
ViCE – Creating Uniform Approach to Large-Scale Research Infrastructures

Dirk von Suchodoletz und Jonathan Bauer
eScience department, Computer Center, University of Freiburg

Das Ende 2018 abgeschlossene Projekt ViCE – Virtual Open Science Collaboration Environment – beschäftigte sich im Rahmen der eScience-Initiative des Landes Baden-Württemberg mit der Bereitstellung von Virtuellen Forschungsumgebungen (VFU) [1, 2]. Das Projekt bot die Chance, neue Betriebsmodelle und Containerisierungslösungen in verschiedenen Kombinationen und Setups zu evaluieren. Die Ergebnisse wurden in einer Reihe von Publikationen sukzessive veröffentlicht [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8]. Die im Projekt bearbeiteten Problemfelder umfassten die Anbindung von VFUs an zentrale Speicherinfrastrukturen, die Anforderungen, die an zukünftige Speichersysteme erwachsen [2, 12], der Transport größerer Datenmengen und Caching [5], das Scheduling von virtualisierten Umgebungen auf einem HPC-System [3], Bedarf nach einer Austauschplattform [11], Betriebs- und Geschäftsmodelle [14, 15] oder das Durchreichen spezieller Hardware in eine VFU. Aus dem Projekt sind weitere Kooperationen wie die Zusammenarbeit mit dem de.NBI (deutsches Netzwerk Bioinformatik) und die Antragstellung für das Science Data Center "BioDATEN" im Bereich Bioinformatik hervorgegangen.¹ Das bildet gleichzeitig die Grundlage für eine Beteiligung an den Aktivitäten zur Nationalen Forschungsdateninfrastruktur.

Aus Sicht der Betreiber wurde zudem bei den verschiedenen Workshops und Schulungen klar, dass das Thema "sichere bzw. datengeschützte Compute-Infrastrukturen" zunehmend an Bedeutung gewinnt. Spezielle Herausforderungen ergeben sich beim Umgang mit personenbeziehbaren Daten sowohl im Bereich der Nutzung in HPC- als auch in Cloud-Umgebungen. Das gilt ebenfalls für eine sichere (langfristige) Speicherung solcher Datensätze im Sinne des Forschungsdatenmanagements. Inzwischen liegen diesbezügliche Anfragen aus verschiedenen Disziplinen vor. Ein Ergebnis von ViCE ist die begonnene Zertifizierung von Speicher- und Compute-Infrastrukturen am Beispiel der de.NBI-Cloud an den Standorten Freiburg und Tübingen. ViCE befasste sich weiterhin mit der reproduzierbaren Erstellung von VFUs durch automatisierte Prozesse (Abb. 1) als auch mit der Bereitstellung und Konfiguration der vorhandenen Forschungsinfrastrukturen für die Nutzung durch Virtuelle Forschungsumgebungen [9].

Im technischen Bereich wurde begleitend zum ViCE-Projekt ein gemeinsames zustandsloses Netzwerkboot-Konzept für die Bereitstellung der Basisinfrastrukturen HPC und Cloud entwickelt. Dieses versetzt reproduzierbar auf Basis des *Boot Selection Service* [7] Compute-Knoten in den für die jeweilige Infrastruktur notwendigen Betriebsmodus. Auf

Das hier beschriebene Poster ist in der Open Access-Plattform der Universität Heidelberg heiDOK unter der DOI <https://doi.org/10.11588/heidok.00026858> veröffentlicht.

¹ Vgl. hierzu die Projekt-Homepage www.biodaten.info.

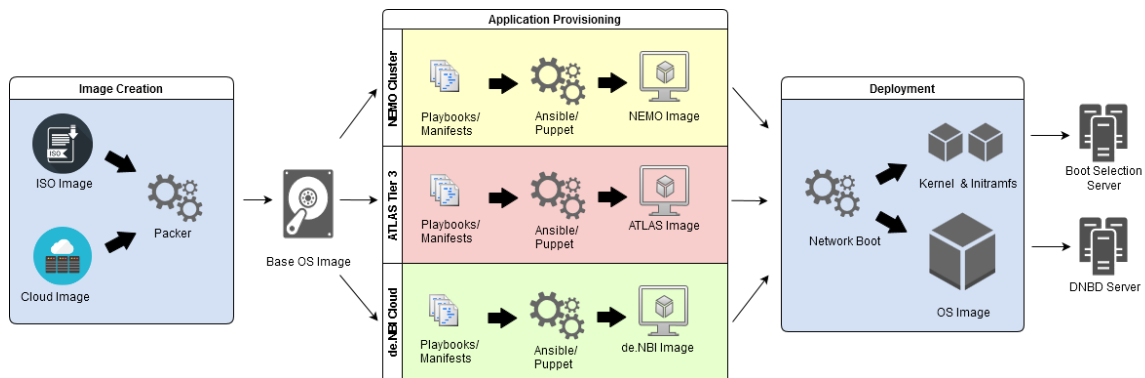


Abbildung 1.: Reproduzierbares Software Provisioning und Deployment.

diese Weise komplementiert es die durch VFU geschaffene Flexibilität auf Ebene der Rechenressourcen, je nach Nutzung und Auslastung der jeweiligen Forschungsinfrastruktur. Dieses gemeinsame Bare-Metal Provisionierungskonzept basiert auf dem in Freiburg entwickelten *Distributed Network Block Devices* (DNBD3) [8] – eine verteilte, redundante und performanceorientierte Speicherlösung.

Im Zuge des Projekts erfolgte eine breit angelegte Information für die beteiligten und später über die ursprünglichen Wissenschafts-Communities hinaus mit dem Ziel, neue Wege der Nutzung bestehender (Groß-)Forschungsinfrastrukturen aufzuzeigen und Hürden beim Einstieg abzubauen. Dieses schloss Aufklärung und Hinweise zum Forschungsdatenmanagement ein. ViCE diskutierte durch die Containerisierung oder Paketierung erste Grundlagen für den langfristigen Zugriff auf Forschungsumgebungen, die durch Daten und Prozesse gekennzeichnet sind.

Das Projekt beschäftigte sich desweiteren mit der breit angelegten Unterstützung von General Purpose GPU-Beschleunigerkarten sowohl für den Zugriff aus einer VFU als für die Bereitstellung in den Forschungsinfrastrukturen bwHPC, bwCloud und bwLehrpool.² Es entwickelte für letzteres eine allgemeine Lösung auf Basis des gemeinsamen Netzwerk-Bootkonzeptes. Die Problemstellung lag hierbei in der Umsetzung einer generischen Lösung, die installierte GPU-Karten erkennt und dynamisch den notwendigen Hersteller-Treiber bereitstellt. Dies ist eine Herausforderung, da in Linux-Systemen oft Bibliothekenkonflikte zwischen GPU-Karten-Treiber verschiedener Hersteller bzw. Versionen, die für unterschiedlichen Modelle oder Anwendungszwecke benötigt werden, vorliegen. Daher können diese nicht gleichzeitig in die Systemabbilder installiert werden, sondern müssen beim Netzwerkboot erst zur Bootzeit entsprechend bereitgestellt werden. Systemabbilder mit verschiedenen Treiberversionen abzuwandeln und die treiberspezifischen Abbilder nach der Erkennung der GPU-Karten auszuliefern, ist jedoch aus administrativer Sicht suboptimal.³

Das in den Forschungsinfrastrukturen eingesetzte Netzwerkboot-Framework wurde so

² Landesdienste für die Bereitstellung großer Forschungsinfrastrukturen, siehe www.bwhpc.de und www.bw-cloud.org bzw. für die Provisionierung und flexible Nutzung von PC-Pools, www.bwlehrpool.de.

³ Die Verwaltung mehrerer Abbilder, die sich im Grund kaum unterscheiden, führt zu unnötigem Mehraufwand und Platzbedarf. Die Unterstützung spezieller Hardware schafft Herausforderungen für den langfristigen Zugriff auf VFUs, die jedoch in diesem Projekt nicht angegangen werden konnten.

erweitert, dass die durch das Installieren bestimmter GPU-Treiber entstandene Änderungen an Systemabbildern als eigenständige "Addons" zusammengefügt werden. Diese werden innerhalb der Systemabbilder abgelegt, sind aber beim Systemstart zu Beginn nicht aktiv. Komplementär zu den Addons wird bei der Einbindung und Vorbereitung des Systemabbilds während der Initiierung des Bootvorgangs die vorhandene GPU-Karte ermittelt und, falls notwendig, das dafür notwendige Addon aktiviert. Anders als bei direkt installierten Treibern ist es hiermit auch denkbar, unterschiedliche Treiberversionen parallel mitzuführen und nicht-destruktive Updates der Treibersoftware auszurollen.

Aus Sicht der Dienst- und Infrastrukturanbieter ging es im Projekt um die Schaffung geeigneter Rahmen für die Austerierung der Bedürfnisse der verschiedenen Nutzergruppen in Hinblick auf zukünftige Betriebsmodelle [4]. Auf diese Weise können neue Nutzergruppen in bestehende föderierte Großinfrastrukturen integriert werden, die vorher mit hohem Aufwand (und potenziell schlechteren Ergebnissen) eigene Forschungsinfrastrukturen betrieben haben. Forschende können sich auch mit kleineren Summen an größeren Infrastrukturprojekten beteiligen und dadurch deutlich schneller starten, als wenn sie selbst den kompletten Software-Hardware-Stack definieren, ausschreiben, installieren und administrieren müssen. Solcherart Konsolidierungen helfen dem Gesamtsystem Universität durch effizienteren Mitteleinsatz und Verbreitung moderner Betriebsmodelle und Organisationskonzepte [14, 15]. Eine weitere Nachnutzung von ViCE-Erkenntnissen deutet sich für die Unterstützung von Aus- und Weiterbildung an den Hochschulen für Angewandte Wissenschaften im Land Baden-Württemberg an, "Machine Learning Lab as a Service", die Nutzung von durchgereichten GPUs in virtuellen Lern- und Arbeitsumgebungen für die Lehre in bwLehrpool und bwCloud.

Danksagung

An dieser Stelle möchten die Autoren dem Ministerium für Wissenschaft, Forschung und Kunst Baden-Württemberg für die hervorragende Unterstützung der Projekte ViCE und bwHPC-S5 danken.

Literaturverzeichnis

- [1] Konrad Meier, Björn Grüning, Clemens Blank, Michael Janczyk, and Dirk von Suchodoletz. Virtualisierte wissenschaftliche Forschungsumgebungen und die zukünftige Rolle der Rechenzentren. In *10. DFN-Forum Kommunikationstechnologien, 30.-31. Mai 2017, Berlin, Gesellschaft für Informatik eV (GI)*, pages 145–154, 2017. <https://dl.gi.de/bitstream/handle/20.500.12116/473/paper13.pdf>.
- [2] Jonathan Bauer, Dirk von Suchodoletz, Jeannette Vollmer, and Helena Rasche. Game of Templates. In Michael Janczyk, Dirk von Suchodoletz, and Bernd Wiebelt, editors, *Proceedings of the 5th bwHPC Symposium*, pages 245–262. TLP, Tübingen, 2019. doi:10.15496/publikation-29057.

- [3] Felix Bühner, Frank Fischer, Georg Fleig, Anton Gamel, Manuel Giffels, Thomas Hauth, Michael Janczyk, Konrad Meier, Günter Quast, Benoît Roland, Ulrike Schnoor, Markus Schumacher, Dirk von Suchodoletz, and Bernd Wiebelt. Dynamic Virtualized Deployment of Particle Physics Environments on a High Performance Computing Cluster. *Computing and Software for Big Science*, 2018.
- [4] Dirk von Suchodoletz, Jonathan Bauer, Susanne Mocken, Oleg Zharkov, and Björn Grüning. Lessons learned from Virtualized Research Environments in today’s scientific compute infrastructures, 2019. *E-Science-Tage 2019, Heidelberg 2019*.
- [5] Christoph Heidecker, Matthias J. Schnepf, Florian von Cube, Manuel Giffels, and Günter Quast. Dynamic Resource Extension for Data Intensive Computing with Specialized Software Environments on HPC systems. In *Proceedings of the 5th bwHPC Symposium*, pages 161–172. TLP, Tübingen, 2019. doi:10.15496/publikation-29051.
- [6] Felix Bühner, Anton J. Gamel, Benoît Roland, Benjamin Rottler, Markus Schumacher, and Ulrike Schnoor. Integration of NEMO into an existing particle physics environment through virtualization. In *Proceedings of the 5th bwHPC Symposium*, pages 187–200. TLP, Tübingen, 2019. doi:10.15496/publikation-29053.
- [7] Jonathan Bauer, Manuel Messner, Michael Janczyk, Dirk von Suchodoletz, Bernd Wiebelt, and Helena Rasche. A Sorting Hat for Clusters. In Michael Janczyk, Dirk von Suchodoletz, and Bernd Wiebelt, editors, *Proceedings of the 5th bwHPC Symposium*, pages 217–229. TLP, Tübingen, 2019. doi:10.15496/publikation-29055.
- [8] Simon Rettberg, Dirk von Suchodoletz, and Jonathan Bauer. Feeding the Masses: DNBD3. In Michael Janczyk, Dirk von Suchodoletz, and Bernd Wiebelt, editors, *Proceedings of the 5th bwHPC Symposium*, pages 231–243. TLP, Tübingen, 2019. doi:10.15496/publikation-29056.
- [9] Michael Janczyk, Bernd Wiebelt, and Dirk von Suchodoletz. Virtualized Research Environments on the bwForCluster NEMO. In *Proceedings of the 4th bwHPC Symposium October 4th, 2017, Alte Aula Eberhard Karls Universität Tübingen*, pages 37–40. TLP, Tübingen, 2017. doi:10.15496/publikation-25205.
- [10] Lev Lafayette, Bernd Wiebelt, Dirk von Suchodoletz, Helena Rasche, Michael Janczyk Janczyk, and Daniel Tosello. The Chimera and the Cyborg – In vivo Hybrid Compute: HPC, Cloud, and Container Implementations. In *Advances in Science, Technology and Engineering Systems Journal – Special Issue on Multidisciplinary Sciences and Engineering*, pages = 1–7, 2019. doi:10.25046/aj040201.
- [11] Christopher B. Hauser and Jörg Domaschka. ViCE Registry : An Image Registry for Virtual Collaborative Environments. In *2017 IEEE International Conference on Cloud Computing Technology and Science (CloudCom)*, (2):82–89, 2017. doi:10.1109/CloudCom.2017.11.

- [12] Dirk von Suchodoletz, Ulrich Hahn, Bernd Wiebelt, Kolja Glogowski, and Mark Seifert. Storage infrastructures to support advanced scientific workflows. In Michael Janczyk, Dirk von Suchodoletz, and Bernd Wiebelt, editors, *Proceedings of the 5th bwHPC Symposium*, pages 263–279. TLP, Tübingen, 2019. doi:10.15496/publikation-29058.
- [13] Felix Bartusch, Kolja Glogowski, Ulrich Hahn, Michael Janczyk, Steve Kaminski, Jens Krüger, Volker Lutz, Gerhard Schneider, Dirk von Suchodoletz, Thomas Walter and Bernd Wiebelt. Defining the future scientific data flow for multi-disciplinary research data. *E-Science-Tage 2019, Heidelberg 2019*.
- [14] Dirk von Suchodoletz, Janne Chr. Schulz, and Jan Leendertse. Abstraktion erlaubt neue Aufgabenverteilung – Virtualisierung, Clouds und die zukünftige Rolle wissenschaftlicher Rechenzentren. *Wissenschaftsmanagement*, (4):31–35, 2017.
- [15] Dirk von Suchodoletz, Janne Chr. Schulz, and Jan Leendertse. Vom wissenschaftlichen Rechenzentrum zum Rechenzentrum für die Wissenschaft – Überlegungen zur Rekalibrierung von IT-Strategien an Universitäten und Hochschulen. *Wissenschaftsmanagement*, (5/6):30–35, 2017.