SSN 1866-4954 September 2010 / 3

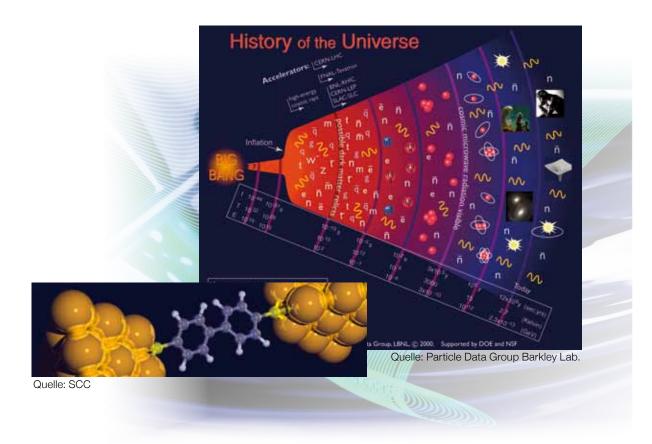
# Steinbuch Centre for Computing Steinbuch Centre for Computing SCC

#### Direktorium des SCC verstärkt

Software-Cluster - Kooperationsvertrag unterzeichnet

Forschungsprojekte für Unternehmenssoftware der Zukunft beginnen

Europäisches Grid-Projekt "EGEE" hinterlässt bleibendes Vermächtnis für die Zukunft





#### **INHALT**

4 Direktorium des SCC verstärkt

5 Festkolloquium für Klaus-Peter Mickel Das KIT verabschiedete Anfang Juli den Technisch-Wissenschaftlichen Direktor des SCC

7 Software-Cluster – Kooperationsvertrag unterzeichnet Forschungsprojekte für Unternehmenssoftware der Zukunft beginnen

Europäisches Grid-Projekt "EGEE" hinterlässt bleibendes Vermächtnis für die Zukunft Größte multidisziplinäre Grid-Infrastruktur der Welt wird innerhalb der Europäischen Grid-Initiative "EGI" weiterbetrieben

11 8. Internationale GridKa Summer School am SCC

12 Cloud Computing SCC entwickelt Servicebus

15 Private Clouds und ihr Einsatz am SCC

20 Das SCC stellt sich vor In dieser Ausgabe: Die Abteilung Scientific Computing Labs (SCL)

25 Shibboleth - Zentrale Authentifikationsinstanz für das KIT

28 SCC auf der Internationalen Supercomputing Konferenz "ISC 2010" in Hamburg

29 KIT-Lizenzen für Intel- und PGI-Compilersuites

30 Einführungskurs LaTeX





28

#### **EDITORIAL**

#### Liebe Leserinnen und Leser,

im Juli wurde der Kooperationsvertrag zum Software-Cluster "Softwareinnovationen für das digitale Unternehmen", an dem auch das KIT beteiligt ist, im Beisein des saarländischen Ministerpräsidenten Peter Müller in Saarbrücken unterzeichnet. Damit wurde der Startschuss für die ersten Forschungsprojekte gegeben. Über 30 Millionen Euro werden in der ersten Phase investiert. Das gesamte Investitionsvolumen der Clusterprojekte soll 80 Millionen Euro erreichen. Der Cluster gilt bereits jetzt als "Silicon Valley" Europas und erstreckt sich über die Zentren Darmstadt, Kaiserslautern, Karlsruhe, Saarbrücken und Walldorf. Das Ziel des Clusters ist die technologische und methodische Erforschung und Entwicklung von Softwarelösungen für digitale Unternehmen. Mit seiner Forschung zum Cloud Computing wird das KIT entscheidend zum Innovationspotenzial des Clusters beitragen.

Die Cloud-Forschung eröffnet völlig neue Möglichkeiten, Anwendungen dynamisch zu betreiben und damit Investitionen sowie Personal- und Energiekosten einzusparen. Beim Cloud Computing werden Hard- und Software in sehr großen Rechenzentren konzentriert und im Internet vermarktet. Die angebotenen Ressourcen werden den Kunden je nach Bedarf zur Verfügung gestellt. Die Research Group Cloud Computing am SCC beschäftigt sich in einer Reihe von Forschungs- und Entwicklungsprojekten sowie Dissertationsvorhaben mit Cloud-Infrastrukturen, deren Betrieb und Nutzung. Im Rahmen des vom Bundeswirtschaftsministerium geförderten Projekts Business-to-Business in the Cloud (B2BITC) entwickelt sie derzeit einen neuartigen Cloud Servicebus, der es ermöglicht, vorgefertigte und individuell maßgeschneiderte Softwarelösungen zu beziehen.

Ein international viel beachtetes und außerordentlich erfolgreiches Projekt, das eine hohe Sichtbarkeit und Bedeutung in Europa und darüber hinaus erlangt hat, wurde im Juni dieses Jahres beendet. Das europäische Grid-Computing-Projekt "Enabling Grids for E-sciencE (EGEE)", das von vielen internationalen Partnern gemeinsam mit dem SCC initiiert wurde, führte zur größten multidisziplinären Grid-Infrastruktur der Welt und ermöglichte Wissenschaftlern in Forschung und Industrie den Zugang zu bedeutenden Rechnerressourcen unabhängig von ihrem geografischen Standort. Nach erfolgreicher Abschluss-Begutachtung durch die Europäische Kommission wird der nachhaltige Ausbau des EGEE-Grids nun innerhalb der Europäischen Grid-Initiative "EGI" weitergeführt. Das SCC wird mit GridKa und den angeschlossenen Tier-2- und Tier-3-Zentren auch die weitere Entwicklung zentral mitgestalten.

Viel Vergnügen bei der Lektüre wünschen Ihnen Hannes Hartenstein, Wilfried Juling, Bernhard Neumair und Achim Streit



Prof. Dr. Hannes Hartenstein Foto: Privat



Prof. Dr. Wilfried Juling Foto: Privat



Prof. Dr. Bernhard Neumair Foto: Privat



Prof. Dr. Achim Streit

#### **IMPRESSUM**

September 2010

Herausgegeben im Auftrag des Direktoriums des Steinbuch Centre for Computing (SCC) von der Stabsstelle Öffentlichkeitsarbeit und Kommunikation

Anschrift: Steinbuch Centre for Computing (SCC)

Redaktion SCC-News

Zirkel 2

76128 Karlsruhe bzw. Hermann-von-Helmholtz-Platz 1 76344 Eggenstein-Leopoldshafen

Fax: 0721/32550

http://www.scc.kit.edu/publikationen/scc-news.php

Redaktion:

Ursula Scheller (verantwortlich) Telefon: 0721/608-4865

E-Mail: ursula.scheller@kit.edu Layout und Bildredaktion: John Atkinson

Redaktionell bearbeitete Texte werden mit (red) gekennzeichnet. Nachdruck und elektronische Weiterverwendung von Texten und Bildern nur mit ausdrücklicher Genehmigung der Redaktion.

#### Direktorium des SCC verstärkt

Prof. Dr. Bernhard Neumair und Prof. Dr. Achim Streit verstärken seit dem 1. Juli 2010 das Direktorium des Steinbuch Centre for Computing. "Es freut uns sehr, dass wir mit Prof. Neumair und Prof. Streit zwei hochkompetente Kollegen mit ausgezeichnetem Leistungsnachweis für das Direktorium des SCC gewinnen konnten. Das SCC erfährt damit eine wertvolle Stärkung an der Spitze und bringt uns unseren Zielen ein weiteres Stück näher", so die bereits seit einigen Jahren etablierten Direktoren des SCC, Prof. Dr. Wilfried Juling und Prof. Dr. Hannes Hartenstein.



Foto: Privat Lehre, Aus- & Weiterb

**Prof. Dr. Bernhard Neumair** tritt die Nachfolge des Technisch-Wissenschaftlichen Direktors Klaus-Peter Mickel an, der zum 30. Juni 2010 in den Ruhestand wechselte. In dieser Funktion übernimmt Prof. Neumair vorwiegend die Verantwortung für das Management der IT-Services und ist darüber hinaus stellvertretender Geschäftsführender Direktor des SCC. Ebenfalls zum 1. Juli 2010 berief ihn das KIT auf den Lehrstuhl "Management komplexer IT-Systeme" am Institut für Telematik der Fakultät für Informatik.

Prof. Neumair, Jahrgang 1958, studierte an der TU München Informatik und Elektrotechnik und promovierte dort mit einem Thema aus dem Bereich Netzmanagement. Danach arbeitete er als wissenschaftlicher Assistent am Institut für Informatik der Ludwig-Maximilians-Universität München und war Mitglied des wissenschaftlichen Beratergremiums der TTI Tectran GmbH, München. In den Folgejahren war er als Leiter bei der DeTeSystem GmbH in München verantwortlich für die Planung und Realisierung von Kommunikationslösungen und netznahen Anwendungen für Großkonzerne. Anschließend verantwortete er als Abteilungsleiter Planning in der T-Systems Int'l GmbH in München Design und Realisierung eines großen internationalen Telekommunikationsnetzes.

Im Juli 2003 wurde er dann auf einen Lehrstuhl für praktische Informatik an der Universität Göttingen berufen und gleichzeitig mit der Geschäftsführung der GWDG mbH betraut. Ebenfalls im Jahr 2003 wurde er in den Beratenden Ausschuss Rechenanlagen (BAR) und 2005 in den Lenkungsausschuss "sInfo" der Max-Planck-Gesellschaft berufen. Seit Dezember 2005 ist er Mitglied des Verwaltungsrats und stellvertretender Vorsitzender des DFN-Vereins.

**Prof. Dr. Achim Streit** vertritt als Direktor des SCC die Bereiche Verteilte Systeme, Grid und Cloud Computing sowie Scientific Computing. Ebenfalls zum 1. Juli 2010 berief ihn das KIT auf den Lehrstuhl "Verteilte und Parallele Hochleistungssysteme" am Institut für Telematik der Fakultät für Informatik.

Prof. Streit, Jahrgang 1974, studierte Ingenieur-Informatik mit Nebenfach Elektrotechnik an der Universität Dortmund und promovierte 2003 am Paderborn Center for Parallel Computing (PC²) an der Universität Paderborn mit einer Dissertation zum Thema Resource Management und Scheduling von HPC Systemen und Grids.

Dort war er anschließend ein Jahr als Wissenschaftlicher Mitarbeiter tätig, bevor er im Jahr 2005 an das Zentralinstitut für Angewandte Mathematik (ZAM) der Forschungszentrum Jülich GmbH (FZJ) in die Abteilung "Betriebssysteme" wechselte. Dort wurde ihm nach einem halben Jahr die Leitung der Abteilung "Verteilte Systeme und Grid Computing" am Jülich Supercomputing Centre (JSC, vormals ZAM) übertragen. Diese Aufgabe hat Prof. Streit bis Juni 2010 wahrgenommen.





Foto: Privat

#### Festkolloquium für Klaus-Peter Mickel

Das KIT verabschiedete Anfang Juli den Technisch-Wissenschaftlichen Direktor des SCC

Rund 140 Gäste fanden sich am 2. Juli im Festsaal des Studentenhauses ein, um den Technisch-Wissenschaftlichen Direktor des SCC, Klaus-Peter Mickel, nach 40 Berufsjahren und 14 Jahren an der Universität, am Forschungszentrum Karlsruhe und am KIT zu verabschieden.

Nach einer musikalischen Einstimmung durch den KIT-Konzertchor eröffnete Professor Detlef Löhe, KIT-Vizepräsident für Forschung und Information, das Kolloquium zu Ehren des Diplom-Physikers mit einem Grußwort und hob insbesondere die Rolle des Geehrten bei der Gründung und weiteren Entwicklung des SCC hervor. Aufgrund seiner Arbeitsjahre und Führungsverantwortung im Rechenzentrum der Universität als auch im Institut für Wissenschaftliches Rechnen des Forschungszentrums könne Mickel als "echter Insider" bezeichnet werden. Ihm sei es in besonderer Weise gelungen, "in einer Zeit der Umbrüche das menschliche Gefüge im Gleichgewicht zu halten". Dabei seien zwei bestimmende Merkmale seiner Persönlichkeit - Verlässlichkeit und Mut einerseits und Umsetzungswille andererseits eine wesentliche Voraussetzung gewesen. Mit Mickel verabschiede sich auch ein ganz wesentlicher Akteur im Bereich des Gridcomputing.

Prof. Dr. Reinhard Maschuw, bis September 2008 Vorstandsmitglied des Forschungszentrums Karlsruhe, ging in seiner Laudatio auf den Lebensweg Klaus-Peter Mickels ein: bereits im Rahmen seines 1970 abgeschlossenen Physikstudiums hatte er als Hiwi erste Kontakte mit dem Forschungszentrum. Auf seine erste Stelle als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Rechenzentrum der Universität seien etliche Jahre in der freien Wirtschaft gefolgt. 1996 hätte er am heutigen Campus Nord die Leitung der Abteilung Information und Kommunikationstechnik (HIK) übernommen, wurde zum Leiter des Instituts für Wissenschaftliches Rechnen, schließlich 2008 einer der SCC-Direktoren. In seiner Vielseitigkeit sei Mickel auch Dozent für Numerik und Simulation gewesen, habe ein Lehrbuch über die Programmiersprache Cobol verfasst Dr. Simon Lin, Project Director des und auch stets ein "gutes Händchen Academia Sinica Grid Computing



"Echter Insider": Klaus-Peter Mickel. Foto: Markus Breig

für die Mitarbeiterführung" besessen. Er habe die HIK zu einer modernen Abteilung gemacht mit Budgetierung und Projektmanagementschulung für Mitarbeiter. Die Nutzerorientierung hätte bei seiner Arbeit immer im Vordergrund gestanden. Mickel habe aber ganz wesentlich dazu beigetragen, dass der Traum des "Internetsteckers als Zugang zu globalen Megacomputern" an Realität gewonnen habe. Insbesondere durch sein Engagement habe Karlsruhe den Zuschlag für das 2002 gegründete Grid Computing Centre Karlsruhe (GridKa) erhalten - eines der 11 weltweiten Tier1-Zentren für den Large Hadron Collider am europäischen Forschungszentrum in Genf. Darüber hinaus habe er entscheidend zur Etablierung der inzwischen international renommierten GridKa Summer School beigetragen.

Nach der Laudatio überraschte der eigens angereiste Fachkollege und Freund

Centre (ASGC), Nankang, aus dem taiwanischen Taipeh den Geehrten mit einigen speziell angefertigten asiatischen Geschenken.

#### Die Festvorträge - Von kleinen Teilchen bis zu riesigen Rechenleistungen

Den ersten Referenten, Professor Thomas Lippert aus dem Jülich Supercomputing Centre, verbindet insbesondere das Supercomputing-Programm der Helmholtz-Gemeinschaft mit Klaus-Peter Mickel. Er erläuterte die außerordentliche Funktion, die die Simulation als dritte Säule der Forschung neben Theorie und Experiment in diesem Programm spielt und welche Rolle die in Jülich vorhandenen Supercomputer wie Jugene einnehmen. Weiterhin hob er die Rolle Klaus-Peter Mickels bei den deutschland- und europaweiten Grid-Initiativen "D-Grid" und "Enabling Grids for E-sciencE (EGEE)" hervor.

Anschließend berichtete Professor Thomas Müller vom Institut für Experimentelle Kernphysik am KIT "von kleinen Teilchen und großen Computern: Der LHC und GridKa". Zwölf fundamentale Materieteilchen und vier fundamentale Kräfte würden heute unser physikalisches Weltbild bestimmen. Die uns vertraute Materie mache allerdings nur 4.5 Prozent der Gesamtmasse des Universums aus. Der Large Hadron Collider versuche den Vorhang vor den restlichen 95,5 Prozent wie Dunkle Materie und Dunkle Energie etwas zu lüften. Das sei ohne das GridKa, das Mickel mit nach Karlsruhe geholt hätte, nicht denkbar: 2002 seien in Karlsruhe die ersten Komponenten angeliefert worden, um das GridKa zu bauen, seit 2007 wäre das Karlsruher Zentrum nun daran beteiligt, die anfallenden LHC-Daten von den erwarteten 16 PetaByte pro Jahr zu verarbeiten.

Den dritten Vortrag steuerte Dr. Ian Bird, LHC Computing Grid Project Leader am CERN bei, der vom "Worldwide LHC Computing Grid Project" (WLCG) als Teilprojekt des LHC berichtete und in die LHC- bzw. CERN-Zukunft blickte.

#### Dank an Klaus-Peter Mickel

Dr. Alexander Kurz, Vizepräsident für Wirtschaft und Finanzen, überbrachte an Klaus-Peter Mickel noch den großen Dank von Seiten der Verwaltung und Infrastruktur für die hervorragende Zusammenarbeit sowie des Präsidiums, das zudem auch durch Professor Detlef Löhe, KIT-Vizepräsident für Forschung und Information, und Dr. Peter Fritz, Vizepräsident für Forschung und Innovation, vertreten war.

Mitarbeiter des SCC überreichten dem aus dem Dienst scheidenden Technisch-Wissenschaftlichen Direktor persönliche Geschenke wie ein selbst gestaltetes Buch und ein Straßenschild für die in einem der Hauptgänge des SCC zukünftig angesiedelte "Klaus-Peter-Mickel-Allee", die der Physiker symbolisch mit einem Scherenschnitt auf der Festsaalbühne eröffnen durfte.

Auch die anderen beiden SCC-Direktoriumsmitglieder, Prof. Dr. Wilfried Juling und Prof. Dr. Hannes Hartenstein, dankten Mickel für die hervorragende Zusammenarbeit, die dazu geführt habe "aus dem virtuellen ein reales SCC" zu machen - so Juling - und für seine Freundschaft.

Abschließend ergriff Klaus-Peter Mickel selbst das Wort, der gestand, das Lebensmotto des unter den Gästen befindlichen CIO, Prof. Dr. Nobert Henze, angesichts des Abschieds wieder aufgreifen zu wollen: "Das Leben ist ein stochastischer Prozess". Er schilderte seinen Initialmoment, in dem er sich - damals noch Hiwi, der Mitte 1969 für einen Bauingenieurdoktoranden Daten im Rechenzentrum des heutigen Campus Nord auswertete - klar wurde, dass er eines Tages Rechenzentrumsleiter werden wolle. All seine Arbeit hätte aber ohne die Mitarbeiter an seiner Seite nicht so erfolgreich geschultert werden können, denn, so Mickel: "Die Mannschaft ist der Star".

Tatjana Rauch



Vertrat Verwaltung, Infrastruktur und Präsidium: Dr. Alexander Kurz.



Mickel durchschneidet das Band zur Einweihung der nach ihm benannten Allee.



Prof. Dr. Reinhard Maschuw attestierte Mickel ein "gutes Händchen für Mitarbeiterführung".



Dr. Simon Lin



Prof. Dr. Thomas Lippert



Prof. Dr. Thomas Müller

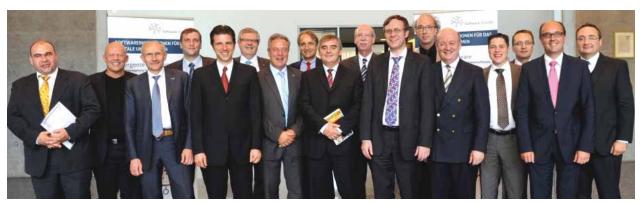


Dr. Ian Bird

Fotos: Markus Breig

#### Software-Cluster - Kooperationsvertrag unterzeichnet

# Forschungsprojekte für Unternehmenssoftware der Zukunft beginnen



Kooperationspartner mit Wirtschaftsminister Hartmann und Ministerpräsident Müller.

Im Januar hat der Software-Cluster "Softwareinnovationen für das digitale Unternehmen", an dem auch das KIT beteiligt ist, den Spitzencluster-Wettbewerb der Bundesregierung gewonnen. Der Cluster gilt als "Silicon Valley" Europas und erstreckt sich über die Zentren Darmstadt, Kaiserslautern, Karlsruhe, Saarbrücken und Walldorf. Ziel des Clusters ist es, die technologische und methodische Erforschung und Entwicklung von Softwarelösungen für digitale Unternehmen voran zu treiben. Partner im Cluster sind große deutsche Hersteller von Unternehmenssoftware wie IDS Scheer AG, SAP AG und Software AG sowie über 350 kleine und mittlere Unternehmen der Unternehmenssoftwarebranche, regionale IT-Netzwerke und namhafte Forschungseinrichtungen in Darmstadt, Karlsruhe, Kaiserslautern und im Saarland.

Im Juli unterzeichneten die Mitglieder des Software-Cluster-Strategieboards den Kooperationsvertrag im Beisein des saarländischen Ministerpräsidenten Peter Müller in Saarbrücken. Damit wurde der Startschuss für die ersten Forschungsprojekte gegeben.

#### Gesamtinvestitionsvolumen 80 Millionen Euro

"Ich freue mich sehr, dass unsere seit Langem erfolgreiche Kooperation zwischen Wissenschaft und Wirtschaft nun in Form des Software-Clusters eine weitere Stärkung erfährt und die strategische Bedeutung von Unternehmenssoftware in einer global vernetzen Geschäftswelt hervorgehoben wird. Der Cluster mit seinen Projekten im Bereich der emergenten Software, die die Geschäftstransaktionen im Internet der Zukunft unterstützen, birgt ein großes Potenzial für die Unternehmen und die Beschäftigten in Deutschland und Europa", erklärte Clustersprecher Prof. Dr. Lutz Heuser, SAP AG.

Die inhaltliche Vorbereitung der ersten drei Projekte begann schon vor über zwölf Monaten und wurde im letzten halben Jahr von den beteiligten Projektpartnern auf den Weg gebracht. Mehr als 80 Forscher werden in den nächsten Jahren intensiv an der Unternehmenssoftware der Zukunft arbeiten. Über 30 Millionen Euro werden in der ersten Phase insgesamt investiert. Die drei geplanten Projekte bilden dabei die Grundlage für weiterführende Forschungen. Das gesamte Investitionsvolumen der Clusterprojekte soll 80 Millionen Euro erreichen. "Aufgrund seiner internationalen Spitzenposition in der Informatik-Forschung und -Ausbildung wird das KIT entscheidend zum Innovationspotenzial

des Software-Cluster beitragen. Insbesondere die Cloud-Forschung eröffnet völlig neue Möglichkeiten, Anwendungen dynamisch zu betreiben und damit Investitionen sowie Personal- und Energiekosten einzusparen", so Prof. Dr. Wilfried Juling, Vertreter des KIT im Strategieboard.

#### Projekte

Das Projekt "Grundlagen emergenter Software" befasst sich mit der Erforschung und Entwicklung grundlegender Methoden, Techniken, Algorithmen und Datenstrukturen für "emergente" Software. Der Begriff "emergente Software" steht für eine neue Kategorie von verteilten, innovativen Informationssystemen, die unternehmensübergreifend aus dem Zusammenspiel einzelner Komponenten und Dienstleistungen im Internet entstehen und dadurch eine qualitativ höhere Leistungsfähigkeit aufweisen. Dadurch soll die Wertschöpfung in den Anwendungsindustrien signifikant erhöht werden. Emergente Software passt sich dynamisch an die Anforderungen aus dem Markt und im Geschäftsumfeld an, unterstützt komplexe und dynamische Unternehmensnetzwerke und ermöglicht innovative Dienstleistungen auf den Märkten des zukünftigen Internet. Damit werden die Softwarehersteller im "Software-Cluster" einen erheblichen Wettbewerbsvorteil gegenüber herkömmlich organisierten, statischen Softwarelösungen für Unternehmen erlangen.

Das Projekt "Prozessinnovationen in der Softwareindustrie" soll die Stärkung der Wettbewerbsfähigkeit von Softwareunternehmen durch die Entwicklung betriebswirtschaftlicher Methoden zum Management von Innovationsvorhaben vorantreiben. Dabei ist die übergreifende Zielsetzung, die Prozesse rund um die Produktion von Software zu erforschen und weiter zu industrialisieren. Dies reicht vom Geschäftsmodell über Softwareentwicklungsprozesse bis hin zur Umsetzung in den sogenannten "Living Labs". Diese Methoden sollen allen Softwareentwicklungseinheiten am Standort Deutschland zugute kommen.

Das Projekt "Software-Cluster Management" kümmert sich vor allem darum, die Generierung von Wissen innerhalb der Projekte und die nachhaltige Weiterentwicklung des Clusters zu steuern. Die Koordination der Verbundvorhaben durch die zentrale Koordinierungsstelle in Darmstadt und die regionalen Koordinierungsstellen wird für die Verbesserung der Rahmenbedingungen in der Cluster-Region sorgen.

#### Koordinierungsstellen in Darmstadt, Kaiserslautern, Karlsruhe und Saarbrücken

Dem Software-Cluster werden als Gewinner des Spitzenclusterwettbewerbs der Bundesregierung durch das Bundesministerium für Bildung und Forschung 40 Millionen Euro Forschungsförderung in Aussicht gestellt. Ein hochrangig besetztes Strategieboard, das sich aus Vertretern der Industrie- und Forschungspartner zusammensetzt, ist zuständig für die Strategieentwicklung im Cluster und steuert die Koordinierungsstelle. Das Ziel der zentralen Koordinierungsstelle in Darmstadt zusammen mit den regionalen Koordinierungsstellen in Darmstadt, Kaiserlautern, Karlsruhe und Saarbrücken ist die Verbesserung der Rahmenbedingungen in der Cluster-Region. Darüber hinaus soll der Software-Cluster zu einem weltweit führenden Spitzencluster der Software-Industrie ausgebaut werden, der Arbeitsplätze in Deutschland schafft und sichert.

(red)

#### Weitere Informationen

http://www.software-cluster.org/



#### Europäisches Grid-Projekt "EGEE" hinterlässt bleibendes Vermächtnis für die Zukunft

Größte multidisziplinäre Grid-Infrastruktur der Welt wird innerhalb der Europäischen Grid-Initiative "EGI" weiterbetrieben



Das EGEE-Grid umfasst weltweit über 300 Rechenzentren in mehr als 50 Ländern. Die Abbildung zeigt den europäischen Teil, zu dem das Grid Computing Centre Karlsruhe (GridKa) des SCC als Tier-1-Zentrum maßgeblich beiträgt.

Das von vielen internationalen Partnern gemeinsam mit dem Steinbuch Centre for Computing (SCC) initiierte Grid-Computing-Projekt "Enabling Grids for E-sciencE (EGEE)" ermöglicht Wissenschaftlern in Forschung und Industrie den Zugang zu bedeutenden Rechnerressourcen unabhängig von ihrem geografischen Standort. Von der EU finanziert, hat EGEE während seiner Laufzeit, die nun beendet ist, die größte multidisziplinäre Grid-Infrastruktur der Welt aufgebaut und betrieben. Diese Infrastruktur wird nun innerhalb der Europäischen Grid-Initiative "EGI" weitergeführt.

Management Board Sprecher für alle neun deutschen und liche Disziplinen vertreten. schweizerischen Partner.

Ende Juni erfolgte nun die erfolgreiche Abschluss-Begutachtung des Projekts durch die Europäische Kommission. John Martin, Vorsitzender der europäischen Begutachtungskommission, erklärte, EGEE sei ein außerordentlich erfolgreiches Vorzeigeprojekt gewesen, das eine hohe Sichtbarkeit und Bedeutung in Europa und darüber hinaus erlangt habe.

Am Ende der sechsjährigen Laufzeit unterstützt die von EGEE aufgebaute Grid-Infrastruktur international über 10.000 Wissenschaftler in ihren Forschungsvorhaben. Von

Das Steinbuch Centre for Computing (SCC) war Konsor- der Fusionsforschung über die Materialforschung bis hin zur tialführer aller deutschen Projektpartner und im EGEE Project Hochenergiephysik waren im EGEE-Projekt 15 wissenschaft-

> Grids helfen Nutzern dabei, einen barrierefreien Zugriff auf europäische oder weltweit verteilte Rechen- und Speichereinrichtungen zu erhalten. Das EGEE-Grid nimmt hier eine global einmalige Stellung ein: Es hat die größte Grid-Infrastruktur in der Welt geschaffen, auf der inzwischen jeden Monat 15 Millionen Programme auf 240.000 CPU-Kernen, verteilt auf 315 angeschlossenen Rechenzentren in 52 Ländern, ausgeführt werden.

> Das Grid Computing Centre Karlsruhe (GridKa), deutsches Tier-1-Zentrum am SCC, ist eines der 11 Herzen des EGEE-

Grids. Mit mehr als 10.000 CPU-Kernen, über 8 Petabyte an Festplattenspeicher - dies entspricht einem Volumen von fast 2 Millionen DVDs - und mehr als 10 Petabyte an assoziiertem Bandspeicherplatz ist GridKa zudem eine der größten Installationen seiner Art. 2009 wurden hier Programme im Umfang von 42,8 Millionen CPU-Stunden, entsprechend einer Rechenzeit von 4.880 Jahren, ausgeführt.

Mit der Hilfe von GridKa und den anderen weltweiten Tier-Zentren des EGEE-Grids konnten Wissenschaftler so größere Projekte als bisher in kürzerer Zeit durchführen. Die entstandene Infrastruktur ist damit zur Lebensader für viele Forschungsbereiche geworden.

Prof. Dr. Achim Streit, neu berufener Direktor des SCC, erklärt: "Eine der größten Herausforderungen des Grid-Computing liegt in der Schaffung tragfähiger kollaborativer Strukturen. EGEE hat hier Meilensteine gesetzt, von denen die deutsche und internationale Wissenschaftslandschaft für lange Zeit profitieren wird."

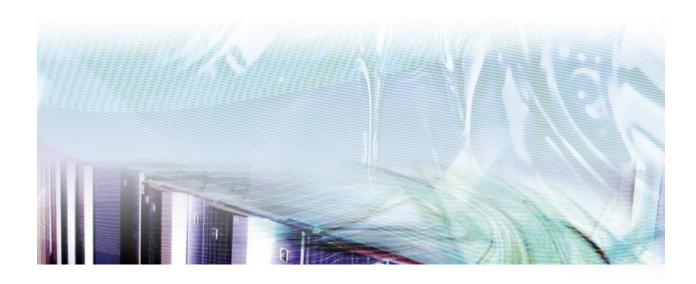
"Wir gratulieren EGEE zu seinem herausragenden Erfolg", so Prof. Dr. Wilfried Juling, Geschäftsführender Direktor des SCC, "wir freuen uns darüber, mit GridKa und den angeschlossenen Tier-2- und Tier-3-Zentren an der Verwirklichung dieser Vision mitgewirkt zu haben. Wir sehen es als unsere Mission an, auch die weitere Entwicklung zentral mitzugestalten."

Der nachhaltige Ausbau des EGEE-Grids und die Pflege der entstandenen Kollaborationen erfolgt nun innerhalb der neu gegründeten European Grid Initiative (EGI.eu) unter der Leitung von Dr. Steven Newhouse. EGI stützt sich dabei auf die nationalen Grid-Initiativen.

Die deutsche NGI-DE (National Grid Initiative Germany) wird von der Gauß-Allianz e.V. getragen. Die Konsortialführung für die zur NGI-DE zugehörige "Joint Research Unit" liegt beim KIT und hier beim SCC.

Die Mission der Nachhaltigkeit unterstützt das SCC zudem lokal durch weitere Initiativen. So fließen aktuell die am GridKa gesammelten Erfahrungen mit großen Speicherinfrastrukturen in die Schaffung einer weltweit einmaligen Einrichtung, - der Large Scale Data Facility (LSDF) - ein. Sie richtet sich insbesondere an Wissenschaftsbereiche mit Bedarf an effizientem Zugriff auf besonders große Datenbestände, so etwa die Morphologie und Biologie. Das SCC ist zusammen mit den IT-Größen Hewlett Packard, Intel und Yahoo auch Gründungsmitglied des OpenCirrus Cloud Testbed. Auch hier werden Techniken des verteilten Rechnens in kollaborativen Umgebungen erforscht.

Dr. Rüdiger Berlich, Ursula Scheller



#### 8. Internationale GridKa Summer School am SCC

Vom 6. bis 10. September 2010 öffnete das SCC zum achten Mal seine Pforten für die internationale GridKa School, eine der weltweit führenden Sommerschulen für Grid und Cloud Computing. Auch dieses Jahr vermittelten internationale Wissenschaftler den rund 100 Teilnehmern in zahlreichen Vorträgen, Workshops und praktischen Übungen aktuelle Kenntnisse zu Grid-Anwendungen und -Technologien.

"Die GridKa School richtet sich sowohl an Wissenschaftler als auch Studierende und bietet Anfängern, erfahrenen Nutzern und Grid- und Cloud-Administratoren eine optimale Themenauswahl", erklärt GridKa-Schulleiter Dr. Christopher Jung das alljährlich weltweite Interesse. Die diesjährigen Veranstaltungsmodule bezogen sich im Wesentlichen auf die Bereiche Grid-Middleware, Virtualisierung, Zugriff auf riesige Datenmengen und IT-Sicherheit. Auch zukünftige Entwicklungen und Visionen auf den Gebieten Grid und Cloud Computing wurden behandelt. In der Community hat sich die Sommerschule unter anderem deswegen einen Namen gemacht, weil sie den Teilnehmern mit dem attraktiven Rahmenprogramm ein willkommenes Forum für den Austausch von Erfahrungen bietet. Den Höhepunkt bildete auch in diesem Jahr das offizielle School Dinner in einem renommierten Karlsruher Hotel.

Weitere Informationen zur Summer School finden Sie unter <a href="http://www.kit.edu/gridka-school">http://www.kit.edu/gridka-school</a> oder kontaktieren Sie Dr. Christopher Jung, SCC, Tel. 07247/82-8606, Fax: 07247/82-4972, E-Mail: GridKa-School@scc.kit.edu.

Ursula Scheller





Internationales Interesse: Die Teilnehmerinnen und Teilnehmer der GridKa School 2009 Foto: Michael Roth

#### Cloud Computing

#### SCC entwickelt Servicebus

Der IT-Trend "Cloud Computing" verspricht dank flexibler Infrastrukturen zur Verwendung verteilter Ressourcen über das Internet hohen Nutzen zu niedrigen Kosten. Cloud Provider konzentrieren Hard- und Software in sehr großen Rechenzentren, vermarkten diese über das Internet und stellen die angebotenen Ressourcen den Kunden nach deren Bedarf zur Verfügung. Entscheidend dabei ist der Selbstbedienungsaspekt: Cloud-Kunden konfigurieren sich die benötigten Dienste selbst, die wunschgemäße Erstellung und der Betrieb dieser Dienste übernimmt dann der Cloud Provider, üblicherweise vollständig automatisiert. Die Forschungsgruppe Cloud am SCC beschäftigt sich in einer Reihe von Forschungs- und Entwicklungsprojekten sowie Dissertationsvorhaben mit Cloud-Infrastrukturen, deren Betrieb und Nutzung.

#### Virtualisierung

Die Virtualisierung von Ressourcen bildet die Grundlage der meisten Cloud-Architekturen [1]. Das Konzept der Virtualisierung erlaubt eine abstrakte, logische Sicht auf physische Ressourcen, die sowohl Server, Datenspeicher und Netze als auch Software umfasst. Physische Ressourcen werden zu Pools zusammengefasst, aus denen dann nach Bedarf einzelne Anforderungen befriedigt werden können. Damit kann beispielsweise eine spezifische Plattform (Soft- und Hardware) genau in dem Moment bereitgestellt werden, in dem sie gebraucht wird. Nach der Nutzung ist eine rückstandsfreie Entsorgung (und damit die Freigabe der genutzten physischen Ressourcen) ebenfalls sofort möglich. Statt einer realen kommt dabei eine virtuelle Maschine zum Einsatz.

Für den Betreiber von IT-Diensten bringt der Einsatz von Virtualisierung eine Reihe von Vorteilen:

- · Ressourcennutzung: Physische Server sind oft nur schwach ausgelastet, da man meist genügend Reserven zur Abdeckung von Lastspitzen einplanen muss. Sind die Server jedoch virtualisiert, kann eine Lastspitze aus dem Ressourcenpool abgefangen und der Kauf zusätzlicher Kapazitäten vermieden werden.
- Management: Die Verwaltung der Ressourcen in den Pools kann automatisiert werden. Virtuelle Maschinen können nach Bedarf automatisch erzeugt und konfiguriert werden.
- · Konsolidierung: Verschiedene Dienste für unterschiedliche Anwendungen oder Anwendungsklassen können auf einer verringerten Anzahl physischer Ressourcen zusammengefasst werden. Dies bezieht sich nicht nur auf Server oder Netzwerkspeicher, sondern auch auf komplette Systemlandschaften, Datenbanken, Netze oder Desktops. Eine positive Folge der Konsolidierung liegt auch im verringerten Energie- und Platzverbrauch.
- · Notfallplanung: Fortschrittliche Virtualisierungsinfrastrukturen erlauben es, virtuelle Maschinen zwischen verschiedenen Ressourcenpools zu migrieren. Die Verfügbarkeit und der Service Level der Dienste steigen, auch deshalb, weil hardwarebedingte Wartungsfenster entfallen können. Cloud Service Provider bauen sehr große Rechenzentren, wodurch auf Basis der Größe und der dort eingesetzten Virtualisierung eine stark verbesserte Kostensituation ent-

steht. Für den Kunden ergeben sich die folgenden Vorteile (s. Abbildung 1):

- Dynamik: Anforderungen können maßgeschneidert und ohne längere Wartezeiten befriedigt werden. Bei Engpässen stehen den virtuellen Maschinen zusätzliche Ressourcen zur Verfügung (z. B. Speicher oder I/O-Leistung).
- Verfügbarkeit: Dienste können hoch verfügbar und rund um die Uhr unterbrechungsfrei genutzt und Anwendungen im Fall von Technologie-Upgrades im laufenden Betrieb migriert werden, da die Verschiebung virtueller Maschinen auf ein anderes physisches System möglich ist.
- · Zugriff/Sicherheit: Die Virtualisierungsschicht bewirkt eine Isolation der virtuellen Maschinen, sowohl voneinander als auch von der physischen Infrastruktur. Damit erlauben es virtuelle Systeme, in sicherer Weise Managementaufgaben bzw. -funktionalitäten an den Kunden zu delegieren. Damit können Kunden IT-Leistungen in Selbstbedienung erwerben (z. B. über ein Portal).

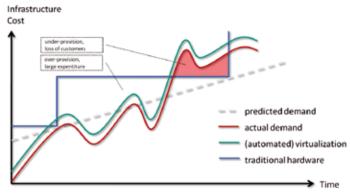


Abbildung 1: Dynamische Skalierung von Ressourcen.

Als Nachteil verbucht die Virtualisierung für sich, dass der Betrieb der Abstraktionsschicht selbst Ressourcen verbraucht. Dieser Aufwand hält sich aber aufgrund der Ausgereiftheit der aktuellen Systeme in engen Grenzen. Durch das effektive Zusammenspiel aktueller Multicore-Prozessoren mit Virtualisierungssoftware spielt dieser Leistungsverlust heutzutage nur noch eine untergeordnete Rolle. Lediglich Grafik- oder Multimediaanwendungen mit gegebenenfalls Echtzeit- oder echtzeitähnlichen Anforderungen können mit

virtuellen Maschinen noch nicht mit ausreichender Performanz ermöglicht werden.

Am SCC wird für den Produktiveinsatz seit längerer Zeit Plattformvirtualisierung auf Basis von VMware ESX betrieben (s. Abbildung 2). Das SCC kann diesbezüglich auf eine langjährige Erfahrung zurückgreifen und darüber hinaus eine voll ausgebaute Virtualisierungsinfrastruktur zu Verfügung stellen [2]. Die VMware-Managementlösung vSphere bietet weiterhin eine vollständige maschinelle Remotesteuerung des gesamten ESX-Clusters per plattformunabhängiger SOAP-API an. Zusätzlich wird am SCC eine Virtualisierungs- bzw. Cloud-Infrastruktur auf Basis von KVM aufgebaut (Eucalyptus) und für wissenschaftliche Zwecke genutzt [3]. Eucalyptus ist schnittstellenkompatibel mit den Amazon Cloud-Diensten [4].

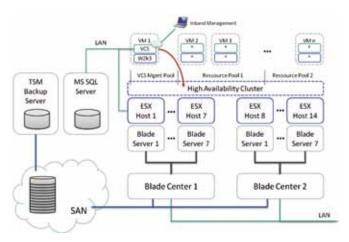


Abbildung 2: Virtualisierung mit VMware ESX am SCC.

#### Business-to-Business in the Cloud (B2BITC)

Beim vom Bundeswirtschaftsministerium im Rahmen der THESEUS-Initiative geförderten KMU-Projektes "B2B in the Cloud" [5] soll ein Dienst entstehen, der es ermöglicht, Geschäftsprozesse dynamisch im Internet abzuwickeln. Die Plattform basiert auf Lösungen des SCC-Kooperationspartners Seeburger AG aus Bretten [6] und soll B2B-Integration für kleine und mittelständische Unternehmen ad-hoc beziehbar machen, ohne dass eine aufwändige lokale Installation eingerichtet werden muss. Im einfachsten Fall registriert sich ein Kunde an einem Portal, wählt seine Geschäftsprozesse aus vorgefertigten Standardprozesstemplates aus und verfeinert gegebenenfalls deren Konfiguration. Ein Beispiel wäre ein Zulieferer, der monatlich eine Rechnung an einen großen Automobilhersteller bzw. dessen SAP-basiertes ERP-System übermitteln muss. Das Portal leitet die passende Konfiguration an einen Cloud Service weiter, der dann die entsprechenden virtuellen Maschinen bei einem so genannten IaaS (Infrastructure as a Service) Provider generiert und die dort vorinstallierte B2B-Integrationssoftware konfiguriert. Die jeweiligen Zugangsdaten zu den virtuellen Maschinen werden dann an den Kunden weitergereicht. Der operative Austausch der Geschäftsdaten erfolgt im Anschluss über die dynamisch erstellten und entsprechend den Kundenwünschen konfigurierten virtuellen Prozessmaschinen (s. Abbildung 3).

Alle Systembestandteile sollen dabei in einer Cloud-Umgebung betrieben werden, so dass immer die aktuell benötigte

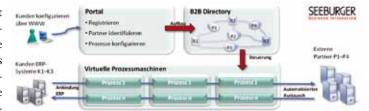


Abbildung 3: Überblick B2BITC.

Menge an Ressourcen zur Verfügung gestellt und abgerechnet werden kann. Als Basistechnologien kommen daher für alle Komponenten virtuelle Maschinen, Netze und Speicher zum Einsatz.

Zu diesem Zweck wird am SCC ein Servicebus entwickelt, der von der eigentlichen Cloud-Infrastruktur abstrahiert und eine vom verwendeten Infrastrukturdienst unabhängige Schnittstelle zur Verfügung stellt. So soll es möglich sein, mit einheitlichen API-Aufrufen virtuelle Maschinen zu verwalten (starten, stoppen, konfigurieren etc.) ohne die technischen Unterschiede der verschiedenen Infrastrukturdienste zu beachten oder dort gar einen Zugangsaccount besitzen zu müssen. Diese Details werden vor dem Nutzer vollständig verborgen. Zurzeit unterstützt der Cloudbus VMware/vSphere-Umgebungen und Amazon EC2. Da die im SCC ebenfalls betriebene Eucalyptus Infrastruktur-Cloud schnittstellenkompatibel zu Amazon EC2 ist, ließe sich auch dieser Provider mit wenig Aufwand integrieren (s. Abbildung 4).

Weiterhin integriert sind Monitoring-Komponenten, die den Ressourcenverbrauch (CPU-MHz, CPU-%, RAM etc.) der virtuellen Instanzen auf Stundenbasis genau erfassen. Eine Gebührenkomponente kann aufbauend auf diesen Daten und aus den fixen VM-Eigenschaften (Plattengröße, CPU-Zahl etc.) mit frei definierbaren mathematischen Ausdrücken stündliche und monatliche Betriebsgebühren bestimmen, die dann an den Kunden weitergeleitet werden können. So könnte man beispielsweise für die Nutzung der B2B-Lösung und des Festplattenverbrauchs (pro GB) eine Monatspauschale verlangen, die verbrauchten CPU-Ressourcen jedoch auf Stundenbasis (pro MHz) abrechnen, die für den Kunden nur dann anfallen, wenn die Maschine läuft und die (Host-)CPU nutzt.

Die Templateverwaltung des Servicebusses ist flexibel genug, um den Nutzern für verschiedenste Anwendungsfälle (neben B2B) maßgeschneiderte Basisvorlagen zur Verfügung zu stellen. Der Bus bietet eine Webservice-Interoperability (WS-I)-konforme Schnittstelle zur automatisierten Fernsteuerung an, so dass Frontends in jeder der gängigen aktuellen Programmiersprachen als Webinterface oder vollständige Client-Anwendung (Abbildung 5 zeigt einen Prototyp zur Verwaltung verteilter Public-Resource-Computing-Knoten [7]) entwickelt werden können.

Dr. Matthias Bonn, Dr. Marcel Kunze

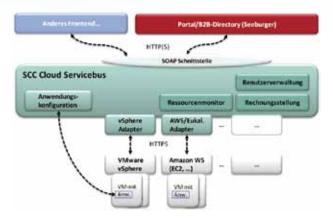


Abbildung 4: SCC Cloud Servicebus (vereinfacht).

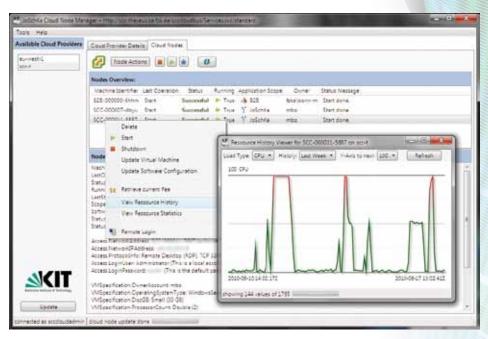


Abbildung 5: Beispiel eines Frontends für Cloud-Anwendungen.

#### Referenzen

[1] Baun, C., Kunze, M., Nimis, J., Tai, S. (2009). Cloud Computing: Web-basierte dynamische IT-Services. Springer, Berlin; Auflage: 1

[2] Baun, C., Kunze, M., Milke, J. Servervirtualisierung – mehrere IT-Dienste auf einem Rechner, SCC-News 2009/1

[3] Baun, C.; Kunze, M., Building a private Cloud with Eucalyptus. 5th IEEE International Conference on e-Science, Oxford, GB, December 9-11, 2009

[4] http://aws.amazon.com/

[5] THESEUS MITTELSTAND 2009, Teilvorhabensbeschreibung FWTM-019, B2BITC – B2B in the Cloud

 $\hbox{\cite{thm} [6] http://www.seeburger.de/produkte/eai-b2b/business-integration-server-6.html}$ 

[7] Bonn, M. JoSchKa: Jobverteilung in heterogenen und unzuverlässigen Umgebungen. Prof. Dr. H. Schmeck / Prof. Dr. W. Juling, 21.07.2008, Dissertation, Universität Karlsruhe (TH), Fakultät für Wirtschaftswissenschaften

#### Private Clouds und ihr Einsatz am SCC

Cloud Computing ist in den letzten zwei Jahren auf den ersten Platz der IT-Hitparade aufgestiegen. Das Mieten von Rechnerressourcen, Anwendungen und Speicherplatz je nach Bedarf gilt als Zukunftsgeschäft. Neben kommerziellen Anbietern von IT-Ressourcen, die bezüglich der Offenlegung ihrer zugrundeliegenden Technologien und Spezifikationen eher eine proprietäre Politik verfolgen, haben mittlerweile zahlreiche Open Source-Lösungen ihren Weg in den Markt gefunden. Das Bauen einer eigenen Private Cloud ist damit ohne weiteres zu realisieren. Darüber hinaus ermöglicht der quelloffene Ansatz eine breite Unterstützung bezüglich der Weiterentwicklung von Software und Architektur. Nachfolgend werden Prototypen eigener Clouds diskutiert, die zurzeit in der SCC-Forschungsgruppe Cloud Computing gebaut und im Hinblick auf Praxistauglichkeit untersucht werden. Die Arbeiten werden im Umfeld des Open Cirrus Testbed durchgeführt, an dem das SCC als Exzellenzpartner beteiligt ist.

Das Konzept des Cloud Computing hat das Potenzial, unser Verständnis von IT-Dienstleistung in den nächsten Jahren grundlegend zu verändern. In [BaKuNiTa09] wird die folgende Definition gegeben: Unter Ausnutzung virtualisierter Rechenund Speicherressourcen und moderner Web-Technologien stellt Cloud Computing skalierbare, netzwerk-zentrierte, abstrahierte IT-Infrastrukturen, Plattformen und Anwendungen als On Demand-Dienste zur Verfügung. Die Abrechnung dieser Dienste erfolgt nutzungsabhängig.

Das Konzept ist wirtschaftlich sehr interessant, da sich aus der Konzentration von Hard- und Software in großen Ressourcenzentren beträchtliche Skaleneffekte ergeben [BuYe-Ve2008]. Die weitgehende Automatisierung des Betriebs und des Service-Lebenszyklus führt zu einer Industrialisierung der IT [Nicholas\_Carr\_2008]. Den Benutzern werden in diesem Szenario die Ressourcen in Form von vollautomatisch skalierbaren Web-Services angeboten. Gehören Anbieter und Benutzer unterschiedlichen Organisationen an, spricht man von einer Public Cloud. Die Vorteile liegen auf der Hand: Die Benutzer können auf praktisch unbegrenzt verfügbare Ressourcen zugreifen und bekommen nur die aktuell erbrachte Leistung in Rechnung gestellt. Es entfallen die Kosten für Anschaffung, Betrieb und Wartung eigener Hardware.

Zu den bekanntesten Public Cloud-Angeboten gehören die Amazon Web Services (AWS). Die AWS sind eine Sammlung verschiedener Cloud-Dienste, die von der Firma Amazon angeboten werden. Die Abrechnung der Dienste erfolgt nach Verbrauch und über eine Kreditkarte. Bekannte Dienste innerhalb der AWS sind u.a. Elastic Compute Cloud (EC2), Simple Storage Service (S3) und Elastic Block Store (EBS). EC2 ist ein Dienst zur Bereitstellung virtueller Server. Über

EC2 können die Benutzer virtuelle Server mit Linux, Solaris oder Windows Server auf Basis der Virtualisierungslösung Xen auf den Serverfarmen von Amazon betreiben. S3 ist ein Dienst, über den die Benutzer Daten in Form von Webobjekten auf den Speicher-Ressourcen von Amazon ablegen können. EBS ist ein Dienst für persistente Datenspeichervolumen, die der Benutzer an Server in EC2 anbinden kann.

#### **Private Clouds**

Ein potenzielles Risiko bei der Verwendung von Diensten in Public Clouds ist die Gefahr des so genannten Vendor Lock-in. Hierbei kommt es zu einer Abhängigkeit zwischen Benutzer und Anbieter, bei der der Benutzer nicht oder nur um den Preis des Verlusts seiner Daten zu einem anderen Anbieter wechseln kann. Die Gefahr des Lock-in ist immer dann gegeben, wenn die eingesetzten Dienste nicht kompatibel zu anderen Anbietern sind und es keine Möglichkeit zum Daten-Export gibt. Weitere Gründe, die dem Einsatz von Diensten aus Public Clouds im Weg stehen können, sind der Datenschutz beim Verarbeiten personenbezogener Daten und generelle Sicherheitsbedenken bei wertvollen Daten im industriellen und forschungsbezogenen Umfeld [BaKu\_iX2010].

Ist der Einsatz von Diensten in Public Clouds aus den genannten Gründen nicht ratsam oder möglich, empfiehlt sich der Aufbau einer eigenen Private Cloud. Bei einer Private Cloud gehören Anbieter und Benutzer der gleichen Organisation an. Die Gefahr des Lock-in oder Bedenken hinsichtlich Datensicherheit und Datenschutz sind in einem solchen Szenario quasi ausgeschlossen.

Die Dienste sind im Idealfall schnittstellenkompatibel zu den

Name	Lizenz	Unterstützung für EC2	Unterstützung für S3	Unterstützung für EBS
abiCloud	LGPL v3	nein		nein
Cloud.com		in Entwicklung	in Entwicklung	nein
Enomaly ECP	AGPL v3	nein	nein	nein
Eucalyptus	GPL v3	ja	ja	ja
Nimbus	Apache License, Version 2.0	Teile der EC2 Query API und EC2 SOAP API	nein	nein
OpenECP	AGPL v3	nein	nein	nein
OpenNebula	Apache License, Version 2.0	Teile der EC2 Query API	nein	nein
Tashi	Apache License, Version 2.0	in Entwicklung	nein	nein

Tabelle 1: Übersicht über die verfügbaren Private Cloud-Lösungen und deren Kompatibilität zu den AWS.

Public Cloud-Diensten etablierter Serviceanbieter, um im Bedarfsfall Dienste aus Private und Public Clouds gleichzeitig zu verwenden und zwischen den Diensten zu wechseln. Man spricht in diesem Fall von einer Hybrid Cloud.

Auf dem Markt existiert eine große Auswahl (s. Tabelle 1) von Private Cloud-Lösungen, die Open Source sind und die Möglichkeit bieten, eine eigene Cloud-Infrastruktur aufzubauen. Die technischen Anforderungen zur Realisierung eines eigenen Projekts sind überschaubar: Zwingend notwendig ist als Host-Betriebssystem Linux mit einer unterstützten Virtualisierungslösung. Die meisten Private Cloud-Lösungen unterstützen den Xen Hypervisor und/oder die Kernel-based Virtual Machine (KVM). Für Testzwecke genügt ein einzelner Server. Das übliche Szenario ist allerdings die Installation auf einem Cluster. Betrachtet man die Faktoren Funktionalitätsumfang, Sichtbarkeit und die Entwicklungsaktivität, sind die Lösungen Eucalyptus und OpenNebula am interessantesten. Die übrigen Lösungen befinden sich noch in einem frühen Entwicklungsstadium (abiCloud, Cloud.com, OpenECP), werden nicht mehr weiterentwickelt (Enomaly ECP) oder sind noch nicht für den Produktionsbetrieb geeignet (Tashi, Nimbus) und werden daher hier nicht weiter besprochen.

#### Eucalyptus

Eucalyptus [Eucalyptus] steht für "Elastic Utility Computing Architecture for Linking Your Programs To Useful Systems" und ist eine Enwicklung der University of California in Santa Barbara (UCSB). Nach einer Ausgründung findet die Weiterentwicklung nun bei Eucalyptus Systems, Inc. statt. Eucalyptus ist als einzige verfügbare Private Cloud-Lösung kompatibel zu EC2, S3 und EBS. Die Benutzer können die zahlreichen verfügbaren EC2-Kommandozeilenwerkzeuge und Browser-Plugins wie ElasticFox und Hybridfox verwenden. Eucalyptus besteht aus mehreren UNIX-Diensten, die als Web Services implementiert sind. Bei den Komponenten (s. Abbildung 1) handelt es sich im Einzelnen um:

- · Cloud Controller
- · Cluster Controller
- · Node Controller
- · Walrus
- · Storage Controller

Pro Eucalyptus-Instanz ist exakt ein Cloud Controller (CLC) einzurichten. Dieser erfüllt die Rolle des Meta-Schedulers in der Cloud. Der CLC sammelt Ressourcen-Informationen von den CCs und nimmt die Aufträge der Benutzer entgegen. Pro Standort ist exakt ein Cluster Controller (CC) erforderlich. Dieser regelt die Verteilung der virtuellen Maschinen auf die NCs und sammelt Informationen über freie Ressourcen von den NCs. In kleineren bis mittleren Eucalyptus-Infrastrukturen, wie den Private Clouds am SCC, liegen CLC und CC meistens auf einem physischen Rechner. Der Node Controller (NC) läuft auf jedem Rechenknoten. Dabei handelt es sich um die Rechner, auf dem später virtuelle Maschinen laufen sollen. Der NC steuert die Virtualisierungslösung (Xen-Hypervisor oder KVM). Diese muss zwingend auf jedem Rechenkno-

ten installiert sein. In der Eucalyptus Enterprise Edition kann der NC auch mit VMware vSphere, ESX und ESXi zusammenarbeiten. Zusätzlich übernimmt der NC das Monitoring und sendet Ressourcen-Informationen an den CC des eigenen Standorts.

Walrus ist ein zu S3 kompatibler Speicher-Dienst. Da die durch Walrus anfallende Last gering ist, wird der Dienst meistens auf dem gleichen physischen Rechner konfiguriert, auf dem auch der CLC/CC liegt. Der Storage Controller ist ein zu EBS kompatibler Speicher-Dienst für persistenten Speicher. Auch der Storage Controller läuft in der Regel auf dem CLC/CC.

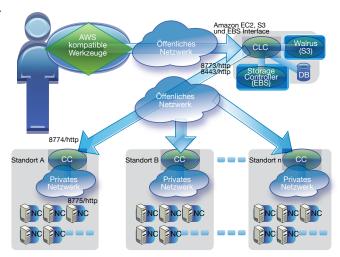


Abbildung 1: Komponenten von Eucalyptus (Version 1.6.2).

Unter den Unternehmen und Behörden, die Infrastrukturen auf Basis von Eucalyptus einsetzen, sticht insbesondere die NASA hervor. Die amerikanische Weltraumbehörde baut zur Unterstützung ihrer wissenschaftlichen Anwendungen aktuell eine Cloud-Infrastruktur mit dem Namen Nebula Cloud Computing Platform [NASANebula] auf, die auf Eucalyptus basiert.

Das SCC betreibt seit Ende 2008 mehrere Private Cloud-Generationen mit Eucalyptus zur Unterstützung von Forschungs- und Entwicklungsaufgaben. Die aktuellste Infrastruktur im SCC besteht aus fünf HP Blade ProLiant BL2x220c G5 Blade-Systemen. Jedes Blade enthält 2 Server mit je 2 Quad-Core Intel Xeon mit je 2,33 GHz und 16 GB Hauptspeicher. Auf den Servern läuft Ubuntu 10.04 LTS mit Eucalyptus 1.6.2 und KVM als Virtualisierungslösung.

#### **OpenNebula**

OpenNebula [OpenNebula] ist ein Open Source Software Framework, das von der EU im Rahmen des RESER-VOIR-Projekts gefördert wird [reservoir]. Es wird in der Distributed Systems Architecture Research Group [dsa-research] an der Complutense University of Madrid [ucm] unter der Leitung von Dr. Ignacio M. Llorente und Dr. Ruben S. Montero entwickelt. OpenNebula verwaltet Pools physischer IT-Ressourcen und organisiert Speicher-, Netzwerk- und Virtualisierungstechnologien so, dass eine dynamische Umgebung für Ensembles von

Virtuellen Maschinen auf einer verteilten Infrastruktur geschaffen wird. Diese kann aus lokalen Ressourcen und falls erwünscht, auch aus externen Cloud-Ressourcen orchestriert werden.

# Local User and Administrator Interface Scheduler Cloud Service Virtual Infrastructure Manager Virtualization Storage Network Cloud Public Cloud Local Infrastructure

Abbildung 2: Komponenten von OpenNebula.

Der "Infrastructure Manager" bildet die zentrale Einheit für die Verwaltung aller virtuellen und physischen Ressourcen. Er erlaubt eine flexible Anpassung der physischen Infrastruktur durch das Hinzufügen von neuen Rechenknoten und das dynamische Partitionieren des Clusters. OpenNebula unterstützt heterogene Betriebsumgebungen mit den unterschiedlichsten Softwarevoraussetzungen innerhalb derselben Infrastruktur. Neben der Nutzung von lokalen Ressourcen kann man über OpenNebula auch Images transparent in EC2 hochladen und registrieren. Darüber hinaus ist es auch möglich, Instanzen zu starten oder zu beenden und damit zu AWS kompatible Cloud-Ressourcen zu steuern. Diese Features eröffnen die Möglichkeit, Hybrid Clouds unter Einbeziehung von zu EC2 kompatiblen Cloud-Infrastrukturen aufzubauen. Daraus ergeben sich niedrigere Kosten für die lokale Infrastruktur, da nun Lastspitzen von einem externen Cloud Provider aufgefangen werden können und diese nach aktuellem Verbrauch abgerechnet werden.

Ein weiteres besonderes Feature von OpenNebula ist die Unterstützung der unterbrechungsfreien Migration von laufenden Instanzen. Die physische Hardware kann hierbei effizienter genutzt werden. Nachteilig an OpenNebula ist beim aktuellen Entwicklungsstand die unvollständige Unterstützung der EC2-Query-API und die fehlende Möglichkeit, OpenNebula mit AWS-kompatiblen Werkzeugen anzusprechen. Im Gegensatz zu Eucalyptus bietet OpenNebula momentan keinen Speicher-Dienst, der vergleichbar oder gar kompatibel zu S3 oder EBS ist. Da OpenNebula vom Google Summer of Code 2010 unterstützt wird, ist hier jedoch in naher Zukunft mit interessanten Entwicklungen zu rechnen. Durch die öffentliche Lizenz kann OpenNebula flexibel an spezielle Wünsche angepasst und weiterentwickelt werden.

Momentan arbeitet man am Europäischen Forschungszentrum auf der Basis von OpenNebula an der Entwicklung einer Private Cloud zur Unterstützung der LHC-Experimente. Die gegenwärtige Installation wird im Umfeld des LxCloud Project [LxCloud] vorangetrieben und umfasst zurzeit mehrere hundert Rechner, so dass bis zu 8.000 virtuelle Maschinen gestartet werden können. Das Ziel ist es, bis zu 45.000 virtuelle Maschinen zu verwalten. Erste Tests verliefen vielversprechend, so dass man hier bald mit einer stabilen Produktionsumgebung für die Verarbeitung von Analyse- und Simulationsjobs rechnen kann.

Seit Mitte 2010 wird eine OpenNebula-Installation von Ariel Garcia und Ahmad Hammad auch am SCC entwickelt und getestet. Zum Einsatz kommt die aktuell stabile Version OpenNebula 1.4, welche als Basisbetriebsystem Ubuntu 10.04 LTS verwendet und auf KVM als Virtualisierungslösung aufbaut. Stabilität und Skalierbarkeit werden mit Tiles@home-[TilesAtHome]Anwendungen validiert, welche Rechenressourcen für das Projekt OpenStreetMap [openstreetmap] bereitstellen. Bereits die ersten Versuche weisen auf eine hohe Zuverlässigkeit der Cloud Framework Software hin und machen Hoffnung auf die zukünftige Nutzung zur Unterstützung von Forschungs- und Entwicklungsarbeiten am KIT.

#### **KOALA Cloud Manager**

Als einheitliche und leistungsfähige Management-Lösung für die unterschiedlichen Public und Private Cloud-Infrastrukturdienste wurde in der SCC-Forschungsgruppe Cloud Computing der KOALA Cloud Manager [KOALA] entwickelt. KOALA steht hierbei für Karlsruhe Offene Anwendung (für) cLoud Administration. KOALA ist ein Dienst, der selbst in der Cloud läuft, also keinerlei lokale Installation voraussetzt.

Mit KOALA können Cloud-Infrastrukturen (IaaS) gesteuert werden (s. Abbildung 3), die kompatibel zu den AWS-Schnittstellen sind. Unterstützt werden neben Amazon EC2, EBS und S3 auch Private Cloud-Infrastrukturen auf Basis von Eucalyptus und Nimbus [Nimbus].

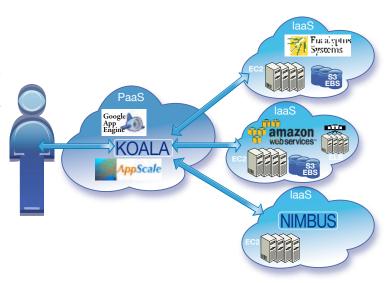


Abbildung 3: Mit KOALA können alle AWS-kompatiblen Cloud-Infrastrukturen gesteuert werden.

Die existierenden Werkzeuge, um Cloud-Infrastrukturen zu steuern, können in drei Gruppen eingeordnet werden.

- · Online-Werkzeuge (SaaS-Angebote)
- · Browser Plugins
- · Kommandozeilenwerkzeuge

Alle Werkzeuge in den drei Kategorien haben verschiedene Vor- und Nachteile.

Proprietäre Online-Werkzeuge (Dienste) wie die AWS Management Console von Amazon arbeiten exklusiv mit den Public Cloud-Diensten dieses Anbieters zusammen. Das Produkt Ylastic ist kostenpflichtig und arbeitet ausschließlich mit AWS und Eucalyptus zusammen. Eine Unterstützung für weitere AWS-kompatible IaaS-Lösungen wie Nimbus ist nicht enthalten und keine der Lösungen ist als Open Source verfügbar. Die Zugangsdaten müssen bei den Anbietern der Management-Dienste gespeichert werden, was ein starkes Vertrauen des Benutzers bezüglich Datensicherheit und Datenschutz gegenüber den Anbietern voraussetzt.

Browser Plugins wie Elasticfox und Hybridfox arbeiten ausschließlich mit dem Firefox-Browser zusammen. Das Management-Werkzeug muss überdies von den Benutzern lokal installiert werden. Da die Cloud-Infrastrukturen sich durch die kontinuierliche Weiterentwicklung rasch ändern, müssen auch die Management-Werkzeuge aktiv weiterentwickelt und angepasst werden, was zusätzlichen Administrationsaufwand für die Benutzer bedeutet und manchmal auch zu Inkompatibilitäten führt.

Die Kommandozeilenwerkzeuge von Amazon unterstützten nur die Dienste in der Public Cloud von Amazon. Die Euca2ools von Eucalyptus können dagegen mit AWS-kompatiblen Diensten in Public und Private Clouds arbeiten. Bei diesen Werkzeugen ist aber eine lokale Installation und Administration notwendig. Ein weiterer Nachteil ist die schlechte Benutzbarkeit durch das Fehlen einer grafischen Benutzeroberfläche (GUI).

KOALA löst diese Probleme, da es als Software-Dienst in der Cloud angeboten wird. KOALA wurde als Anwendung für die Google App Engine konzipiert und in Python implementiert. Die Installation von KOALA kann auf der Basis des öffentlichen Plattformdienstes Google App Engine erfolgen oder innerhalb eines zur App Engine kompatiblen Plattformdienstes wie AppScale. Der Dienst AppScale kann dabei sowohl in der Public Cloud (Amazon EC2) als auch in einer Eucalyptus-basierten Private Cloud etabliert werden. Wenn KOALA mit AppScale orchestriert wird, ist es möglich KOALA als Cloud Management Werkzeug innerhalb der eigenen Cloud-Infrastruktur laufen zu lassen. Es ist somit möglich, eine Cloud-Infrastruktur aus sich selbst heraus zu steuern (s. Abbildung 4). Dies ist ein schönes Beispiel dafür, wie die drei Ebenen des Cloud Computing SaaS, PaaS und IaaS flexibel ineinander verschachtelt werden können.

Der Betrieb von KOALA innerhalb einer AppScale Private Cloud kann Sicherheits- und Datenschutz-Bedenken mildern, da bei einem solchen Vorgehen die Zugriffszertifikate nicht bei einem externen Anbieter wie Ylastic oder Google gespeichert werden müssen.

Die gesamte grafische Oberfläche von KOALA ist komplett in deutscher und englischer Sprache und in HTML 4.01 implementiert. Auf den Einsatz proprietärer Technologien wie Adobe Flash wurde verzichtet. Dadurch haben die Benutzer die Möglichkeit, mit Hilfe von Smartphones wie dem Apple iPhone oder Geräten mit Google Android den KOALA Cloud Manager ohne Einschränkungen zu verwenden.

Die Nutzung von KOALA selbst ist kostenlos. Der Quellcode ist Open Source und steht unter der Apache License, Version 2.0. Eine Projekt-Seite für KOALA [KOALACode] mit dem Quellcode und weiteren Informationen ist bei Google Code verfügbar.

#### Fazit

Die bisher getätigten und geplanten Investitionen der großen Cloud Computing Provider im mehrstelligen Milliardenbereich werden durch günstige Angebote sicherlich zu einer breiten Akzeptanz des Cloud Computing-Konzeptes führen (wir nutzen ja schon alle bewusst oder unbewusst viele Web-Dienste von Google und Microsoft in der einen oder anderen Form). Private Cloud-Lösungen kommt hierbei eine entscheide Rolle als kultivierendes Element in Unternehmen zu. Der Abbau von Datenschutzbedenken kombiniert mit den Vorteilen einer flexiblen Cloud Computing-Architektur ist in diesem Zusammenhang nicht nur wirtschaftlich zielführend.

Das SCC unterstützt diese Entwicklung mit der Forschung und Entwicklung von Private Clouds, derzeit basierend auf Eucalyptus und OpenNebula. Alle Anstrengungen zielen auf die Verbesserung der nicht-funktionalen Eigenschaften wie z.B. Stabilität und Skalierbarkeit sowie die Erweiterung der funktionalen Eigenschaften der Systeme. Darüber hinaus wird im Rahmen der diesjährigen GridKa School ein Tutorial zum Thema Cloud Computing angeboten, in dem die Thematik vorgestellt und in Übungen vertieft wird.

Christian Baun, Viktor Mauch, Dr. Marcel Kunze

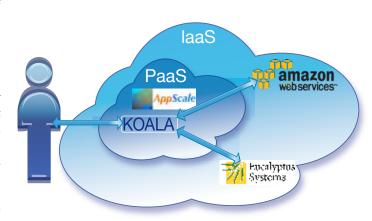


Abbildung 4: KOALA kann in der zu steuernden Cloud installiert werden.

#### Quellen

[BaKuNiTa09] Baun, C.; Kunze, M.; Nimis, J.; Tai, S.: Cloud Computing: Web-basierte dynamische IT-Services. Springer, 2009

[BuYeVe2008] Buyya, R.; Yeo, C. S.; Venugopal, S.: Market-Oriented Cloud Computing: Vision, Hype, and Reality for Delivering IT Services as Computing Utilities. In: HPCC'08: Proceedings of the 2008 10th IEEE International Conference on High Performance Computing and Communications [Nicholas\_Carr\_2008] Carr, N.: The Big Switch: Der große Wandel. Die Vernetzung der Welt von Edison bis Google. Mitp-Verlag, 2008

[BaKu\_iX2010] C. Baun, M. Kunze. Private Clouds im Open Source Umfeld. iX 7/2010. Juli 2010. S.96-99.

[DharminderRattu2009] Rattu, D.: On-Demand Virtual Machine

Allocation for Clouds. Karlsruhe, 2009

[OpenNebula] http://www.opennebula.org

[NASANebula] http://nebula.nasa.gov

[Eucalyptus] http://open.eucalyptus.com

[LxCloud] https://twiki.cern.ch/twiki/bin/view/FlOgroup/LxCloud

[Nimbus] http://www.nimbusproject.org

[KOALA] http://koalacloud.appspot.com/

[KOALACode] http://code.google.com/p/koalacloud/

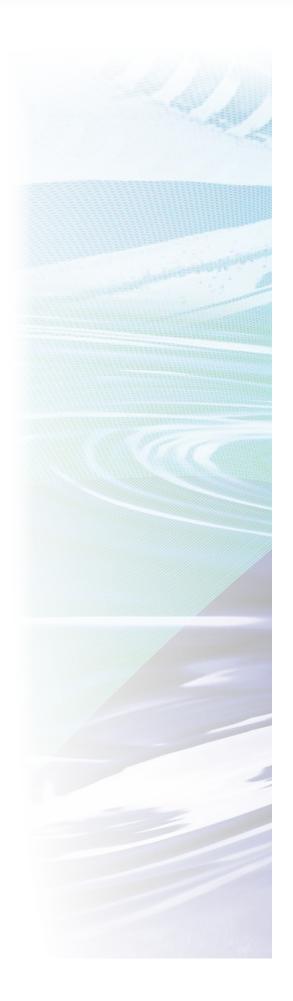
[TilesAtHome] http://wiki.openstreetmap.org/wiki/Tiles@home

[OpenStreepMap] http://openstreetmap.org/

[dsa-research] http://dsa-research.org/

[ucm] http://www.ucm.es/

[reservoir] http://www.reservoir-fp7.eu/



#### Das SCC stellt sich vor

In dieser Ausgabe: Die Abteilung Scientific Computing Labs (SCL)

Frank Schmitz ist Leiter der Abteilung Scientific Computing Laboratories (SCL). Der Diplom-Mathematiker wurde 1986 als Nachwuchswissenschaftler am ehemaligen Kernforschungszentrum Karlsruhe angestellt und widmete sich dem Aufgabenfeld HPC (High Performance Computing) hauptsächlich mit Fokus auf die Anwenderunterstützung, speziell im Bereich Numerik und Parallelisierung.

Bis 2002 war er als Gruppenleiter für die Anwendungsunterstützung und seit 2002 als Abteilungsleiter für die Grid-Nutzung von HPC, für die HPC-Systeme im Forschungszentrum und für die Anwendungsunterstützung verantwortlich.

Seit Oktober 2009 leitet er am SCC die Abteilung SCL, die sowohl die Teams der Simulation Laboratories (SimLabs) als auch das Cross Sectional Team umfasst.



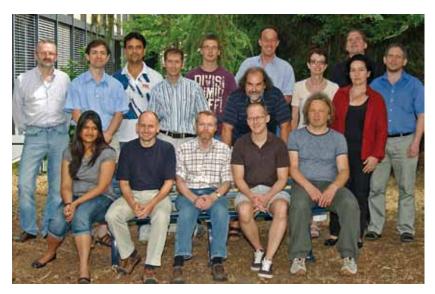
Foto: Privat



Foto: Privat

Dr. Olaf Schneider ist promovierter Mathematiker und wurde 2003 am ehemaligen Forschungszentrum Karlsruhe angestellt, wo er zunächst im Bereich Anwendungsunterstützung in der damaligen Abteilung Hochleistungsrechnen tätig war. Von 2004 bis 2009 leitete er das F&E-Projekt CampusGrid. Darüber hinaus beschäftigte er sich mit der Integration von HPC-Ressourcen in das D-Grid.

Diese Erfahrungen brachte er mit der Gründung des SCC ins bwGRiD ein, für das er bis Ende 2009 zuständig war. Seit Anfang 2010 ist er Teamleiter im Simulation Lab Energie und stellvertretender Leiter der Abteilung SCL.



Die Abteilung SCL von links nach rechts: Karl-Heinz Schmidmeier, Dr. Gevorg Poghosyan, Shenan Kalra, Dr. Ivan Kondov, Martin Brieg, Claus-Peter Hugelmann, Frank Schmitz, Dr. Inge Bischoff-Gauß, Dr. Oliver Kirner, Dr. Daniela Piccioni Koch, David Seldner.

Vordere Reihe von links nach rechts: Himani Singla, Dr. Olaf Schneider, Dr. Konstantin Klenin, Dr. Robert Maul, Hartmut Häfner. Foto: Selina Ries Komplexe sowie rechenzeitintensive Simulationen und der Zugriff auf große Datenmengen sind aus fast allen Forschungsbereichen nicht mehr wegzudenken und gewinnen immer mehr an Bedeutung. Die größere Sichtbarkeit hängt damit zusammen, dass Wissenschaftliches Rechnen oder Scientific Computing viele Innovationen erst möglich macht. Dabei spielen High Performance Computing (HPC), Data Intensive Computing (DIC) und numerische Methoden eine wichtige Rolle.

Die Abteilung Scientific Computing Labs (SCL) versteht sich als Bindeglied zwischen den wissenschaftlichen Anwendungen und den Hochleistungs-Infrastrukturen in den Rechenzentren am KIT, in Deutschland und darüber hinaus. SCL unterstützt im Rahmen der Simulation Laboratories (SimLabs) sowie in Zusammenarbeit mit den SCC-Abteilungen Scientific Computing Services (SCS) und Informationsdienste und Datendienste (IDA) Forschungsprojekte der KIT-Institute durch Beratung und Hilfe bei der Nutzung von Ressourcen aus dem HPC- und DIC-Umfeld.

Das neuartige Konzept der SimLabs wird im Rahmen des Helmholtz-Programms "Supercomputing" vom KIT gemeinsam mit dem Forschungszentrum Jülich umgesetzt. Jedes SimLab bildet den Anker einer Anwendungsdisziplin innerhalb der Supercomputing- und Datenzentren SCC und JSC (Jülich Supercomputing Centre). Wissenschaftler des KIT und aus ganz Deutschland finden in den Mitarbeitern der SimLabs passende, mit der jeweiligen Fachsprache vertraute Ansprech-, Diskussions- und Projektpartner.

Aufgabe der SimLabs ist die interdisziplinäre Forschung und Entwicklung, insbesondere die Ertüchtigung der Software wissenschaftlicher Anwendungen zur effizienten Nutzung von Supercomputern, verteilten Systemen und Datenspeichern wie der LSDF (Large Scale Data Facility). In enger Kooperation mit wissenschaftlichen Fachgruppen leisten die SimLabs einen eigenständigen Forschungsbeitrag im Bereich der rechnergestützten Simulation von natur- und ingenieurwissenschaftlichen Phänomenen sowie bei der Entwicklung entsprechender Algorithmen und Werkzeuge. In diesem Umfeld bieten sich interessante Themen für die Vergabe von Diplom- und Doktorarbeiten in Zusammenarbeit mit den Instituten des KIT sowie externen Fachgruppen.

Die SimLabs am KIT sind ausgerichtet auf die vier bestehenden KIT-Zentren Energie, Klima und Umwelt, NanoMikro, Elementarteilchen- und Astroteilchenphysik. Als Verknüpfung zwischen den einzelnen SimLabs ist ein Cross-Sectional Team Enhanced Scalability tätig, welches Fragestellungen der Numerik, Nutzung von internen- und externen Ressourcen, neuartiger Hardware (z.B. GPUs), Programmiersprachen usw. angeht. Dieses Team erbringt auch den SCC-Support für Compiler und andere Programmier-Werkzeuge aus dem HPC-Umfeld. In einer Übergangszeit bis Ende 2011 wird außerdem das OPUSIB-Cluster systemseitig betreut.

#### SimLab Energie

Die Erschöpfung der fossilen Energiequellen und der Klimawandel motivieren Forschungsanstrengungen und Simulationen zur Verbesserung der Energieeffizienz und Sicherheit sowie zur Verringerung der Umweltbelastung. Das SimLab Energie ist ausgerichtet auf Anwendungen aus den im KIT-Zentrum Energie vertretenen Themen Energieumwandlung, erneuerbare Energien, Energiespeicherung und -verteilung, effiziente Energienutzung, Fusionstechnologie, Kernenergie und Sicherheit sowie Energiesystemanalyse. Bedarf für den Einsatz von Höchstleistungsressourcen wie Supercomputern oder der Large Scale Data Facility (LSDF) wird insbesondere in folgenden Bereichen gesehen:

- · Strömung in porösen Medien für Geothermie-Anlagen
- Anwendung geophysikalischer Methoden (z.B. Reflexionsseismik) für Lagerstättenexploration von fossilen Energieträgern, Standortbestimmung für Geothermieanlagen etc.
- · Abschätzung der Auswirkungen von Wasserkraftwerken und anderer energiewirtschaftlicher Wassernutzung auf die Umwelt
- Detaillierte Simulation der Prozesse in konventionellen Kraftwerken und Motoren
- · Simulation des Materialverhaltens in Nuklear-Anlagen
- · Langzeitsicherheitsnachweis für nukleare Endlager
- Sicherheit von Druckwasserreaktoren (Wasserstoffdetonation, Kernschmelze, Staubexplosion) und Leichtwasserreaktoren
- Numerische Simulationen der Syntheseschritte bei der Verarbeitung von Biomasse zu Wasserstoff, Synthesegas und synthetischen Kraftstoffen.

Das SimLab Energie ist am SCC und am Institut für angewandte Informatik (IAI) angesiedelt. Seitens des SCC bestehen außerdem eine besonders enge Kooperationen mit dem Institut für Kern- und Energietechnik (IKET) in den Bereichen Wasserstoff-Ausbreitung und -Verbrennung sowie der chemischen Prozesstechnik. Mit dem Institut für Thermische Strömungsmaschinen ist ein gemeinsames Projekt im Rahmen des bwGRiD geplant, in dem die Kraftstoffeinspritzung in Brennkammern von Flugzeugturbinen untersucht werden soll. Kürzlich initiiert wurde eine Zusammenarbeit des SCC mit dem Geophysikalischen Institut, bei der es um die Simulation seismischer Wellen auf massiv parallelen HPC-Clustern gehen wird.

Teamleiter: Dr. Olaf Schneider Kontakt: olaf.schneider@kit.edu.

#### SimLab Klima und Umwelt

Das SimLab Klima und Umwelt ist, wie auch die anderen SimLabs, in den KIT-Zentren verankert. In der Forschungsgemeinschaft des KIT-Zentrums Klima und Umwelt, das am 1.1.2009 gegründet wurde, sind ca. 500 Wissenschaftler aus 30 Instituten beschäftigt. Deren Arbeitsbereiche umfassen die Gebiete:

- · Atmosphärische Prozesse
- · Wasserressourcen und Wassermanagement
- · Prozesse im Untergrund
- · Technikbedingte Stoffströme
- · Urbane Systeme
- · Risiken und Risikomanagement
- · Klimawandel

Das KIT-Zentrum Klima und Umwelt besitzt somit eine breit gefächerte Expertise bezüglich des aktuell stattfindenden Klima- und Umweltwandels aus naturwissenschaftlicher, technischer und gesellschaftlicher Sicht.

Das SimLab unterstützt diese Disziplinen im Bereich der Entwicklung und Nutzung unterschiedlicher verwendeter Modellsysteme. Der jetzige Schwerpunkt des SimLabs liegt dabei im Bereich der Erdsystemmodellierung. In Kooperation mit unterschiedlichen Instituten werden aktuell Klima-, sowie Chemie-/Klimasimulationen auf globaler und regionaler Skala unterstützt und durchgeführt.

So wird derzeit an speziellen Optimierungen bezüglich einer höheren Skalierbarkeit, einer verbesserten Performance und eines besseren "Load Balancing" gearbeitet (Projekt: "Towards an Exascale Earth System Model", TaxES). Mit diesen Verbesserungen wird die globale Klimamodellierung durch multiskalige Modellierung und Simulation auf vorhandenen und zukünftigen Supercomputern beschleunigt und damit die Vorhersagequalität gesteigert werden.

Ein weiterer Arbeitsschwerpunkt im SimLab ist die Implementierung einer neuen Parametrisierung für die Simulation von Polaren Stratosphärischen Wolken (PSC). Diese PSCs sind mitverantwortlich für den Ozonabbau im polaren Frühling. Daher ist eine realistische Wiedergabe dieser Wolken im Modell für Ozonszenarien eminent wichtig.

Darüber hinaus werden Klima-Langzeitsimulationen für den Zeitraum von 1960 bis 2050 durchgeführt. Diese Simulationen dienen wissenschaftlichen Studien, die sich mit der gegenseitigen Wechselwirkung von Klima und Chemie auseinandersetzen und damit das WMO-Projekt "Chemistry-Climate Model Validation Activity for SPARC" (CCMVal) unterstützen.

In einer weiteren Kooperation werden regionale Klimasimulationen unterstützt. Anwendung findet das regionale Modell des Deutschen Wetterdienstes (DWD). Mit diesen Rechnungen sind sehr hochauflösende Klimasimulationen

für bestimmte Regionen (wie z.B. Mitteleuropa oder der Oberrheingraben) mit horizontalen Auflösungen von bis zu 7 km Gitterabstand möglich.

Geplant ist, sich an hochauflösende Klimarechnungen für die Region Coquimbo im Norden Chiles zu beteiligen (Projektantrag: "High-resolution cadastres of meteorological parameters relevant for the production of renewable energy in the present and near-future climate state", CORFO). Diese Simulationen sollen durchgeführt werden, um Aussagen über die zukünftige Entwicklung der Klimaindizes wie Niederschlag, Temperatur und Windfeld für zukünftige Zeiträume machen zu können. Die Ergebnisse der Szenarienrechnungen sollen als Planungshilfen (Landwirtschaft, Energie, Tourismus, etc.) dienen (Kooperation mit CEAZA, Universidad de La Serena, Chile). Mit der Universidad de La Serena besteht dabei schon eine langjährige Zusammenarbeit. So wurden für die Region Norte Chico in Chile mehrere hochaufgelöste Simulationen durchgeführt, mit deren Hilfe mittlere Windfelder bestimmt wurden, die zur Untersuchung des Potenzials der Windenergienutzung benutzt werden (Projekt: "Evaluación del potencial eólico en la Región de Coquimbo, Chile").

Ebenfalls für die Bewertung der potenziellen Nutzung der Windenergie, werden meteorologische Windkarten durch regionale Simulationen für mehrere Regionen in Thailand erstellt. Dieses Projekt wird dabei in Kooperation mit der Silpakorn University in Nakhon Pathom durchgeführt.

In sehr enger Zusammenarbeit mit Instituten am KIT als auch der Universität Mainz und der DLR in Oberpfaffenhofen wird an einer Kopplung von zwei unterschiedlichen Klimasimulationsanwendungen und der Integration von chemischen Einflussgrößen gearbeitet, die sowohl den globalen als auch regionalen Fokus innerhalb eines Modellsystems befriedigen können.

Teamleiter: Dr. Oliver Kirner Kontakt: oliver.kirner@kit.edu.



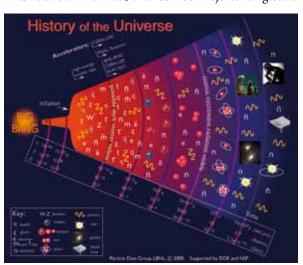
Die wissenschaftliche Zielrichtung des SimLabs Klima und Umwelt ist die Unterstützung der Erdsystemmodellierung. Das Erdsystem umfasst dabei die Atmosphäre, Biosphäre, Lithosphäre, Hydrosphäre, Cryosphäre und Anthrosphäre.

Quelle: Forschungszentrum Jülich

#### SimLab Elementarteilchen- und Astroteilchenphysik

Moderne wissenschaftliche Aufgabenstellungen in der Elementarteilchen- und Astroteilchenphysik (E&A) sind heutzutage ohne die Entwicklung von Software für computergestützte Simulationen unter Verwendung von leistungsfähigen Rechensystemen nur ansatzweise lösbar. Die triviale Nutzung von Rechenressourcen ist zunehmend irrelevant, da die steigende Komplexität von Problemstellungen zu Aufgaben führt, die auf einzelnen Rechnern CPU-Jahre für Simulationen und Analyse benötigen.

Das SimLab E&A ist ausgerichtet, um Forschergruppen am KIT, nationalen und internationalen Einrichtungen mit dem Konzept "S.P.O.R.A.D.I.sche Änderung von Simulationsanwendungen" (Standardisieren, Parallelisieren, Optimieren, Realisieren, Adaptieren, Data, Investigation) vertraut zu machen und zu unterstützen. In Zusammenarbeit mit dem Institut für Kernphysik wird die im Auger-Projekt eingesetzte Anwendung CORSIKA S.P.O.R.A.D.I.sch geändert, um sie auf Supercomputern und verteilten Rechenressourcen für die Lösung komplexerer, theoretischer und experimenteller Probleme in der Astroteilchenphysik einzusetzen. CORSIKA ist für die Simulation von kosmischer Strahlung entwickelt und wird weltweit in mehr als 50 Ländern bei Projekten eingesetzt.



Geschichte des Universums aus der Sicht von Teilchen-Physikern. Quelle: Particle Data Group Barkley Lab.

Das SimLab ist in das KIT-Zentrum Elementarteilchen- und Astroteilchenphysik (KCETA) integriert und arbeitet mit den beteiligten Instituten beim Einsatz von Hochleistungsressourcen in den Bereichen Kosmische Strahlung, Dunkle Materie, Quantenfeldtheorie, Flavorphysik, Quark Materie, Theoretische und Experimentelle Kolliderphysik, Neutrinophysik, Computergestützte Physik zusammen. In Kooperationen auch mit externen Gruppen werden Anwendungen für die phänomenologische Modellierung der Hochenergie- und Teilchen-Physik-Experimente und quantenstatistische Mechanik von Festkörpern weiterentwickelt. Ausbildungsaspekte kommen ebenfalls nicht zu kurz. Derzeit werden drei Praktikanten für die effiziente Nutzung von Multicore-Rechnersystemen für wissenschaftliche Simulationen ausgebildet.

Teamleiter: Dr. Gevorg Poghosyan Kontakt: gevorg.poghosyan@kit.edu.

#### SimLab NanoMikro

Die Berechnung von Eigenschaften nanostrukturierter Materialien ist sehr aufwendig und erfordert den Einsatz von Hochleistungsarchitekturen und skalierbaren Modellen. Hierzu ist die kurz- bis mittelfristige Anpassung und Optimierung von den in diesem Bereich genutzten Programmcodes auf leistungsfähige Multicore und hybride CPU/GPU-Architekturen unerlässlich. Diese neuartigen Rechnerarchitekturen stellen insbesondere für Entwickler Herausforderungen dar, wie etwa das Management der Datenlokalität und der Rechenlastverteilung zu optimieren. Die letzteren Aspekte sind auch in der Querschnittsaktivität der Abteilung ausgeprägt. Andererseits haben neue Materialien eine sehr komplexe Morphologie, die eine Behandlung auf verschiedenen Größen- und Zeitskalen erforderlich macht. Auf der kürzesten Zeit- und Längenskala (Femtosekunden, Nanometer) werden die Strukturen mit atomarer Auflösung modelliert und Eigenschaften werden quantenmechanisch beispielsweise mit Hilfe der Dichtefunktionaltheorie (DFT) berechnet. Auf längeren Skalen werden die Systeme vorwiegend klassisch mit Methoden wie klassische Molekulardynamik (MD) behandelt. Auf einer noch längeren Skala (>Millisekunden, >Mikrometer) müssen großkörnige sowie Kontinuum-Methoden (zum Beispiel Finite Elemente) eingesetzt werden (s. Abbildung 1: Darstellung der verschiedenen Zeit- und Längenskalen, die für die Berechnung von Eigenschaften nano-strukturierter Materialien relevant sind.). Daher ist es ein besonderes Ziel des SimLab NanoMikro, eine Unterstützungsstruktur für mehrskalige Modellrechnungen von komplexen Materialien und biologischen Systemen zu etablieren.



Ein Molekulardraht bestehend aus dem Einzelmolekül Biphenyldithiol (BPD) zwischen zwei Goldelektroden.

Das SimLab NanoMikro hat die Aufgabe, eine Forschungsund Support-Infrastruktur als Schnittstelle zwischen den Hochleistungsressourcen und den Communities der Nanowissenschaft und Materialforschung zur Verfügung zu stellen. Dies schließt die Entwicklung, Erhaltung und den effizienten Einsatz von hauseigen entwickelten sowie externen Simulationscodes auf Hochleistungsrechnern, die Entwicklung neuer effizienter Algorithmen und Bereitstellung integrierter Anwendungen und Lösungen als Mehrwertdienste für die wissenschaftliche Community ein. Thematisch richten sich die Aktivitäten des SimLab NanoMikro am KIT-Zentrum NanoMikro aus.

Die Aktivitäten des SimLab NanoMikro werden vorwiegend im Rahmen gemeinschaftlicher Projekte durchgeführt. In verschiedenen Vorhaben - die vom Land, Bund oder der Europäischen Kommission gefördert werden - arbeitet das SimLab NanoMikro mit Partnern am KIT, in Deutschland und Europa zusammen. Zurzeit werden am SimLab

NanoMikro folgende Projekte durchgeführt:

- · HPC-5: Hochdurchsatz-Proteinstrukturvorhersage auf hybriden und verteilten Höchstleistungs-Architekturen, gefördert von der Landesstiftung Baden-Württemberg. (Siehe SCC-News 2010 / 2, S. 6)
- Mehrskalige Modellierung und Simulation nanostrukturierter Materialien für Energiespeicherung und -umwandlung.

Weitere Kooperationsprojekte mit Gruppen am KIT werden in Kürze anlaufen, andere sind zurzeit in der Antragsphase. In diesen Projekten werden folgende Aspekte behandelt:

- Entwicklung und Bereitstellung einer e-Infrastruktur für nahtlose Integration mehrskaliger Modellrechnungen von Materialien; Demonstration an aktuellen sichtbaren Anwendungen
- · Adaption und Optimierung bestehender Methoden und Codes auf hybride CPU/GPU-Architekturen
- · Entwicklung und optimierte parallele Implementierung neuer Methoden in der Dichtefunktionaltheorie und weiterer Elektronenstruktur-Methoden.

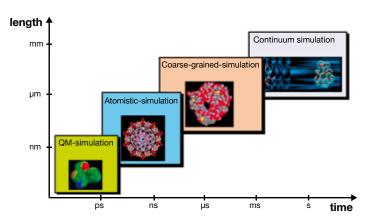


Abbildung 1: Darstellung der verschiedenen Zeit- und Längenskalen, die für die Berechnung von Eigenschaften nano-strukturierter Materialien relevant sind.

Über die eigene Forschung und Entwicklung hinaus betreut das SimLab NanoMikro auf den HPC-Ressourcen am SCC verschiedene wissenschaftliche Simulationscodes, die in diesem Bereich sehr häufig eingesetzt werden. Zu diesen zählen beispielsweise TURBOMOLE, VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package), LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator), GROMACS, Amber und NAMD sowie Software zur Visualisierung (MOLDEN, p4VASP u.a.). Diese Betreuung umfasst Installation, Parallelisierung, Installation, Konfiguration, Dokumentation und Nutzerberatung.

Teamleiter: Dr. Ivan Kondov Kontakt: ivan.kondov@kit.edu.

#### **Cross-Sectional Team Enhanced Scalability**

Als verbindendes Element der SimLabs und als integraler Bestandteil jedes einzelnen SimLabs werden im Cross-Sectional Team Enhanced Scalability die folgenden Arbeiten verstärkt angegangen:

- Einsatz neuartiger Technologie-Lösungen und Untersuchung ihrer Anwendbarkeit im KIT-Umfeld, etwa Multiund Many-Core- (GPUs) Systeme. Dies beinhaltet Tests
  in Zusammenarbeit mit den verschiedenen Abteilungen
  im SCC und interessierten Benutzergruppen
- · numerische Fragestellungen
- · Optimierungs- und Parallelisierungsstrategien
- Bibliotheken und deren Einbeziehung in Simulationsrechnungen
- · Hilfestellungen beim Einsatz von Programmiersprachen für HPC-Systeme
- · MPI und OpenMP
- · Verwendung von Anwendungspaketen
- Fragen der Antragstellung und des Zugangs auf nationale und EU-Hochleistungsressourcen, etwa PRACE, GCS oder LSDF
- · Kursgestaltung- und durchführung sowie Hilfestellungen in der Lehre.

Das Cross-Sectional Team arbeitet überwiegend mit den SimLabs zusammen, aber auch direkte Projekte mit Anwendern werden angestrebt.

Teamleiter: Frank Schmitz Kontakt: frank.schmitz@kit.edu.

Dr. Olaf Schneider, Dr. Oliver Kirner, Dr. Gevorg Poghosyan, Dr. Ivan Kondov, Frank Schmitz

### Shibboleth - Zentrale Authentifikationsinstanz für das KIT

Einführung, Nutzung und Erweiterungen

Neben dem zentralen kit.edu-Account bestehen am KIT weitere Nutzerkonten an den unterschiedlichen Instituten und Einrichtungen für diverse IT-Dienste. Nicht nur unterschiedliche Passwörter, sondern auch die hohe Anzahl an Login-Vorgängen sind dabei keineswegs nutzerfreundlich. Ferner leidet die Sicherheit unter der Vielzahl von Konten, da Nutzer oft gleiche Passwörter für unterschiedliche IT-Dienste verwenden und diese zu jedem IT-Dienst übermittelt werden müssen. Jeder Dienstbetreiber könnte so Passwörter abgreifen, die gleichermaßen für andere IT-Dienste Gültigkeit haben. Um dies zu umgehen, gibt es Entwicklungen wie Shibboleth, die zur zentralen Authentifikation und Attributlieferung sowie als Single Sign-On-Mechanismus eingesetzt werden können.

In der SCC-Abteilung Dienste-Entwicklung und -Integration (DEI) wurde ein so genannter Shibboleth Identity Provider aufgesetzt und des Weiteren Lösungen entwickelt, die es ermöglichen, Shibboleth komfortabel und nutzerfreundlich in die bestehende IT-Infrastruktur des KIT zu integrieren. Mit Unterstützung des Service Managements des SCC (Abteilung ISM) wurden der Shibboleth Identity Provider und die Integrationslösungen des SCC im März 2010 erfolgreich in Betrieb genommen.

Neben zentralen IT-Diensten, die bereits heute mit dem kit.edu-Account zugänglich sind (zum Beispiel das Mitarbeiter-1 und Studierendenportal2, die VPN-Infrastruktur3 uvm.), existieren weitere IT-Dienste mit separaten Nutzerkonten und damit oft auch die Notwendigkeit dedizierter Login-Vorgänge zu deren Nutzung. Zusätzlich müssen von diesen Diensten oft weitere Informationen, so genannte Attribute, über einen Nutzer eingeholt oder erhoben werden, um auf deren Basis Zugriffsentscheidungen treffen zu können. Um dem entgegen zu wirken und als weiteren Schritt in Richtung integriertem Informationsmanagement, hat die SCC-Abteilung Dienste-Entwicklung und -Integration (DEI) für Web-basierte IT-Dienste den Authentifikations- und Attributlieferdienst Shibboleth etabliert, der die Komplexität einer sicheren Authentifikation und Bereitstellung von weiteren Informationen zu den Nutzern eines Dienstes in eine zentrale Komponente verlagert.

#### Vorteile für Dienstbetreiber und Dienstnutzer

Durch die Bereitstellung von Shibboleth können bei Webbasierten Diensten die Implementierung dedizierter Authentifikationen, zu der oft zusätzlich eigenständige Nutzerverwaltungen betrieben werden, und der Zugriff auf Attributdatenbanken, um Zugriffsentscheidungen zu treffen, entfallen. Stattdessen wird auf eine zentrale Instanz zurückgegriffen, den Shibboleth Identity Provider (IdP), über den die Nutzerauthentifikation abgewickelt wird. Dieser liefert nach erfolgreicher Überprüfung des Nutzernamens und Passworts die passenden Attribute an den gewünschten IT-Dienst, der darauf basierend eine Zugriffsentscheidung für den jeweiligen Nutzer fällen kann. Darüber hinaus ermöglicht die Dienstin-

tegration in die Shibboleth-Infrastruktur einen so genannten Single Sign-On. Dadurch kann eine einmal für einen Dienst authentifizierte Person weitere Dienste innerhalb von 24 Stunden oder bis zum Schließen des Browsers ohne erneutes Einloggen nutzen.

Über den IdP des KIT können Mitarbeiter und Studierende sowie Gäste der KIT-Bibliothek bereits heute ortsunabhängig auf diverse interne und externe Dienste zugreifen. Hierzu zählen insbesondere Verlagsdienste, deren Inhalte die KIT-Bibliothek lizensiert hat, wie zum Beispiel SpringerLink<sup>4</sup>, MetaPress<sup>5</sup> und Regionale Datenbank-Information Baden-Württemberg (ReDI)<sup>6</sup> sowie viele weitere Web-basierte IT-Dienste. Während heute noch einige dieser Dienste über die standortabhängige IP-Authentifikation aus dem Campusnetz ohne Shibboleth-Login verfügbar sind, ist durch den IdP des KIT nun auch ein externer Zugriff außerhalb des Campusnetzes möglich. Zudem planen die Verlagsdienste die standortabhängigen Zugangswege mittelfristig abzuschalten und auch innerhalb der Campusnetze auf einen reinen Shibboleth-Zugang zu setzen - das KIT ist mit der etablierten Shibboleth-Infrastruktur diesbezüglich für die Zukunft gerüstet.

#### Funktionsweise und Nutzung von Shibboleth

Zur Nutzung des IdP wird beim Web-basierten Dienst ein so genannter Shibboleth Service Provider (SP) installiert und konfiguriert. Diese Softwarekomponente ist für alle gängigen Betriebssysteme und Webserver verfügbar sowie oft modular und mit wenig Aufwand hinzu konfigurierbar (z.B. Apache Webserver: mod\_shib). Der Aufwand zur Installation und für eine anschließende Wartung des entsprechenden Moduls ist dabei wesentlich geringer als der Aufbau und Betrieb einer eigenständigen Benutzer-/ Passwortverwaltung pro IT-Dienst.

Möchte ein Nutzer auf den durch Shibboleth geschützten Dienst zugreifen, leitet ihn das SP-Modul zum IdP des KIT, bei dem sich der Nutzer einloggen muss, bevor er authentifiziert und ausgestattet mit den passenden Attributen wieder zum IT-Dienst zurückgeleitet wird. Für den Nutzer bleibt die Umleitung über den IdP weitestgehend transparent. Alternativ kann vom SP auch zunächst auf einen so genannten

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>https://intra.kit.edu <sup>2</sup>https://studium.kit.edu

<sup>4</sup>http://springerlink.com/institutional-login.aspx 5http://www.metapress.com/institutional-login.aspx

<sup>3</sup>https://vpn.kit.edu 6http://www-fr.redi-bw.de/shib/login.php

Discovery Service umgeleitet werden, der es ermöglicht, aus einer Liste mehrerer IdPs verschiedener Einrichtungen den passenden auszuwählen. Dies erlaubt die Öffnung eines IT-Dienstes für Nutzer anderer Einrichtungen, die ebenfalls einen IdP betreiben. Der IdP des KIT

ren wurde ein Extended Login Handler entwickelt, der es ermöglicht, die IP-Adresse eines Nutzers in die Authentifikationsentscheidung mit einzubeziehen. Diese Optimierung war notwendig, um den Anforderungen an die Authentifikation von Gästen der KIT-Bibliothek



Abbildung 1: Nutzerauthentifikation über Shibboleth.

ist für solche Kollaborationen in den föderativen Verbund des DFN-Vereins (DFN-AAI) integriert, in dem zurzeit fast 60 Einrichtungen verzeichnet sind. Abbildung 1 visualisiert den Ablauf einer Shibboleth-Authentifikation mit einer Umleitung über einen Discovery Service.

#### Individuelle Anpassungen für das KIT

Um den IdP in die bestehende IT-Infrastruktur des KIT zu integrieren, wurden in der Abteilung DEI diverse Module als Erweiterungen des IdP implementiert. Hier entstand in Zusammenarbeit mit dem Lehrstuhl Dezentrale Systeme und Netzdienste (DSN) von Prof. Dr. Hannes Hartenstein zunächst der so genannte JaaS Dispatcher. Dieses Modul ermöglicht eine performante Anbindung mehrerer Account-Datenbasen an einen IdP über JaaS7. Dies war zuvor nur mit einer erheblich höheren Latenz beim Authentifikationsprozess möglich. Die Erweiterung wurde unter anderem über die DFN-Web-Seiten anderen Einrichtungen zugänglich gemacht8. Des Weitenachzukommen und kann nun von SPs des KIT optional genutzt werden. Die Erfahrungen des Aufbaus der Shibboleth-Infrastruktur des KIT und der zuvor genannten Erweiterungen des IdP sowie das Ergebnis der Entwicklung erwähnter Module wurden im Mai 2010 auf dem 3. DFN Forum Kommunikationstechnologien in Konstanz vorgestellt [1].

Zusätzlich wurde ein weiteres Modul implementiert, das ein anonymisiertes Logging der Anmeldevorgänge ermöglicht. Aus datenschutzrechtlichen Gründen ist die Anonymisierung der Log-Dateien wesentlich für den Betrieb eines IdP. Die grafisch aufbereiteten, durch dieses Modul generierten Log-Dateien aus der Einführungsphase des IdP sind in Abbildung 2 dargestellt. Hier sind die steigende Anzahl der Login-Vorgänge pro Tag aufgetragen.

Über ein weiteres Modul kann IT-Diensten bei einer Nutzerauthentifikation statt einer Auswahl von Nutzerattributen alternativ auch lediglich eine so genannte

Persistent-ID zur Verfügung gestellt werden. Diese ermöglicht einen anonymen Zugriff auf IT-Dienste, die selbst Daten zu den Nutzern erheben. Anhand dieser ID können der Nutzer bei einer erneuten Authentifikation wiedererkannt und die dienstintern erhobenen Daten identifiziert werden

Um auch Nutzern von Gastkonten der KIT-Bibliothek den Zugang zu verschiedenen IT-Diensten über Shibboleth zu gewähren, wurde in der SCC-Abteilung DEI in Zusammenarbeit mit der IT-Abteilung der KIT-Bibliothek ein Modul entwickelt, das eine XML-basierte Authentifikationsschnittstelle in die Shibboleth-Infrastruktur integriert und zusätzlich den Zugriffsort des Gastnutzers ermittelt. Dies ist notwendig, da Gäste aus lizenzrechtlichen Gründen auf verschiedene Dienste nur aus den Räumen der KIT-Bibliothek zugreifen dürfen.

Sowohl die Vorbereitung des IdP für ein Single Logout für alle angeschlossenen SP als auch die in DEI konzipierte Hochverfügbarkeit des IdP durch Terracotta9 und den Einsatz des F5 Big IP-Loadbalancers10 des SCC stellen abschließend die Zukunftsfähigkeit der Installation sowie die Vorbereitung auf ansteigende Last durch eine Vielzahl von Nutzerauthentifikationen durch den sich derzeit entwickelnden Roll-out auf weitere IT-Dienste sicher. Die integrativen Erweiterungen sowie das Konzept des hochverfügbaren IdP-Clusters wurden unter anderem auf der 52. DFN Betriebstagung im März 2010 in Berlin vorgestellt.

#### Referenzinstallation für andere Einrichtungen

Mit der Installation und Integration einer Shibboleth-Infrastruktur wurde am KIT die Möglichkeit geschaffen, Web-basierte IT-Dienste mit nur einem Account und einmaligem Login pro Browser-Sitzung zu nutzen. Shibboleth stellt eine sichere, nutzerfreundliche und für Bertreiber von IT-Diensten komfortable Möglichkeit der Authentifikation dar und kann Attribute aus den Identitätsmanagementsystemen des KIT und SCC zur Verfügung stellen. Durch einen derzeit fortschreitenden Roll-out auf weitere zu integrierende IT-Dienste,

<sup>&</sup>lt;sup>7</sup>Java Authentication and Authorization Service

<sup>8</sup>https://www.aai.dfn.de/dokumentation/identity-provider/tools/

<sup>9</sup>http://www.terracotta.org/ 10http://www.f5.com/products/big-ip/

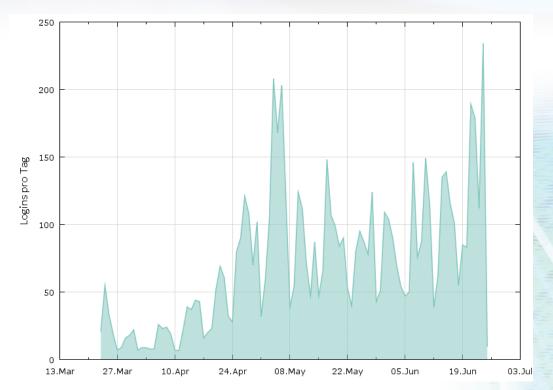


Abbildung 2: Ansteigende Nutzlast der Shibboleth-Infrastruktur am KIT in der Einführungsphase.

erhöht sich die Nutzung der Shibboleth-Infrastruktur deutlich. Insbesondere wird derzeit intensiv daran gearbeitet, das neue Campus Management-System sowie den Softwareshop asknet in die Shibboleth-Infrastruktur zu integrieren. Durch die Investition in robuste Konzepte und Erweiterungen in den Bereichen Geschwindigkeit, Datenschutz, Komfort und Hochverfügbarkeit sowie den Einbezug des Service Managements des SCC, stellt die Shibboleth-Infrastruktur des KIT bereits heute eine Referenz-Installation für andere Einrichtungen dar.

Sebastian Labitzke, Michael Simon, Dr. Martin Nußbaumer

[1] "Integrierter Shibboleth Identity Provider auf Basis verteilter Identitätsdaten"
 S. Labitzke, M. Simon, J. Dinger, In: Lecture Notes in Informatics (LNI - Proceedings, GI-Edition, 3. DFN Forum Kommunikationstechnologien), ISBN: 978-3-88579-260-4, Kapitel 3, Seiten 73-82, Konstanz, Deutschland, Mai 2010

# SCC auf der Internationalen Supercomputing Konferenz "ISC 2010" in Hamburg

Die jährlich stattfindende International Supercomputing Conference (ISC) ist der bedeutendste Treffpunkt für Anbieter und Anwender von High Performance Computing (HPC) in Europa. Fachleute aus anerkannten Supercomputing-Zentren wie auch führende Hard- und Softwarehersteller präsentieren dort modernste Anwendungen, Architekturen und Trends. Auch das SCC war in diesem Jahr wieder mit einem Stand vertreten und stellte innovative Projekte und Infrastrukturlösungen vor.

Höhepunkt ist traditionell die Bekanntgabe der neuesten Liste der 500 leistungsfähigsten Rechner in der Welt (s. Tabelle 1). Neben dem Vortragsprogramm der Konferenz ist insbesondere die parallel stattfindende Messe mit Firmen und Forschungseinrichtungen aus aller Welt ein Besuchermagnet.

Mehr als 2.000 Teilnehmer haben die ISC2010, die vom 30.5. bis zum 3.6.2010 in Hamburg stattfand, besucht. Darüber hinaus waren in diesem Jahr 150 Aussteller auf der Messe vertreten.

Das SCC präsentierte Forschungsarbeiten aus den Bereichen High Performance Computing (HPC) sowie Grid und Cloud Computing. Ein weiteres Schwerpunktthema waren die am SCC angesiedel-

ten Simulation Laboratories (SimLabs), die neuartige Schnittstellen zwischen Anwendern und Betreibern von Hochleistungsrechnern bilden. "Aufgabe der Simlabs ist insbesondere die Ertüchtigung von Software zur effizienten Nutzung von Supercomputern und verteilten Systemen im Bereich der interdisziplinären Forschung und Entwicklung", so Dr. Olaf Schneider, Leiter des SimLabs Energie.

Auch die vorgestellten Konzeptionen zur Speicherung und Verwaltung großer Datenmengen, die derzeit im Bereich der Large Scale Data Facility (LSDF) am SCC realisiert werden, stießen auf reges Interesse der Besucher. "Der Aufbau der LSDF-Infrastruktur beinhaltet nicht nur die Bereitstellung von riesigen Mengen an Datenspeichern und Compute-Ressourcen, sondern auch neue Forschungsansätze. Dabei stehen insbesondere der hochperformante und sichere Zugriff auf die Facility, automatisierte Workflows, Langzeitarchivierung sowie die Entwicklung komplexer Bildverarbeitungsalgorithmen und Schnittstellen im Mittelpunkt", erklärt Serguei Bourov vom SCC. Zu den Nutzern der LSDF, die weltweit für die Systembiologie zur Verfügung steht, zählt u. a. das Institut für Toxikologie und Genetik (ITG) am KIT, das mit Hilfe von automatischen Mikroskopen Untersuchungen an den Embryonen der Zebrabärblinge

Rang	Standort	Modell / Hersteller
1	Oak Ridge National Laboratory United States	Jaguar - Cray XT5-HE Opteron Six Core 2.6 GHz Cray Inc.
2	National Supercomputing Centre in Shenzhen (NSCS) China	Nebulae - Dawning TC3600 Blade, Intel X5650, NVidia Tesla C2050 GPU Dawning
3	DOE/NNSA/LANL United States	Roadrunner - BladeCenter QS22/LS21 Cluster, PowerXCell 8i 3.2 Ghz / Opteron DC 1.8 GHz, Voltaire Infiniband IBM
4	National Institute for Computational Sciences/University of Tennessee United States	Kraken XT5 - Cray XT5-HE Opteron Six Core 2.6 GHz Cray Inc.
5	Forschungszentrum Juelich (FZJ) Germany	JUGENE - Blue Gene/P Solution

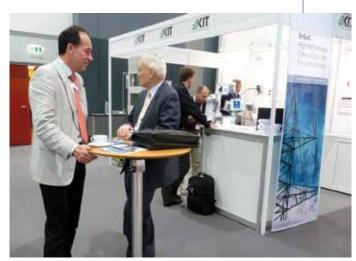
Tabelle 1

Ein Highlight der jährlichen ISC ist die Bekanntgabe der neuesten Liste der 500 leistungsfähigsten Rechner in der Welt. Die Tabelle listet die ersten 5 Platzierungen der aktuellen Liste (Auszug aus http:// www.top500.org/ lists/2010/06).

durchführt. Die dabei in großen Mengen anfallenden Bilddaten werden in der LSDF gespeichert und verwaltet. Als vielbeachtetes Exponat präsentierte das SCC in diesem Zusammenhang einen Rechnerschrank, in dem Aquarien mit Zebrafischen standen.

Passend zum Wissenschaftsjahr "Die Zukunft der Energie" wurde darüber hinaus der neu gegründete Verein "Energy Solution Center (EnSoC)" vorgestellt, der es sich zur Aufgabe gemacht hat, Innovationen in der Energiewirtschaft mit Hilfe des HPC zu fördern. Außerdem zeigte das SCC Arbeiten aus dem Simulation Lab Energie sowie eine Gegenüberstellung des Stromverbrauchs aktueller Computerprozessoren.

Auch im Konferenzprogramm war das KIT mit Beiträgen vertreten. Prof. emeritus Dr. Ulrich Kulisch konnte mit dem Thema "Very Fast & Exact Accumulation of Products" sogar den Preis für das beste Poster gewinnen. Prof. Dr. Jan-Philipp Weiss, Leiter der mit dem SCC und Hewlett-Packard (HP) assoziierten Shared Research Group (SRG) "New Frontiers in High Performance Computing Exploiting Multicore and Coprocessor Technology" am KIT, organisierte zusammen mit Prof. Dr. Vincent Heuveline, Leiter des Instituts Engineering Mathematics and Computing Lab (EMCL) am KIT, eine so genannte Birds-of-a-Feather (BoF) Session zum Thema "The New Era of Heterogeneous Computing".



Schwerpunktthemen des SCC-Standes auf der ISC2010 waren HPC, SimLabs, Grid und Cloud Computing sowie LSDF. Foto: Doris Heathman

(red)

#### KIT-Lizenzen für Intelund PGI-Compilersuites

Das SCC hat mehrere Lizenzen der Intel- und der PGl-Compilersuite beschafft. Beide Compilersuites stehen für die Betriebssysteme Linux, Windows XP, Windows 7 und MacOS zur Verfügung und können von allen Mitarbeitern des KIT über einen Lizenzserver des SCC genutzt werden. Dies bedeutet, dass alle Mitarbeiter des KIT die Intel- oder PGI-Compilersuite lokal installieren können und keine eigenen Lizenzen benötigen. Dabei ist die Nutzung der Lizenzen für alle Mitarbeiter des KIT ab sofort kostenfrei. Für die technische Umsetzung des Zugriffs auf den Lizenzserver des SCC wenden Sie sich bitte an Hartmut Häfner, Tel. -4869, E-Mail: hartmut.haefner@kit.edu.

(red)

#### Einführungskurs LaTeX

LaTeX ist ein Makropaket zu TeX, mit dessen Hilfe auf relativ einfache Weise Dokumente mit umfangreichen mathematischen Formeln, Abbildungen und Querverweisen erstellt werden können.

In der Zeit vom 20.9. bis 24.9.2010 findet ein Einführungskurs in LaTeX statt. Ziel des Kurses ist es, LaTeX kennenzulernen und das Erstellen von Texten mit Hilfe von LaTeX zu erlernen. Die Übungen zum Kurs finden wahlweise unter Windows oder Linux unter Verwendung einer für LaTeX geeigneten Entwicklungsumgebung statt. Für die Teilnahme am Kurs sind Vorkenntnisse nicht erforderlich. Die im Kurs erworbenen Kenntnisse können bei der Textverarbeitung an PCs ebenso angewendet werden wie an anderen Rechnern.

Kursbeginn: Montag, 20.9.2010, 9.00 Uhr Kursende: Freitag, 24.9.2010, 17.00 Uhr

Ort: SCC-Süd, Raum 217, Übungen im Raum 114.2

Anmeldung: BIT8000

#### Behandelte Themen:

- Allgemeine Informationen über TeX und LaTeX
- Genereller Aufbau und Gliederung eines Dokumentes
- Die vordefinierten Dokumenttypen und Änderungen des Layouts
- Standardschriften und die Verwendung zusätzlicher Schriften
- Silbentrennung, Umlaute und scharfes S
- Listen, Tabellen, Zitate, Fußnoten
- Einfache Grafiken
- Inhaltsverzeichnis, Literaturverzeichnis und weitere Verzeichnisse
- Setzen mathematischer Formeln.

Der Kurs findet täglich in den Zeiten 9.00 bis 12.00 Uhr und 14.00 bis 17.00 Uhr im Raum 217 (Vorträge) bzw. 114.2 (L-Pool, Übungen) des SCC-Süd statt. Die Teilnehmerzahl ist auf 25 begrenzt. Zur Anmeldung liegen vorbereitete Listen beim BIT 8000 im Foyer des SCC-Süd aus (Tel. -8000, E-Mail: bit8000@scc.kit. edu).

Dr. Klaus Braune

#### Weitere Informationen

zu TeX und zum LaTeX-Kurs unter <a href="http://www.scc.kit.edu/produkte/3967.php">http://www.scc.kit.edu/produkte/3967.php</a>

#### Literatur

F. Mittelbach, M. Goossens, J. Braams, D. Carlisle, C. Rowley: Der LaTeX-Begleiter, 2. überarbeitete und erweiterte Auflage, Pearson Studium, 2005, ISBN 3-8273-7166-X

- L. Lamport: The LaTeX Document Preparation System, 2. Auflage, AddisonWesley USA, 1994, ISBN 0-201-52983-1
- H. Partl, E. Schlegl, I. Hyna: LaTeX-Kurzbeschreibung, im Rahmen der verschiedenen TeX-Installationen als LaTeX-Datei verfügbar.



Steinbuch Centre for Computing (SCC) 76128 Karlsruhe
Tel: 0721/608-3754 oder 07247/82-5601
E-Mail: scc@kit.edu

www.scc.kit.edu