



WESTFÄLISCHE
WILHELMS-UNIVERSITÄT
MÜNSTER

> WWU-HPC

Überlegungen zur zukünftigen Entwicklung



WWU-HPC

Überlegungen zur zukünftigen Entwicklung

R. Vogl, B. Süselbeck

Dezember 2007

Das ZIV betreibt seit dem Jahre 2003 ein Rechnersystem (ZIVCluster) für Anwendungen im Bereich des High Performance Computing (HPC). Zur Zeit laufen die ersten Vorbereitungen zur Beschaffung eines Nachfolgesystems. Dies soll zum Anlass genommen werden, einige Überlegungen zur zukünftigen Entwicklung des HPC innerhalb der WWU Münster zusammenzustellen.

Vorüberlegungen

Das oben erwähnte Cluster-System des ZIV, das hauptsächlich von Anwendern aus den Naturwissenschaften genutzt wird, ist nicht das einzige System innerhalb der WWU, das für Aufgaben im Bereich des HPC zur Verfügung steht. So hat die IVV Naturwissenschaften im Mai 2007 selbst ein aktuelles HPC-System in Betrieb genommen. Weitere derartige Systeme stehen in Kliniken der Medizin und verschiedenen anderen Instituten der Universität. HPC findet in der Universität Münster also im Wesentlichen auf der Ebene der Institute und Fachbereiche statt und wird noch nicht als Baustein in der strategischen Ausrichtung der Universität als Ganzes gesehen.

Auf nationaler Ebene hat sich die Situation inzwischen geändert. Kürzlich wurde beschlossen, das Gauss Centre for Supercomputing zu schaffen, um im internationalen Vergleich wettbewerbsfähig zu werden. Neben diesem Superzentrum (Ebene 0) sollen in einer weiteren Ebene 1 10 regionale Zentren sehr hoher Leistungsfähigkeit und in einer Ebene 2 100 lokale Zentren mit hoher Leistungsfähigkeit etabliert werden. Als große Universität muss die WWU innerhalb dieser Versorgungspyramide mindestens in der Ebene 2 deutlich präsent sein.

Um die WWU innerhalb dieses nationalen Konzepts zu positionieren, scheint es angeraten - insbesondere im Vorfeld größerer Beschaffungen - über innovative Konzepte für das HPC innerhalb der Universität nachzudenken.

Als Hauptproblem der momentanen Situation erscheint weniger der Betrieb unterschiedlicher Systeme (eine ausgewogene Architekturvielfalt ist beim breiten Einsatzspektrums des HPC durchaus von Vorteil), sondern die eher mangelnde Kooperation der beteiligten Einrichtungen.

Deshalb ist es wichtig, eine Bündelung von Kompetenzen und Ressourcen in fachlicher, personeller und finanzieller Hinsicht vorzunehmen, um das Wissenschaftliche Rechnen in der Zukunft zu einem schlagkräftigen Instrument der Forschung zu machen. Dabei ist zu beachten, dass dieses Ziel nicht durch bürokratische Hürden und organisatorische Zwänge konterkariert wird.

Als Konsequenz dieser Überlegungen wird vorgeschlagen, ein Kompetenzzentrum für Wissenschaftliches Rechnen (**Arbeitstitel: CoCoS: Competence for Computing in Science**) innerhalb der WWU zu schaffen.

Partner von CoCoS

CoCoS wird als **virtuelles** HPC-Zentrum konzipiert und betrieben. Dadurch lässt sich die Schaffung neuer Organisationsstrukturen vermeiden. Getragen wird **CoCoS** vom ZIV zusammen mit den IVVen der traditionell am HPC beteiligten Fachbereiche (Mathematik und Informatik, Physik, Chemie, Biologie, Geowissenschaften, Medizin, Wirtschaftswissenschaften) unter Einbeziehung von Instituten und Lehrstühlen, die im Bereich des HPC in der Forschung aktiv sind. Die einzelnen Partner bringen dabei ihre jeweiligen Stärken ein, z.B. im Betrieb von Systemen oder in der Entwicklung paralleler Algorithmen, um nur zwei Beispiele zu nennen. Die Mitarbeit in **CoCoS** ist prinzipiell für alle Mitgliedern der Universität (es zeichnen sich auch erste Anforderungen aus den Geisteswissenschaften in der Textforschung ab) möglich, sollte jedoch auch offen sein für externe Partner aus der Forschung, z. B. Max-Planck-Institut.

Aufgaben von CoCoS

Das virtuelle HPC-Zentrum **CoCoS** soll in erster Linie als Plattform zur Organisation, zum Betrieb und Erfahrungsaustausch sowie zur Weiterentwicklung des Wissenschaftlichen Rechnens innerhalb der WWU dienen. Zur Erfüllung dieser Ziele sind folgende Aufgaben wahrzunehmen.

Bereitstellung einer räumlichen Infrastruktur

Rechnersysteme, die für Aufgaben im Bereich des Wissenschaftlichen Rechnens verwendet werden, stellen in der Regel hohe Anforderungen an Raumbedarf und Raumausstattung. **CoCoS** plant - nach Klärung des Bedarfs - mittelfristig die Bereitstellung geeigneter Räumlichkeiten für Rechnersysteme, die für Anwendungen aus dem Bereich des HPC genutzt werden. Dabei sind folgende Kriterien eines Rechenzentrumsbetriebs zu berücksichtigen:

- ausfallsichere, hinreichend dimensionierte Stromversorgung
- leistungsfähige, redundant ausgelegte Klimatisierung
- Anbindung an interne und externe Netzwerkinfrastrukturen
- Zugangskontrolle
- gebäudetechnische Sicherheit

Dieses Konzept sollte ausdrücklich mandantenfähig ausgelegt sein, damit auch einzelne Institute die Möglichkeiten besitzen, aktuellen Entwicklungen im HPC zu folgen und eigene Systeme zu betreiben ohne dabei durch langwierige bautechnische Planungen in den Gebäuden der Fachbereiche, z. B. für den Einbau von Klimaanlage, behindert zu werden.

Betrieb von HPC-Systemen

Im Rahmen von **CoCoS** werden zentrale Systeme der WWU für das HPC betrieben und allen Fachbereichen und Instituten der WWU das entsprechende Spezialwissen zur Verfügung gestellt. Dabei geht es um die Inbetriebnahme, Wartung und Überwachung der Hardware, wozu neben den eigentlichen Rechnersystemen insbesondere auch die speziellen im HPC verwendeten Netzwerkinfrastrukturen und parallelen Speichersysteme gehören.

Kompetenz zu den auf den HPC-Servern eingesetzten Betriebssystemen wird ebenfalls in **CoCoS** gebündelt, einschließlich darauf aufbauender systemnaher Konzepte wie Sicherheit, Benutzerverwaltung und Batchsystem und die zugehörigen organisatorischen Regelungen.

Neben dem Betrieb der aktuell für die Produktion installierten Systeme lassen sich in diesem Umfeld auch leicht Testumgebungen zu verschiedenen Zwecken, wie Evaluation neuer Hardware- und Softwarekonzepte, installieren und einem breiten Anwenderkreis zur Verfügung stellen.

An dieser Stelle sollte ausdrücklich betont werden, dass **CoCoS** nicht für eine monolithische Rechnerarchitektur stehen soll, sondern den Anwendern hohe Flexibilität bei der Umsetzung fachbezogener Konzepte lässt.

Software für Wissenschaftliches Rechnen

Ohne leistungsfähige Software lässt sich ein HPC-System nicht sinnvoll betreiben. Deshalb übernimmt **CoCoS** die Planung, Beschaffung, Installation, Wartung und Verwaltung von entsprechenden Softwaresystemen. Hier wären insbesondere zu nennen:

- Werkzeuge zur Softwareentwicklung, wie Compiler, IDEs, Profiler und Debugger
- numerische Programmbibliotheken für serielles und paralleles Rechnen
- Anwendungssysteme für numerisches und symbolisches Rechnen
- Systeme zur Analyse großer Datenmengen (Data Mining)
- Grafische Systeme zur Visualisierung von Daten
- Spezialanwendungen für bestimmte Anwendungsgebiete

In der Regel handelt es sich dabei um sehr kostenintensive Software, da für sie kein Massenmarkt existiert. Durch die zentrale Beschaffung derartiger Produkte im **CoCoS**-Verbund können deutlich Kosten gespart werden. Dieses Konzept hat sich in der Vergangenheit bereits gut bewährt, z.B. durch den Abschluss von CoCoS

Campuslizenzen und die Beteiligung der WWU an Landeslizenzen. Es bietet aber noch reichlich Potenzial für Verbesserungen.

Ausbildung

Der Bereich des Wissenschaftlichen Rechnens ist einer der wenigen Bereiche, wo Anwender neben der Nutzung vorgegebener Produkte auch selbst noch intensiv Programmierarbeit leisten müssen. Gerade das Paradigma des Parallelen Rechnens stellt Programmierer vor große Herausforderungen.

Daher wird es für **CoCoS** eine der Hauptaufgaben sein, entsprechende Ausbildung anzubieten. Dies darf sich nicht in Kursen erschöpfen, die die Bedienung der installierten Systeme erläutern, sondern muss auch eine speziell an die Bedürfnisse des HPC orientierte Ausbildung in der Programmierung sowohl auf theoretischer wie auch auf praktischer Ebene umfassen. Dabei sind neben den zentralen Einrichtungen ausdrücklich auch die Fachbereiche mit ihrem wissenschaftlichen Fundament gefragt.

Um eine gründliche Ausbildung im Bereich des Wissenschaftlichen Rechnens zu gewährleisten, sind entsprechende Themenkataloge und Curricula zu entwickeln. Bisher werden einschlägige Kurse häufig als optionale Veranstaltung angeboten. Zur Erhöhung der Motivation von Studierenden an entsprechenden Lehrveranstaltungen teilzunehmen, sollte überlegt werden, wie sie in die neuen Studiengänge mit den Abschlüssen Bachelor und Master als Teil des Pflichtprogramms integriert werden können mit der Möglichkeit, Leistungsnachweise zu erbringen. Mittelfristig wäre zu prüfen, ob **CoCoS** eine Basis bilden könnte, um innovative Studiengänge, wie etwa einen Master of Scientific Computing an der WWU zu etablieren, so wie es bereits an anderen Universitäten realisiert ist.

Eine Intensivierung der Ausbildung im Bereich des Wissenschaftlichen Rechnens ist auch aus einem anderen Grund dringend erforderlich. Konzepte des parallelen Programmierens sind in naher Zukunft nicht nur auf Hochleistungsrechnern sinnvoll, sondern auf jedem Arbeitsplatz. Dies liegt in der immer schnelleren Verbreitung von Prozessoren mit Multikernen auch auf Arbeitsplatzrechnern. Die Firma Intel hat dies (natürlich nicht ganz uneigennützig) unter dem Slogan „parallel or parish“ zusammengefasst. In diesem Sinne finden sich Konzepte des HPC zunehmend auch auf dem persönlichen Arbeitsplatz.

Beratung

Da die sinnvolle Nutzung von HPC nicht nur den Einsatz spezieller Hardware erfordert, sondern auch Programmierkenntnisse oder die intensive Einarbeitung in Anwendungssysteme verlangt, ist der Einstieg in das HPC für Anfänger schwierig und häufig abschreckend.

Beratung wird vielfach nur für Probleme geleistet, die sich auf die technische und organisatorische Nutzung der unterschiedlichen Systeme beziehen. Eine inhaltliche Beratung erfolgt jedoch nicht, da die Mitarbeiter, die für die organisatorischen und betrieblichen Abläufe verantwortlich sind, nicht in HPC-Projekte von der inhaltlichen Seite her eingebunden sind.

Die in den Fachbereichen vorhandene inhaltliche HPC-Kompetenz ist andererseits oft von temporärer Natur, da viele Wissenschaftler die Universität nach einer gewissen Zeit wieder verlassen.

CoCoS könnte helfen, diese Diskrepanz durch Aufbau von Beratungskapazitäten zu überwinden, beispielsweise durch die Einrichtung von Sprechstunden, die Anwendern, die dringend HPC-Möglichkeiten nutzen müssen, aber traditionell nicht so eng mit der Materie vertraut sind, eine erste Anlaufstelle zu bieten. Besondere der Bereich der Life Sciences wäre hier zu nennen, wo immer mehr Bedarf an HPC aufkommt.

Beratung kann innerhalb von **CoCoS** auf verschiedenen Ebenen stattfinden. Ein typisches Beispiel wäre die Umstellung von seriellen Programmen auf unterschiedliche parallele Programmiermodelle. Ein anderes Beispiel ist die Unterstützung bei der Portierung von Anwendungen auf andere Architekturen.

Kommunikation

CoCoS bildet innerhalb der WWU die Plattform für wissenschaftliches Rechnen. Dazu gehört die Bereitstellung eines Portals für entsprechende wissenschaftliche und organisatorische Informationen im Internet. Hierbei wären sicherlich die im Projekt MIRO gewonnenen Erfahrungen sehr hilfreich und könnten als Basis für eine Umsetzung dienen.

CoCoS veranstaltet regelmäßig ein Kolloquium zu Themen des Wissenschaftlichen Rechnens und insbesondere HPC. Mögliche Themenbereiche sind:

- Berichte über die Fortschreibung der aktuellen Ausstattung im HPC.

- Vorträge über aktuelle Forschungsergebnisse im Zusammenhang mit HPC.
Hier kann auch jungen Wissenschaftlern ein Forum zur Präsentation ihrer Arbeiten geboten werden.
- Vorträge auswärtiger Wissenschaftler.
- Präsentationen von Herstellern (Hardware und Software) aus dem HPC-Umfeld.

CoCoS bietet die Basis für einen besseren Informationsaustausch zwischen Wissenschaftlern unterschiedlicher Fachbereiche, die oft an ähnlich gelagerten Problemen arbeiten ohne voneinander zu wissen. Die interdisziplinäre Arbeit im HPC wird gefördert und im Laufe der Zeit entsteht ein Kompetenznetzwerk für wissenschaftliches Rechnen.

HPC extern

Abschließend sollte nicht unerwähnt bleiben, dass **CoCoS** auch die natürliche Schnittstelle der WWU zu anderen Universitäten und Forschungseinrichtung im In- und Ausland bildet, wenn es um Themen des HPC geht. Aktuelle Entwicklungen in der Welt des HPC werden beobachtet und für die Anwender erschlossen. Hierzu zählt auch die Unterstützung derjenigen Nutzer, die auf externe Ressourcen (z. B. in Zentren der Ebenen 0 und 1, Ressourcenverbund NW, etc.) zugreifen wollen.

Organisation von CoCoS

CoCoS wird als virtuelles Zentrum geführt.

An der Spitze von **CoCoS** steht ein Board, das sich aus Leitern der beteiligten Partner zusammensetzt. Besonders hervorzuheben ist die Beteiligung von Hochschullehrern, die im HPC aktiv sind, um die inhaltliche Kompetenz zu betonen.

Im Board wird die strategische Planung für das HPC innerhalb der WWU vorgenommen, insbesondere für größere Beschaffungen. Hier wird auch die Zusammenarbeit mit den Gremien der Universität koordiniert.

Mitarbeiter

Die Mitarbeiter von **CoCoS** rekrutieren sich aus dem ZIV, den IVVen und den Fachbereichen. Sie werden mit einer bestimmten Aufgabenstellung (Betrieb, Software, Ausbildung, Beratung, etc.) **CoCoS** (in der Regel teilweise) zugeordnet. Diese Zuordnung ist ebenfalls virtuell zu sehen. Die Mitarbeiter bleiben ihren Einrichtungen verbunden, arbeiten aber auf Basis von **CoCoS** über die Grenzen von Fachbereichen und Einrichtungen eng zusammen.

Das Konzept von **CoCoS** sieht ausdrücklich nicht die Schaffung neuer Stellen und eines bürokratischen Überbaus vor, sondern zielt auf die bessere Koordination und Nutzung vorhandener Kapazitäten. Besonders wichtig ist jedoch, dass die Mitarbeiter von **CoCoS** wirklich konkrete Aufgabenstellungen bearbeiten und nicht nur koordinierend tätig sind. Nur so kann eine solche Organisationseinheit mit Leben gefüllt werden und dauerhaft Bestand haben. **CoCoS** ist also virtuell in der Organisation aber real bei der Umsetzung der Aufgaben.

Finanzierung

CoCoS wird aus denjenigen Mitteln der beteiligten Einrichtungen finanziert, die bisher auch schon für Hard- und Software aus dem Bereich des HPC vorgesehen sind, z. B. die zentralen Mittel des ZIV für Softwarelizenzen. Für die Finanzierung von **CoCoS** existiert kein fester Etat. Vielmehr werden durch Synergieeffekte bei der Zusammenarbeit der beteiligten Einrichtungen die Mittel für Hardware und Software im Bereich des HPC und des Wissenschaftlichen Rechnens sinnvoller ausgeschöpft.

Ein Verweis auf eine universitätsweite Infrastruktur im Bereich des Wissenschaftlichen Rechnens, erleichtert aber sicherlich auch die Einwerbung von Drittmitteln im Rahmen von Forschungsprojekten, bei denen HPC eine Rolle spielt.

Resümee

Durch **CoCoS** wird das HPC innerhalb der Universität Münster in eine auf die Zukunft ausgerichtete Organisationsform gebracht, die es ermöglicht, HPC als Basis innovativer Forschung im Kontext der WWU optimal zu gestalten.