

Ernst T., Hoheisel A., Unger S.¹

Komplexe interaktive Workflows im Fraunhofer Resource Grid

Zusammenfassung: Die Fraunhofer-Gesellschaft betreibt seit 2002 ein mehrere Institute und Standorte überspannendes Computing-Grid, das auf der Globus-Standardmiddleware sowie als Eigenentwicklungen entstandenen höheren Middleware-Schichten und Diensten basiert und den Zugriff auf derzeit über 300 CPUs ermöglicht. Das Fraunhofer Resource Grid (FhRG) funktioniert auf der Basis eines innovativen Komponentenmodells, das es erlaubt, existierende (Legacy-)Anwendungen unmodifiziert ins Grid zu integrieren und daraus mit geringem Aufwand komplexe, verteilte Workflows zu konstruieren, die grafisch mit Petrinetzen beschrieben werden. Die FhRG-Infrastruktur verteilt die „atomaren Jobs“ auf der Basis von Ressourcenbeschreibungen auf die jeweils geeignetste Hard- und Softwareumgebung und entlastet somit den Anwender vollständig von Details der Ausführung. Im FhRG laufen komplexe Simulationsanwendungen wie das von FIRST realisierte Umweltrisikoaanalyse- und Managementsystem ERAMAS. Der Zugriff auf die im FhRG vorgehaltenen Anwendungen ist über ein Grid-Portal bequem von jedem Webbrowser aus möglich. Die Unterstützung der gridbasierten Nutzung interaktiver Applikationen stellt eine Hauptrichtung der derzeitigen Weiterentwicklung der Plattform dar. Mit diesem Leistungsmerkmal wird es möglich, auch Software mit eigener grafischer Oberfläche, wie sie gerade in industriellen Entwurfsprozessen von zentraler Bedeutung ist, auf einfache Weise ins Grid zu integrieren und webbasiert zu nutzen.

1. Die Fraunhofer Resource Grid Plattform

Das Fraunhofer Resource Grid [2] ist eine Grid-Computing-Initiative mehrerer Fraunhofer-Institute in Zusammenarbeit mit Industriepartnern. Dem Grid-Computing liegt der Gedanke zugrunde, dass über das Internet überall und jederzeit Rechenleistung gegen ein Entgelt zur Verfügung stehen soll, ähnlich wie bei einem Stromnetz („electric power grid“), bei dem sich elektrische Leistung einfach über eine standardisierte Steckdose abgreifen lässt [1]. Ziel des Fraunhofer Resource Grid ist es, umfassende Rechenleistung und zahlreiche Anwendungen für Unternehmen bereitzustellen, die Bedarf an rechenintensiven Großanwendungen im Bereich der Computersimulationen haben. Die Computing-Grid-Technologien erlauben einen einheitlichen und zuverlässigen Zugriff auf verteilte Rechenressourcen, Datenspeicher und andere Ressourcen. Die Grid-Middleware bietet dem Nutzer den Zugriff auf die notwendigen Systemressourcen, ohne dass sich dieser um die technischen Details der koordinierten Nutzung selbst kümmern muss. Ausgehend von den durch das Global Grid Forum geschaffenen Standards, die im Globus-Toolkit [6] implementiert sind, werden Middleware-Komponenten geschaffen, welche die Wechselwirkung von Software mit den Grid-Diensten vereinfachen und dem Benutzer eine leicht zu bedienende Schnittstelle zur Steuerung von Anwendungen und Diensten im Grid-Umfeld bieten.

¹ Fraunhofer-Institut für Rechnerarchitektur und Softwaretechnik, Kekuléstr. 7, D-12489 Berlin
{Thilo.Ernst, Andreas.Hoheisel, Steffen.Unger}@first.fraunhofer.de

2. Grid-Integration von Legacy-Anwendungen

Der praktische Nutzen einer Integrationsplattform wird sehr stark von der Einstiegsschwelle bestimmt, die sowohl aktive Nutzer, wie zum Beispiel Entwickler und Integratoren als auch passive Nutzer (Endanwender) zu überwinden haben, um von den Diensten der Plattform profitieren zu können. Die Kernelemente der Konzeption des FhRG wurden deshalb darauf ausgerichtet, diese Einstiegsschwelle zu minimieren, um so langfristig zu einer echten Breitenanwendung von Grid-Technologien in Forschung und Industrie beizutragen. Das Komponentenmodell des FhRG erlaubt es, Kommandozeilenprogramme ohne interne Modifikation ins Grid zu integrieren. Diese Klasse von Applikationen ist gerade im Bereich des wissenschaftlichen und ingenieurtechnischen Rechnens häufig anzutreffen. Den bei derartigen Programmen vorhandenen Datei- und Kommandozeilenschnittstellen wird dabei plattformseitig kein substantiell andersartiger Rahmenmechanismus (z.B. CORBA-Schnittstellen [7]) entgegengestellt – was in jedem Einzelfall erheblichen Anpassungsaufwand zur Folge hätte. Stattdessen werden diese existierenden Schnittstellen als Grundlage der Komponentenkopplung formalisiert, und die Grid-Infrastruktur organisiert auf ebendieser Basis die Details der Kopplung mehrerer Komponenten. Im Gegensatz zum Mainstream der wissenschaftlichen Grid-Community, der stärker auf das Hochleistungsrechnen fokussiert ist, handelt es sich also um ein grob-granulares Komponentenmodell für lose gekoppelte Komponenten, das für eine einfache, breite Anwendbarkeit und weniger für hohe Effizienz bei eng gekoppelten, parallelisierten Anwendungen optimiert ist. Applikationen mit letzterem Bedarf können jedoch ebenfalls integriert werden – sie erscheinen dann als parallele Komponenten, die *intern* z.B. MPI zur Kommunikation zwischen mehreren verteilten Prozessen verwenden aber im Komponentenmodell als einzelner „atomarer Job“ betrachtet werden. Üblicherweise muss zur „Erfüllung“ des Komponentenmodells nur ein einfaches Shellscript geliefert werden; die ursprüngliche Anwendung wird dann zusammen mit diesem Script und einer Beschreibungsdatei als tar.gz-Archiv verpackt und auf einem Grid-Knoten abgelegt. Die FhRG-Infrastruktur [2,8,9,10] installiert das Komponentenpaket automatisch, wenn es auf einem der verfügbaren Knoten im Grid ausgeführt werden soll. Die verteilte Ausführung wird durch den Grid Job Handler gesteuert, wobei entsprechend des Datenflusses nötige Dateitransfers automatisch erfolgen. Neben der Beschreibung des reinen Schnittstellenverhaltens müssen zu jeder Komponente (Software-Ressource) auch die Abhängigkeiten zu anderen Ressourcen (Software, Hardware, Daten, Services) spezifiziert werden – analog zur Abhängigkeitsverwaltung in Paketmanagementsystemen wie RPM. Die genannten Beschreibungen werden in XML-basierten Sprachen abgefasst und können bequem online mittels einer Web-Schnittstelle im FhRG-Portal erzeugt werden.

3. Komplexe Workflows

Bei einem „atomaren Job“ handelt es sich um die kleinste auf dem Grid ausführbare Einheit die im Komponentenmodell eine nicht weiter teilbare Komponente darstellt. Ein atomarer Job beinhaltet zum Beispiel die Ausführung eines Kommandozeilenprogramms welches mehrere Eingabedateien liest, bearbeitet und die Ergebnisse in Ausgabedateien speichert. Mehrere dieser atomaren Jobs können nun zu einem so genannten „Grid-Job“ zusammengefügt werden. Jeder Grid-Job besteht im Wesentlichen aus einem Workflow und den dazu gehörenden Abhängigkeiten, welche die automatische und zeitlich abgestimmte Abarbeitung einer Vielzahl atomarer Jobs ermöglicht.

Zur Beschreibung von komplexen Abläufen, bei denen mehrere „atomare Jobs“ verteilt im Grid ausgeführt werden sollen und dabei der Daten- und Kontrollfluss zu organisieren ist, werden im FhRG Petrinetze [11] verwendet. Gegenüber anderen in der breiteren Grid-Community verwendeten Formalismen haben diese den Vorteil, auch Verzweigungen und Wiederholungen darstellen zu können; trotzdem sind sie intuitiv gut verständlich – was im FhRG noch durch grafische Werkzeuge zur Erstellung und zur Überwachung von Workflows unterstützt wird. Die FhRG-Workflow-Unterstützung wurde bereits erfolgreich zur Realisierung komplexer Grid-Anwendungen wie dem Umweltrisikoaanalyse- und Managementsystem ERAMAS [3,4,5] eingesetzt.

Abb. 1 zeigt eine Desktop-Variante des Grid Job Handlers, der von Fraunhofer FIRST zur automatischen Abarbeitung von Workflows im FhRG entwickelt wurde. Die Transitionen (Quadrate) des dargestellten Petrinetzes sind mit atomaren Jobs verknüpft. Die Stellen (Kreise) repräsentieren die dazugehörigen Eingabe- bzw. Ausgabedateien. Abb. 2 zeigt eine geografische Darstellung eines Grid-Jobs, der über ganz Deutschland verteilt ist. Auf die verschiedenen Darstellungen kann jeweils zu Laufzeit eines Grid-Jobs über das FhRG-Portal zugegriffen werden.

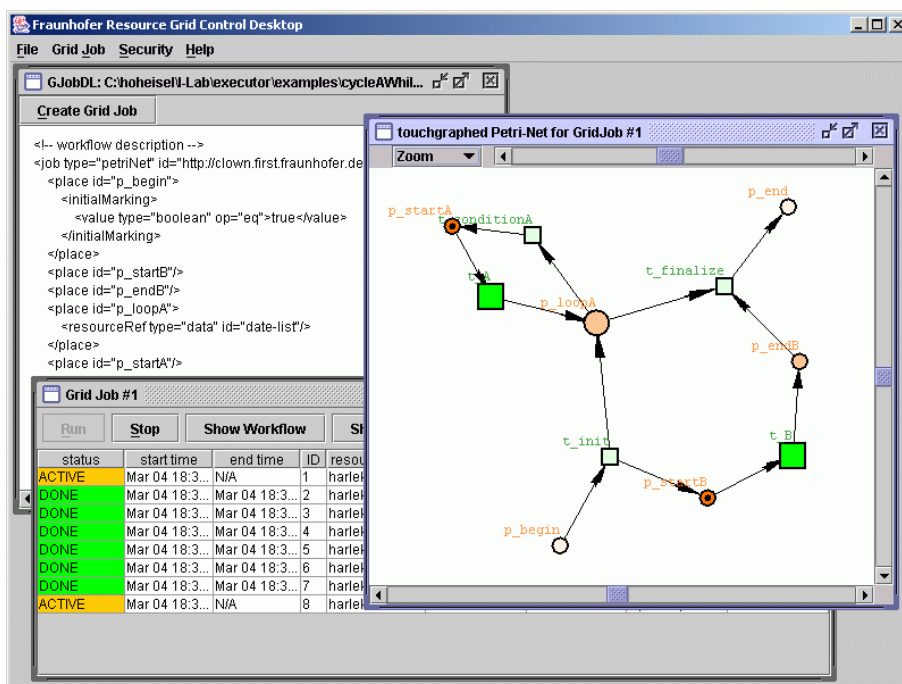


Abb. 1: Der Grid Job Handler des FhRG dient zur Abarbeitung komplexer Workflows in einer Grid-Umgebung. Auf der rechten Seite ist ein Grid-Job als Petrinetz abgebildet. Links oben sieht man einen Ausschnitt aus der dazugehörigen XML-basierten Grid Job Beschreibungssprache (GjobDL [8]). Im Fenster links unten sind die entsprechenden „atomaren Jobs“ mit den Ausführungsparametern aufgelistet.

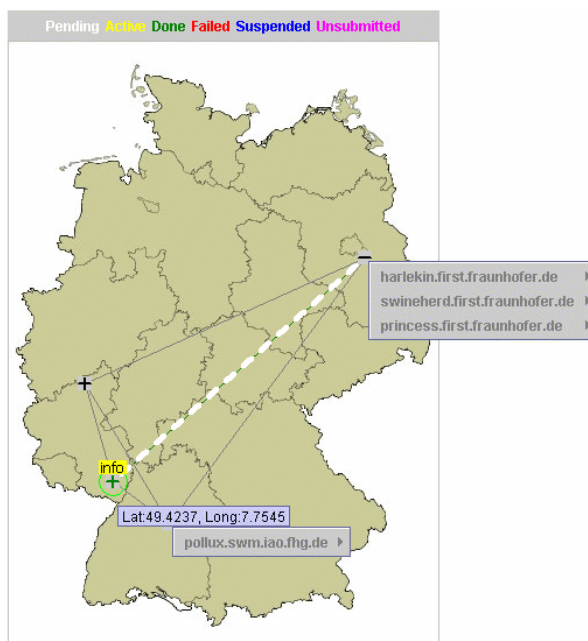


Abb. 2: Geografische Darstellung eines Grid-Jobs, der verteilt über mehrere Fraunhofer Institute in ganz Deutschland ausgeführt wird

4. Interaktive Grid-Applikationen für technische Entwurfsprozesse

Gerade zur Unterstützung von Entwurfsprozessen ist es nötig, komplexe Arbeitsabläufe zu unterstützen, innerhalb welcher verschiedene Nutzer an unterschiedlichen Standorten mit einer ganzen Reihe von Anwendungen arbeiten, wobei Daten geordnet zwischen den Arbeitsschritten übergeben werden müssen. Die FhRG-Infrastruktur bietet hervorragende Grundlagen, um derartige Prozesse zu unterstützen.

Ein wesentlicher, in intensiver Entwicklung befindlicher Baustein hierzu ist die Integration interaktiver Anwendungen. Die Herkunft des Grid-Computing-Konzepts aus dem wissenschaftlichen Hochleistungsrechnen bedingte bisher eine gewisse Überbetonung vom Rechenbedarf her anspruchsvoller, aber kaum interaktiver Probleme. Mittels angepasster *thin-client*-Konzepte ist jedoch jetzt ein *interaktives Grid* realisierbar, in das eine substantielle Klasse grafisch-interaktiver Anwendungen auf einfache Weise integriert werden kann und damit web-basiert nutzbar wird.

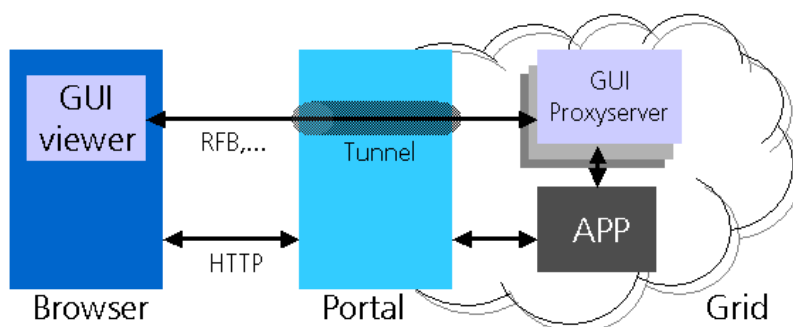


Abb. 3: Entfernte Nutzung von GUI-Applikationen über ein Grid-Portal

Abb. 3 zeigt eine hierfür geeignete Architektur, die z.B. auf der Basis der OpenSource-thin-client-Lösung VNC [12] implementiert werden kann. Im Einzelnen funktioniert dies wie folgt:

- Die X11-basierte GUI-Anwendung (APP) greift statt auf einen normalen X11-Server auf einen VNC-Server (GUI-Proxyserver) zu
- Der VNC-Server realisiert einen „virtuellen Desktop“
- Der Nutzer greift mittels eines vom Portal als Java-Applet angebotenen und so im Browser eingebetteten GUI-Viewers, der mit dem VNC-Server kommuniziert, auf seinen virtuellen Desktop zu
- Diese Kommunikation ermöglicht über das (von VNC genutzte) *remote frame buffer* Protokoll einerseits die (entfernte) Echtzeit-Darstellung des virtuellen Desktops , andererseits die Übertragung aller auf Klientenseite erzeugten GUI-Ereignisse (Mausbewegungen, Tastendrücker etc.)
- Damit der Lösungsansatz auch durch eine Firewall hindurch funktioniert, ist es nötig, die RFB-Kommunikation geeignet zu tunneln (entsprechende Techniken sind derzeit in Entwicklung).
- Die Grid-Infrastruktur muss um Funktionalitäten zur dynamischen Allokation von Proxy-Servern zu Nutzer-Sessions sowie zur Gewährleistung der Sicherheit interaktiver Sessions erweitert werden

Natürlich setzen Netzwerkbandbreiten und -latenzen dem Grad der mit diesem Lösungsansatz erreichbaren Interaktivität gewisse Grenzen. Experimente mit einer Prototypimplementierung im Rahmen des bei FIRST entwickelten gridbasierten Umweltrisiko- und Managementsystems ERAMAS zeigten jedoch, dass schon mit den heute allgemein verfügbaren Netzwerkbandbreiten eine gridbasiert-interaktive Nutzung einer breiten Klasse von Applikationen realistisch ist (siehe Abb. 4)

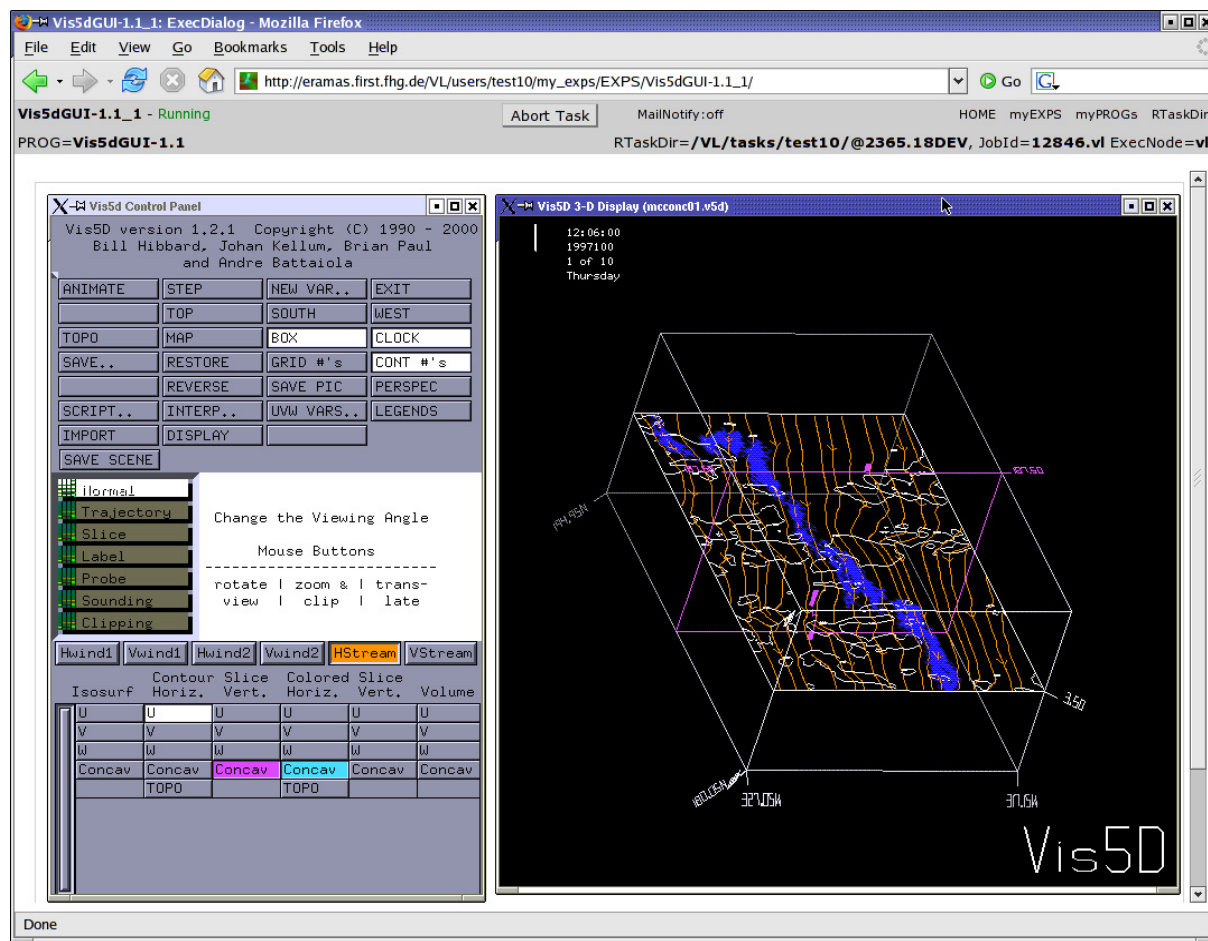


Abb. 4: Interaktive Nutzung des Visualisierungswerkzeugs vis5d via Portal und Browser

In naher Zukunft wird die beschriebene Vorgehensweise durch die allgemeine Leistungsentwicklung der IP-Netzwerkinfrastrukturen, aber auch durch neuartige Optimierungen auf Protokollebene für eine ganze Palette im technischen Entwurf genutzter interaktiver Softwarepakete eine realistische Option darstellen.

Damit eröffnet sich die Möglichkeit, Entwurfs-Arbeitsprozesse durchgehend grid-gestützt zu realisieren, wobei nur noch für einzelne Arbeitsschritte spezielle lokale Ressourcen benötigt werden (z.B. Hochleistungs-3D-Visualisierungssysteme). Dadurch werden ein wesentlich reibungsloserer Ablauf der genannten Arbeitsprozesse und – auch durch den Wegfall von Administrationsaufwänden – letztlich beträchtliche Kostensenkungseffekte möglich.

5. Anwendungen

In diesem Text wurden bereits einige Anwendungen des Workflow-Ansatzes des FhRG genannt, auf die im Folgenden kurz eingegangen werden soll. Insbesondere ist dabei das „Environmental Risk Analysis and Management System“ (ERAMAS) zu nennen, welches als rechnergestütztes Analyse- und Managementsystem schadstoffbedingter Umweltrisiken von Fraunhofer FIRST in Zusammenarbeit mit dem IBB Ingenieurbüro Beger für Umweltanalyse und Forschung sowie der Dresdner Grundwasser Consulting GmbH entwickelt wurde. ERAMAS ermöglicht die Prognose und Bewertung der Ausbreitung von kanzerogenen und chemisch-toxischen Schadstoffen in der

Atmosphäre, im Boden und im Grundwasser sowie der Exposition beim Menschen mit Hilfe hochwertiger Simulationsprogramme. Zur Realisierung von ERAMAS wird die Technologie des FhRG verwendet, die es ermöglicht, auf einfache Art und Weise die einzelnen, über das Internet verteilten Soft- und Hardwarekomponenten von ERAMAS zu koppeln (siehe Abb. 5). Weitere Informationen zu ERAMAS finden sie unter <http://www.first.fraunhofer.de/eramas>.

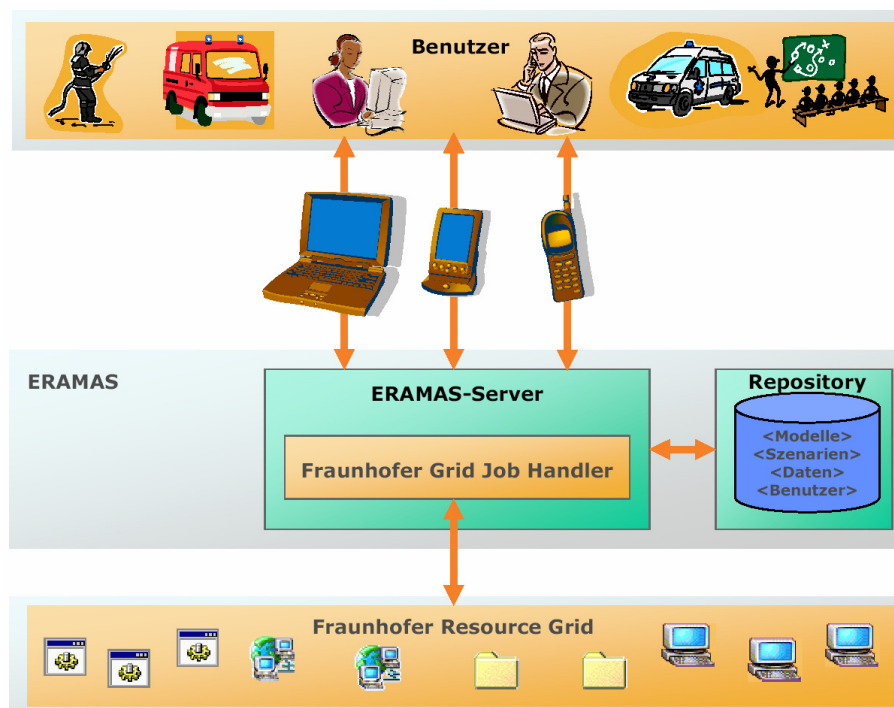


Abb. 5: Die ERAMAS-Architektur auf Basis des FhRG

Eine weitere Anwendung wurde bei Fraunhofer ITWM in Kaiserslautern entwickelt. Dabei handelt es sich um eine Mikrostruktursimulation zur Optimierung von porösen Strukturen, um zum Beispiel bessere Filtermaterialien zu konstruieren. Auf der Basis von Materialmodellen, die sich aus realen Aufnahmen ableiten (Computertomographie, Synchrotrondaten), lassen sich virtuelle Materialien konstruieren und deren Eigenschaften mit hohem Rechenaufwand bestimmen. Diese numerischen Experimente weisen wie ihre realen Gegenstücke Variationen auf, so dass auch hier immer mehrere Rechnungen notwendig sind, die auf dem FhRG sehr effektiv ausgeführt werden können.

Derzeit werden weitere Anwendungen auf das FhRG portiert, darunter auch der Fraunhofer Quanten-Computer Simulator, der im Rahmen des Projektes EIQU die Simulation effizient implementierbarer Quantenalgorithmen auf herkömmlichen Rechner-Clustern ermöglicht. Als entscheidendes Werkzeug wurde ein Quantensimulator entwickelt, der das parallele Rechnen eines Quantencomputers nachbildet. Dieser Simulator wird als Computing-Dienst im Fraunhofer Resource Grid angeboten (siehe <http://www.first.fraunhofer.de/eiqu>).

Auch wenn der Schwerpunkt der derzeitige Anwendungen im Bereich der Simulation liegt, ist die Architektur des FhRG prinzipiell für eine Vielzahl von Anwendungsdomänen einsetzbar, welche eine lose Kopplung von Komponenten erfordern.

Literatur

1. Foster, I., Kesselman, C.: The Grid: Blueprint for a New Computing Infrastructure. Morgan Kaufmann Publishers, Inc. 1999.
2. Fraunhofer Resource Grid homepage: <http://www.fhrg.fraunhofer.de> 2005.
3. Unger, S., Hoheisel, A., Beger, E., Beims, U.: ERAMAS: Analyse- und Managementsystem von schadstoffbedingten Umweltrisiken. Technische Überwachung Bd. 44, Nr. 6, ISSN 1434-9728, Springer-VDI-Verlag Düsseldorf, 2003.
4. Ernst, T., Hoheisel, A., Unger, S.: Grid-based Environmental Risk Analysis System. In: Pahl-Wostl, C., Schmidt, S., Rizzoli, A.E. and Jakeman, A.J. (eds), Complexity and Integrated Resources Management, Transactions of the 2nd Biennial Meeting of the International Environmental Modelling and Software Society, Manno, Switzerland, Volume 1, pp. 474-479, iEMSs, 2004.
5. ERAMAS homepage: <http://www.eras.de> 2005.
6. The Globus Project. <http://www.globus.org> 2005.
7. Object Management Group: Common Object Request Broker Architecture: Core Specification. http://www.omg.org/technology/documents/corba_spec_catalog.htm 2002.
8. Fraunhofer Resource Grid: XML schema of the Grid Job Definition Language: <http://www.fhrg.fhg.de/de/fhrg/schemas/gadl/gjdl.xsd> 2005.
9. Hoheisel, A., Der, U.: An XML-based Framework for Loosely Coupled Applications on Grid Environments, P.M.A. Sloot et al. (Eds.): ICCS 2003, LNCS 2657, 245–254, Springer-Verlag, 2004.
10. Hoheisel, A., Der, U.: Dynamic Workflows for Grid Applications, In: Proceedings of the Cracow Grid Workshop '03, Krakow 2003.
11. Petri, C. A.: Kommunikation mit Automaten. Ph.D. dissertation. Bonn 1962.
12. VNC project homepage. <http://www.realvnc.com> 2005.