Clouds wie bwCloud oder de.NBI-Cloud zu starten. Dies erlaubt ein Setup, das weitgehend unabhängig von der zugrundeliegenden Hardware-Infrastruktur ist. Dadurch können grundsätzlich auch weitere und kommerzielle Anbieter genutzt werden (Eucalyptus, OpenNebula, OpenStack, Amazon EC2, etc.). Anhand der in Galaxy gesammelten Job-Metriken wurden Anwendungsprofile erstellt, die Berechnungen automatisch auf geeignete Hardware routen. Für die Nutzer ändert sich dadurch nichts. Sie können weiterhin mit dem Webfrontend arbeiten, das sie auch von einer lokalen Galaxy-Instanz auf dem Desktop kennen. Die Verwaltung der Tools in einem Paketmanager und die Virtualisierung oder Containerisierung stellt sicher, dass das wissenschaftliche Arbeiten flexibel auf jeglicher Hardware transparent und mit reproduzierbaren Ergebnissen durchgeführt werden kann. Der Erfolg zeigt, dass das Konzept beim Nutzer ankommt: Galaxy wächst

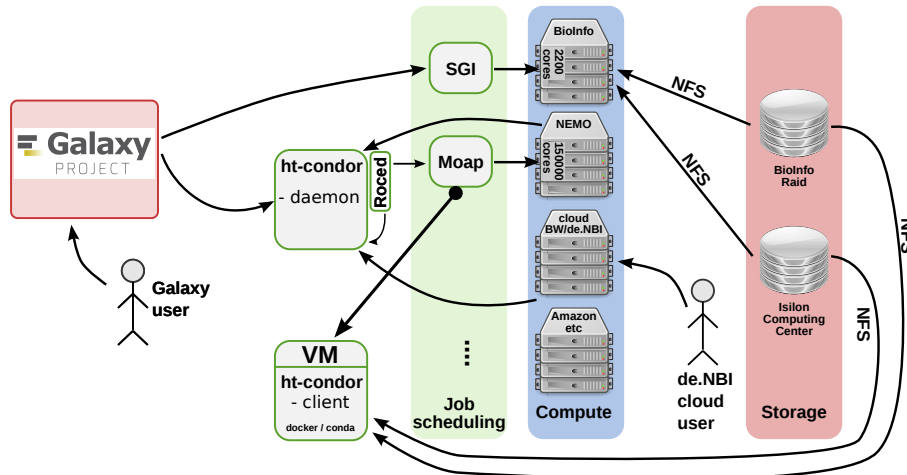


Abb. 4: Die Freiburger Galaxy-Instanz entscheidet je nach Workflow, ob eine Berechnung auf dem Bioinformatik-Cluster (SGI) oder in der Bioinformatik-VFU erfolgen soll.

stetig in Freiburg und wird als zentrale virtualisierte Forschungsumgebung für mittlerweile über 400 Wissenschaftler angeboten.

4 Fazit

Eine zukünftige IT-Strategie moderner Hochschulrechenzentren konzentriert sich neben der Grundversorgung auf notwendige Forschungsinfrastrukturen. Da diese einerseits von "Economies of Scale"-Effekten profitieren und damit andererseits eine attraktive Vielfalt an Diensten angeboten werden kann, bieten sich hier kooperative Ansätze an. Virtualisierte Forschungsumgebungen helfen dabei die Ortsabhängigkeit aufzulösen und gemeinschaftlich zentrale Dienste anzubieten. Mit dieser Sichtweise erlauben Virtualisierung und Compute-Clouds eine neue Aufteilung der Aufgaben zwischen Wissenschaftlern, Instituts-IT und dem Rechenzentrum. Das Rechenzentrum stellt notwendige Basis- und Forschungsinfrastrukturen, angefangen vom Netz bis zu hochwertigen Storage-, Servervirtualisierungs- und HPC-Diensten. Auf Basis dieser können Forschende ihre eigenen Umgebungen und Methoden frei realisieren. Sie werden dabei zusätzlich durch Angebote zu automatischem Backup und Beratung zum Forschungsdatenmanagement unterstützt.

Der Übergang vom klassischen wissenschaftlichen Rechenzentrum der 1990er zu einem Rechenzentrum für die Wissenschaft kann oft nicht aus den vorhandenen Ressourcen gestemmt werden. Um solche Angebote erfolgreich weiterentwickeln zu können, muss sich ein Rechenzentrum auch an Forschungs- und Infrastrukturbegleitprojekten beteiligen. Diese Neuausrichtung ist längst nicht abgeschlossen und wird anhalten, so lange es gesellschaftliche, politische, hochschulspezifische und technische Veränderungsprozesse gibt.

Rechenzentren müssen sich diesen Herausforderungen stellen und Weiterentwicklungen meistern: "Ohne ständige Innovationen an einem IZ/RZ wird es obsolet"⁷.

Literaturverzeichnis

- [Af16] Afgan, Enis; Baker, Dannon; van den Beek, Marius; Blankenberg, Daniel; Bouvier, Dave; Čech, Martin; Chilton, John; Clements, Dave; Coraor, Nate; Eberhard, Carl; Grüning, Björn; Guerler, Aysam; Hillman-Jackson, Jennifer; Von Kuster, Greg; Rasche, Eric; Soranzo, Nicola; Turaga, Nitesh; Taylor, James; Nekrutenko, Anton; Goecks, Jeremy: The Galaxy platform for accessible, reproducible and collaborative biomedical analyses: 2016 update. *Nucleic Acids Research*, 44(W1):W3–W10, 2016.
- [Bu14] Buddenbohm, Stefan; Enke, Harry; Hofmann, Matthias; Klar, Jochen; Neuroth, Heike; Schwiigelshohn, Uwe: A life cycle model für collaborative research environments. In (Müller, Paul; Neumair, Bernhard; Reiser, Helmut; Rodosek, Gabi Dreo, Hrsg.): 7. DFN-Forum - Kommunikationstechnologien, 16.-17. Juni 2014, Fulda, Germany. Jgg. 231 in LNI. GI, S. 1–10, 2014.
- [DSS15] Dulov, Oleg; Scheibenberger, Klaus; Schulz, Janne Chr.: bwCloud - Standortübergreifende Servervirtualisierung. *SCC-News*, 01/2015, 2015.
- [Eu] European Commission: EINFRA-9-2015 - e-Infrastructures for virtual research environments (VRE). http://cordis.europa.eu/programme/rcn/664625_en.html. Letzter Aufruf: 11.1.2017.
- [HWC13] Hartenstein, Hannes; Walter, Thomas; Castellaz, Peter: Aktuelle Umsetzungskonzepte der Universitäten des Landes Baden-Württemberg für Hochleistungsrechnen und datenintensive Dienste. *Praxis der Informationsverarbeitung und Kommunikation*, 36(2):99–108, 2013.
- [Me16] Meier, Konrad; Fleig, Georg; Hauth, Thomas; Janczyk, Michael; Quast, Günther; von Suchodoletz, Dirk; Wiebelt, Bernd: Dynamic provisioning of a HEP computing infrastructure on a shared hybrid HPC system. *Journal of Physics: Conference Series*, 762(1):012012, 2016.
- [Ri16] Ritter, Steffen; Trahasch, Stephan; Slotosch, Sven; von Suchodoletz, Dirk; Münchenberg, Jan: bwLehrpool: Durchführung von elektronischen Prüfungen in virtualisierten Umgebungen. In (Lucke, Ulrike; Schwill, Andreas; Zender, Raphael, Hrsg.): DeLFI 2016 - Die 14. E-Learning Fachtagung Informatik, 11.-14. September 2016, Potsdam. Jgg. P-262 in LNI. GI, S. 149–154, 2016.
- [Sc15] Schwarzkopf, R.: Virtual machine lifecycle management in grid and cloud computing. *Philipps-Universität*, 2015.
- [Tr15] Trahasch, Stephan; von Suchodoletz, Dirk; Münchenberg, Jan; Rettberg, Simon; Rößler, Christian: bwLehrpool: Plattform für die effiziente Bereitstellung von Lehr- und Klausurumgebungen. In (Pongratz, Hans; Keil, Reinhard, Hrsg.): DeLFI 2015 - Die 13. e-Learning Fachtagung Informatik der Gesellschaft für Informatik e.V. (GI), München, 1.-4. September 2015. Jgg. 247 in LNI. GI, S. 291–297, 2015.

⁷ Stefan Wesner, Keynote auf der 17. ZKI-Herbsttagung, https://www.uni-ulm.de/fileadmin/website_uni_ulm/zkiherbst2016/presentationen/dienstag/wesner_gestaltung_von_innovationsprozessen_an_rechen_und_informati_onszentren.pdf, S. 41