



ZAM aktuell

Höchstleistungsrechner
Datenkommunikation
Kooperatives Computing
Mathematik

Sonderausgabe „Grid“ • Nr. 146 • Juli 2006

Abschlussbegutachtung von UniGrids

Am 6. Juli fand die Abschlussbegutachtung des von der EU geförderten Projekts UniGrids (Uniform Interface to Grid Services) statt. UniGrids hatte zum Ziel, UNICORE im Hinblick auf die neuen Standards OGSA (Open Grid Service Architecture) und WS-RF (Web Services Resource Framework) weiterzuentwickeln und weitere Dienste, wie den Zugriff auf Datenbanken, Filestreaming und die interaktive Steuerung von Simulationen zu etablieren und somit verschiedenen Anwendungsgebieten zugänglich zu machen. Das Projekt wurde vom ZAM koordiniert.

Den Gutachtern und den Vertretern der Europäischen Kommission wurden die Arbeiten in den einzelnen Arbeitspaketen präsentiert und die entwickelten Software-Komponenten demonstriert. Sie bewerteten den im zweiten Jahr sowie den insgesamt erreichten Stand überaus positiv. Insbesondere wurden die Aktivitäten auf dem Gebiet der Standardisierung hervorgehoben.

Die in UniGrids durchgeführten Arbeiten legen den Grundstein für zahlreiche neue Grid-Projekte, wie etwa A-WARE und Chemomentum. Die im Projekt entwickelte Software Unicore/GS wird als UNICORE 6.0 alpha unter Open Source bei <http://unicore.sourceforge.net> verfügbar sein. Weitere Informationen sind unter <http://www.unigrids.org> zu finden. (Ansprechpartner: Daniel Mallmann, Tel. 2433)

DEISA: 2. Projekt-Review

Am 8. und 9. Juni fand in Paris die zweite Begutachtung des von der EU geförderten Projekts DEISA (Distributed European Infrastructure for Scientific Applications) statt. DEISA hat zum Ziel, eine verteilte europäische Supercomputerumgebung zu realisieren. Es trägt zur Schaffung einer europäischen Wissenschaftsinfrastruktur bei und errichtet die Basis für die Integration zukünftiger europäischer Supercomputerzentren.

Den Gutachtern wurden die vielfältigen Arbeiten in den verschiedenen Arbeitspaketen präsentiert sowie die wissenschaftlichen Ergebnisse der DECI (DEISA Extreme Computing Initiative) vorgestellt. Dabei wurde insbesondere auf den Aufbau und Betrieb des dedizierten 1 Gbit/s-Netzwerkes und dessen Upgrade auf 10 Gbit/s, der verteilten Dateisystem-Infrastruktur mittels GPFS-MC und der Grid-Middleware UNICORE eingegangen sowie die etablierten Lösungen zu Accounting, Monitoring und Sicherheit vorgestellt. Zwei Demonstrationen des verteilten Dateisystems und der UNICORE-Infrastruktur wurden erfolgreich durchgeführt.

Die Gutachter bewerteten den im zweiten Jahr erreichten Produktionsstatus der DEISA-Infrastruktur überaus positiv: Es wurde ein bedeutender Fortschritt im Aufbau und Betrieb der Infrastruktur sowie in der Unterstützung von Anwendungen und wissenschaftlichen Communities erzielt und demonstriert. Weitere Informationen gibt es unter <http://www.deisa.org>. (Ansprechpartner: Dr. Achim Streit, Tel. 6576)

Kick-Off des Grid-Projekts „OMII-Europe“

Am 5. und 6. Mai fand in London das Kick-off-Meeting des von der EU geförderten Projekts OMII-Europe (Open Middleware Infrastructure Institute for Europe) statt. Das Ziel von OMII-Europe ist, Web-Services basierte und als Open-Source verfügbare Grid-Middleware aus Europa und der Welt zusammenzuführen und durch gemeinsame Schlüsselkomponenten Interoperabilität herzustellen. Dabei liegt der Schwerpunkt der Arbeiten auf der Integration existierender Komponenten und weniger auf der Entwicklung neuer Technologien. OMII-Europe wird ein Archiv an qualitätsgeprüften Grid-Services aufbauen und anbieten. Die dort verfügbaren Services und Komponenten werden kompatibel zu den gängigen Grid-Middleware-Systemen Globus Toolkit, UNICORE, gLite und CROWNgrid sein, deren Hauptentwickler Partner im Projekt sind. So kommen von den insgesamt 16

Partnern acht aus Europa und jeweils vier aus den USA und China. Die gemeinsamen Schlüsselkomponenten adressieren Aspekte zum Management virtueller Organisationen, zum Datenbank-Zugriff, zur Job-Submission und Überwachung, zum Accounting und für Portal-Lösungen. Weiterhin werden im Projekt OMII-Europe Arbeiten zu einer einheitlichen Sicherheitsumgebung sowie zur allgemeinen Infrastrukturintegration durchgeführt. Bei allen Arbeiten haben sich die Partner dazu bekannt, offene Grid-Standards zu berücksichtigen und deren Entstehung aktiv mitzugestalten.

Das Projekt mit einer Laufzeit von 24 Monaten wird von der Universität Southampton koordiniert. Das ZAM steht dem Project Management Committee (PMC) vor, das den Koordinator in seinen Arbeiten überwacht und berät. Weitere Informationen finden sich unter <http://www.omii-europe.org>. (Ansprechpartner: Dr. Achim Streit, Tel. 6576)

Neues Grid-Projekt „Chemomentum“

Grid-basierte IT-Systeme werden mehr und mehr zur Grundlage innovativer Infrastrukturen zur Lösung komplexer Probleme in Wissenschaft und Industrie. Um den Nutzen in wissensorientierten Anwendungen wie Risikoanalyse, Bedarfsanalyse und Entscheidungsunterstützung zu erhöhen, sind jedoch weitere Arbeiten nötig.

Das EU-Projekt „Chemomentum“ wird hierzu beitragen, indem aktuelle Grid-Techniken auf Basis von UNICORE aufgegriffen und gezielt verbessert werden. Insbesondere stehen die Unterstützung von komplexen Arbeitsabläufen, eine optimierte Ressourcenauslastung, ein Daten- und Wissensmanagement sowie innovative Benutzeroberflächen im Mittelpunkt der Projektarbeiten. Im Projekt werden Anwendungen aus der Quantenchemie und Bioinformatik sowie verteilte Datenbanken in einer Grid-Architektur integriert und den Benutzern zur Verfügung gestellt.

Das im Projekt Chemomentum entwickelte System wird speziell im Kontext der Neuordnung des europäischen Chemikalienrechts (der so genannten REACH-Initiative) ausgiebig getestet werden. Viele Chemikalien werden in Zukunft vor der Marktzulassung deutlich strengeren Tests unterworfen; neben neuen Substanzen betrifft dies auch etwa 30.000 Altstoffe. Dies bedeutet einen immensen Aufwand an Geld, Zeit und Versuchstieren. Das Chemomentum-System hat das Potential, durch Bereitstellung von entsprechenden Computermodellen (in-silico-Tests) deutlich zur Kostendämpfung und zur Verringerung der Zahl der Tierversuche beizutragen.

Das Projekt wird vom Interdisziplinären Zentrum für mathematische Modellierung (ICM) der Universität Warschau koordiniert, während das ZAM die technische Leitung übernimmt. Das Projekt hat eine Laufzeit von 30 Monaten. Weitere Informationen sind unter <http://www.chemomentum.org> zu finden. (Ansprechpartner: Dr. Bernd Schuller, Tel. 8736)

Grid-Projekt „A-WARE“ gestartet

Aufeinanderfolgende Entwicklungs- und Simulationsschritte in industriellen Fertigungsprozessen, die auf unterschiedlichen Grid-Ressourcen zur Ausführung kommen, werden in Workflows zur automatisierten Verarbeitung zusammengeführt, wobei auch Veränderungen der Ressourcenverfügbarkeit zur Laufzeit zu berücksichtigen sind. Ziel des von der Europäischen Kommission geförderten Projekts A-WARE (An Easy Way to Access Grid Resources) ist, dem Anwender eine Umgebung unter Verwendung bestehender Middleware- und Portal-Technologien zur Verfügung zu stellen, die den einfachen Zugriff auf Grid-Ressourcen und deren Kombination in Workflows ermöglicht. Dazu wird die Portal-Technologie EnginFrame der am Projekt teilnehmenden Firma NICE mit der Web-Service basierten UNICORE 6.0 Grid-Technologie gekoppelt. Ein zu entwickelnder Workflow Orchestrator koordiniert und überwacht die Ausführung der Workflows unter Einbeziehung von Domain Specific Languages. Das Framework wird mit UNICORE Atomic Services (UAS) und Java Business Integration (JBI) implementiert.

Durch die Teilnahme von AIRBUS als Endbenutzer erhalten die Projektarbeiten einen starken industriellen Bezug, da einerseits die Vertraulichkeit von Daten und Verfügbarkeit von Ressourcen von unschätzbarem Wert sind und andererseits Arbeitsabläufe aus der Industrie in die Anforderungen einfließen. Das Projekt wird von CINECA in Bologna koordiniert. Es hat eine Laufzeit von 24 Monaten. Weitere Informationen werden unter <http://www.a-ware-project.eu> angeboten. (Ansprechpartner: Dr. Roger Menday, Tel. 1588)

2. UNICORE Summit

Das zweite UNICORE Summit findet am 30. und 31. August in Verbindung mit der bekannten Konferenz „Euro-Par 2006“ an der Technischen Universität Dresden statt. Die Veranstaltung gibt Benutzern, Entwicklern, Administratoren, Wissenschaftlern und Service-Anbietern der UNICORE-Grid-Software Gelegenheit, einen detaillierteren Einblick in UNICORE zu erhalten, durchgeführte Arbeiten und erzielte Ergebnisse zu präsentieren, Erfahrungen auszutauschen sowie zukünftige Entwicklungen zu diskutieren. Insgesamt wurden 21 Paper eingereicht, von denen in einem Review-Prozess acht ausgewählt wurden. Sie werden in einem separaten Workshop-Band der Euro-Par 2006 Proceedings in der Reihe „Lecture Notes of Computer Science“ des Springer Verlages veröffentlicht. Das Programm umfasst neben den Beiträgen der Paper-Autoren auch zwei eingeladene Vorträge sowie ein 2-stündiges UNICORE-Tutorial. Nähere Informationen finden Sie unter <http://summit.unicore.org/2006>. (Ansprechpartner: Dr. Achim Streit, Tel. 6576)