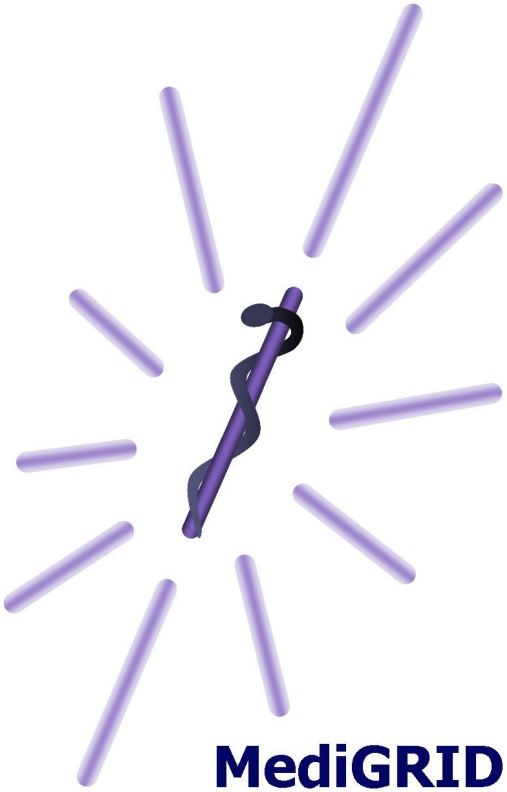
Verwaltung von Dateien und Datenbanken im Grid mit SRB und OGSA-DAI



Kathrin Peter, Zuse-Institut Berlin

Datenmanagement Workshop
Berlin, 18-19.05.2006

Inhalt

- MediGRID Projekt
- Anwendungen in MediGRID
- Architektur und Datenmanagement
- Verwendung von SRB und OGSA-DAI
- Anforderungen und nächste Schritte

Gefördert vom
Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

MediGRID

- Anwender aus Bioinformatik, medizinischer Bildverarbeitung und klinischer Forschung.
- Ziel: Arbeitsplattform für Biomedizinische Forschung am Beispiel ausgewählter Anwendungen

- Momentan keine gemeinsame Datennutzung wegen Heterogenität der Anwendungen und der Daten.
- Perspektivisch Vernetzung medizinischer und biologischer Daten.
- Aufgaben:
  - Globale Datenspeicherung auf verteilten heterogenen Ressourcen
  - Bereitstellung von Speicherplatz
  - Bereitstellung und transparenter Zugriff auf Datenbanken
  - Bereitstellung eines Metadatenmanagementsystems
  - Unterstützung der Anwender bei der Organisation und Speicherung großer Datenmengen

Gefördert vom
Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

Elektronische Patientenakte

- Patientenakte in computerlesbarer Form.
- Sammlung und Dokumentation aller Daten zur Gesundheitsversorgung eines Patienten, z.B. Befunde, Behandlungen.
- Die gewaltige Datenflut benötigt geeignete Mechanismen zur Verwaltung der Daten.
- Sortier- und Suchkriterien zur Navigation und zur Unterstützung einer multiplen Nutzung der Daten.
- Erfüllung strenger Sicherheitsanforderungen zur Langzeitarchivierung, Zugriffskontrolle und kryptografischen Sicherung der Kommunikationswege und Speicherung selbst.
- Vorteile:
  - Schnelle, umfassende Verfügbarkeit aller relevanten Informationen.
  - Effiziente Verwaltung.
- Nachteile:
  - Technikabhängigkeit, Zuverlässigkeit, Sicherheit, Missbrauch
  - Entscheidungsfindung auf Untersuchungsergebnissen anderer Ärzte.

Gefördert vom
Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

Anwendungsklassen

Bioinformatik

- Sequenzanalyse
- Genomdatenanalyse
- SequCorr
- RNAi Pipeline

Medizinische Bildverarbeitung

- Med. Bildverarbeitung: Prostatabiopsie
- Virtuelle Gefäßchirurgie
- Funktionelle Hirnbilddaten

Gefördert vom
Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

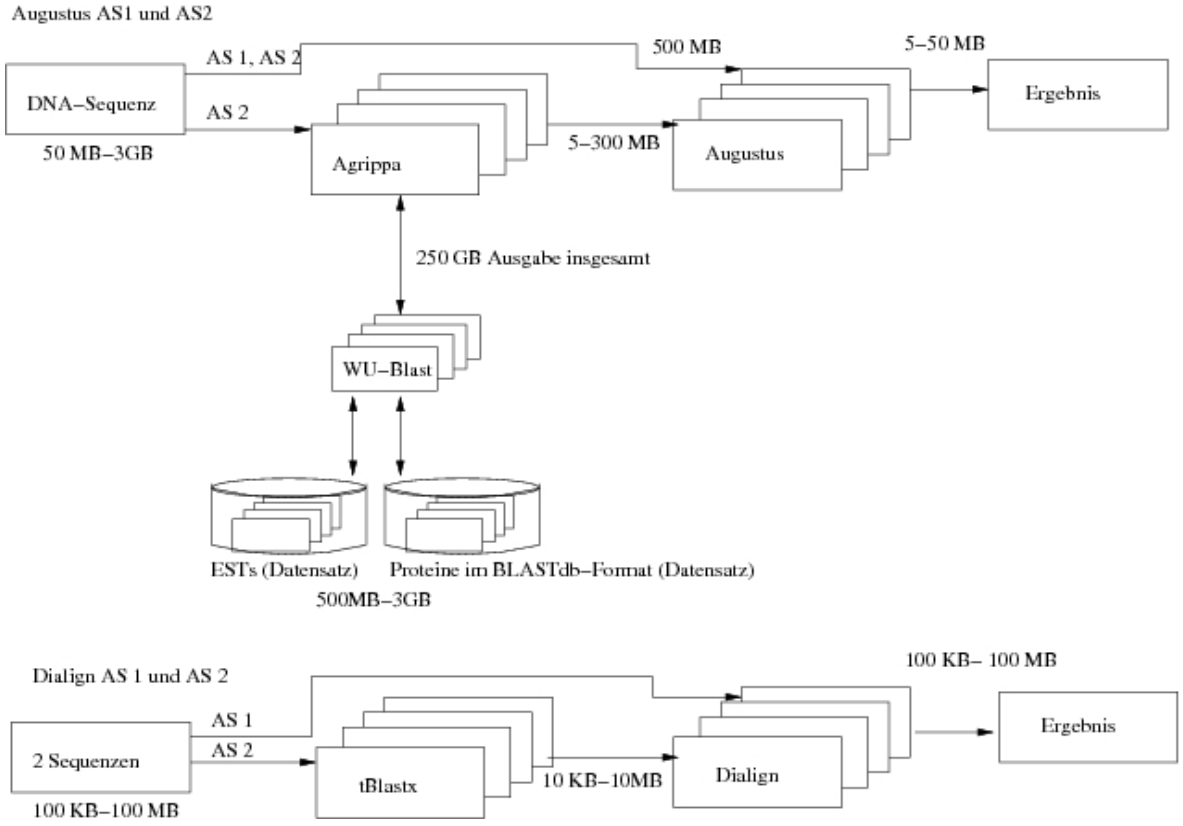
Anwendungsklasse: Bioinformatik

- Datentransfer:
  - Eingabedatensatz (Upload)
  - Berechnungen (DB-Zugriffe, temporäre Zwischenergebnisse, Nutzer-Interaktion zur Auswahl und Einschränkung von Daten)
  - Ausgabedatensatz (Download)

- keine permanente Datenhaltung erforderlich
- Nutzer ist für Ein- und Ausgabedaten selbst verantwortlich

Gefördert vom
Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

Bioinformatik: Sequenzanalyse



- Upload DNA-Sequenzen
- große Zwischenergebnisse, großer Hauptspeicherbedarf
- temporäre Bereitstellung der Ergebnisse zum Download

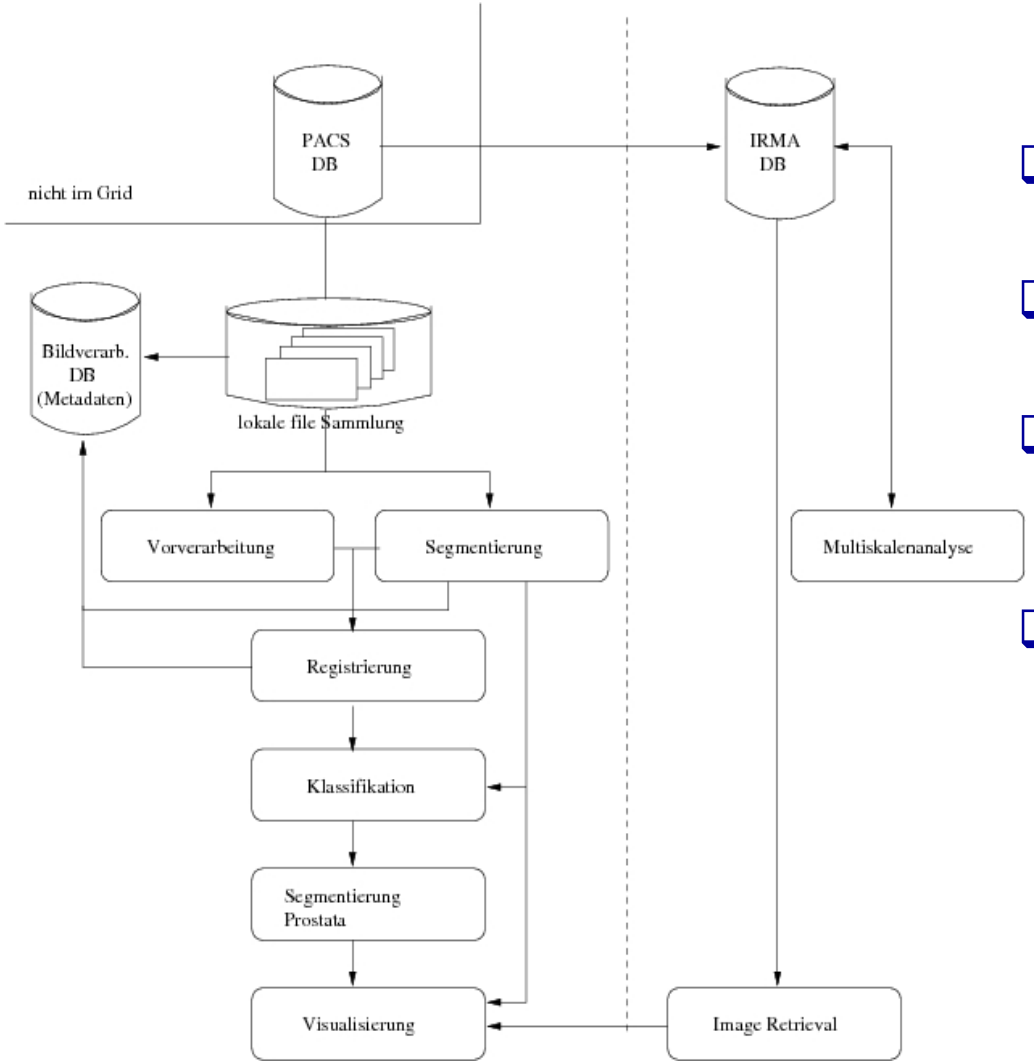
Gefördert vom
Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

Anwendungsklasse: Medizinische Bildverarbeitung

- Datentransfer:
  - Eingabedatensatz: Bilddaten + Metadaten
  - Verarbeitung (Produktion einer großen Menge neuer Daten, Interaktion zur Parameterauswahl und zur Wiederholung von Berechnungen usw.)
  - Ergebnis (weitere Interaktion zur Ergebnisauswahl und zum Postprocessing)
- Unterstützung durch Datenmanagement bei permanenter Datenspeicherung, Datensuche über Metadaten
- Zentrale Ergebnisbereitstellung für Lernzwecke

Gefördert vom
Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

Medizinische Bildverarbeitung: Prostatabiopsie



- Datei Sammlung (flat-files) mit Bilddaten
- verschiedene Bearbeitungsschritte
- Speicherung von Zwischenergebnissen; Ergebnisspeicherung
- Lerndatenbank IRMA

Gefördert vom
Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

Anwendungsklassen

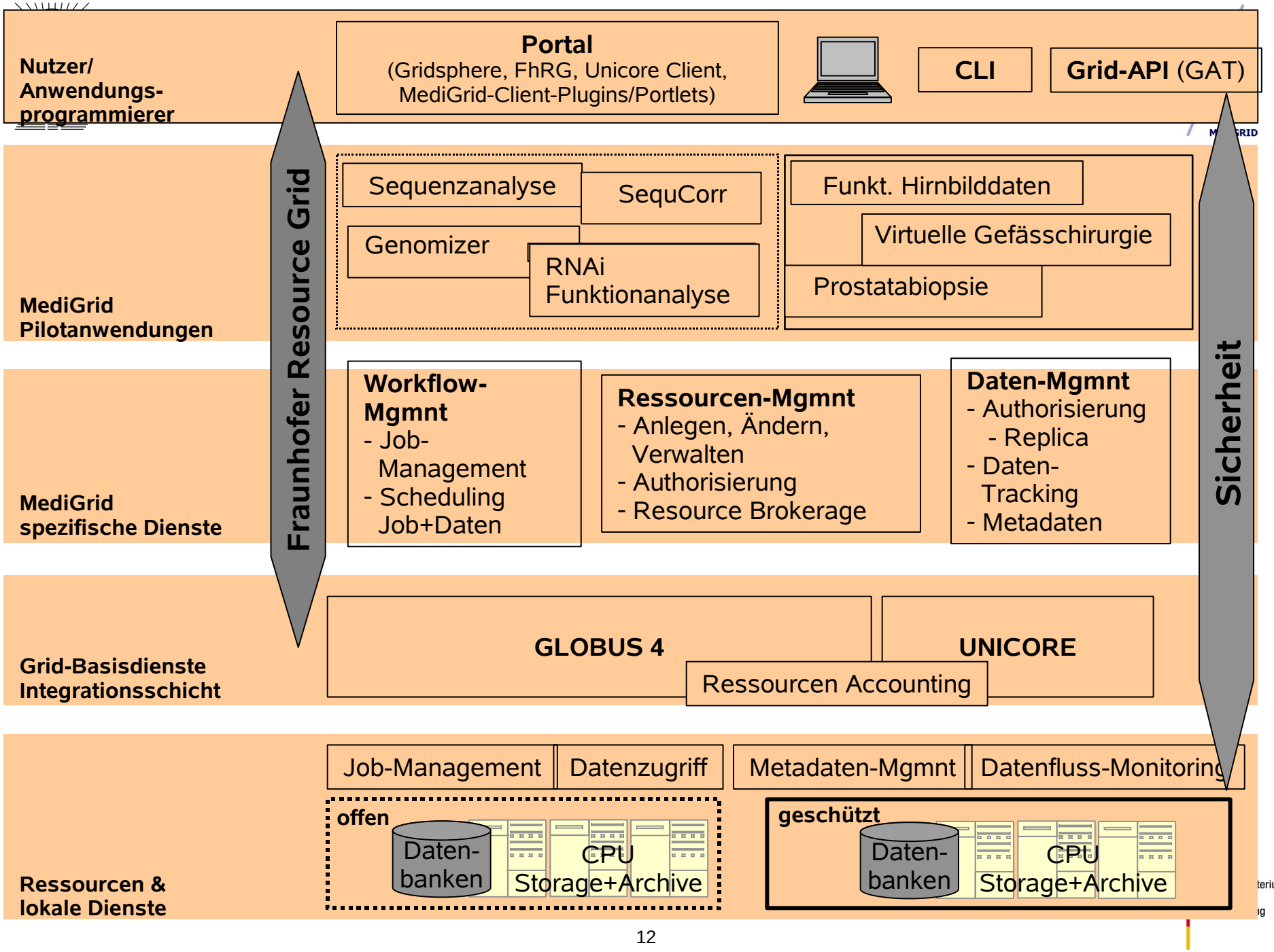
- 250 GB Plattenplatz für Zwischenergebnisse (Sequenzanalyse)
- bis 100 GB Plattenplatz für Datenbank, 100 GB Plattenplatz für Dateien (Genomdatenanalyse, RNAi-Pipeleine)
- 300 MB pro Datensatz + 3*300 MB zu archivierende Daten pro Berechnung (funktionelle Hirnbilddaten)
- Art der Datenoperationen:
  - Datenupload: von nicht Grid-Rechner auf Grid-Rechner
  - Datentransfer zwischen Grid-Rechnern: Übertragung von Zwischenergebnissen und temporären Daten
  - Langfristige Datenspeicherung mit Ablage der Daten im Grid-Storage-System. Erzeugung von Metadaten u.a. für Suche nach Daten.
  - Datendownload: Ergebnisdownload von Grid-Rechner auf nicht Grid-Rechner

Gefördert vom
Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

MediGRID-Architektur

- Basis-Technologie: Globus Toolkit 4
- Übernahme und Weiterentwicklung von Komponenten des Fraunhofer Resource Grid (FhRG)
- Hauptzugang über Portal, optional Nutzung von Diensten über Commandline Interfaces
- Ressourcenmetadaten mit MDS4, Ganglia Cluster Monitoring System und Ressourcenverwaltungssystem aus dem FhRG
- Datenmanagement zur Einführung einer Datenabstraktionsschicht. Datenressourcen: Datenbanken und Filesysteme

Gefördert vom
Bundesministerium
für Bildung
und Forschung


Nutzer/
Anwendungs-
programmierer
Portal
(Gridsphere, FhRG, Unicore Client,
MediGrid-Client-Plugins/Portlets)
CLI
Grid-API (GAT)
MediGrid
Pilotanwendungen
Sequenzanalyse
SequCorr
Genomizer
RNAi
Funktionanalyse
Funkt. Hirnbilddaten
Virtuelle Gefässchirurgie
Prostatabiopsie
Fraunhofer Resource Grid
MediGrid
spezifische Dienste
Workflow-
Mgmnt
- Job-
Management
- Scheduling
Job+Daten
Ressourcen-Mgmnt
- Anlegen, Ändern,
Verwalten
- Authorisierung
- Resource Brokerage
Daten-Mgmnt
- Authorisierung
- Replica
- Daten-
Tracking
- Metadaten
Sicherheit
Grid-Basisdienste
Integrationsschicht
GLOBUS 4
UNICORE
Ressourcen Accounting
Job-Management
Datenzugriff
Metadaten-Mgmnt
Datenfluss-Monitoring
Ressourcen &
lokale Dienste
offen
Daten-
banken
CPU
Storage+Archive
geschützt
Daten-
banken
CPU
Storage+Archive

Datenmanagement

- Sicherheit: Nur authorisierte Benutzer dürfen Zugriff auf bestimmte Daten erhalten.

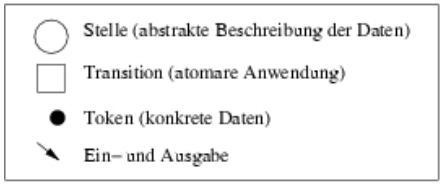
  Portal: Anmeldung mit Passwort und Erzeugung kurzlebiger Credentials mit Hilfe des auf dem MyProxy-Server abgelegten MyProxy.

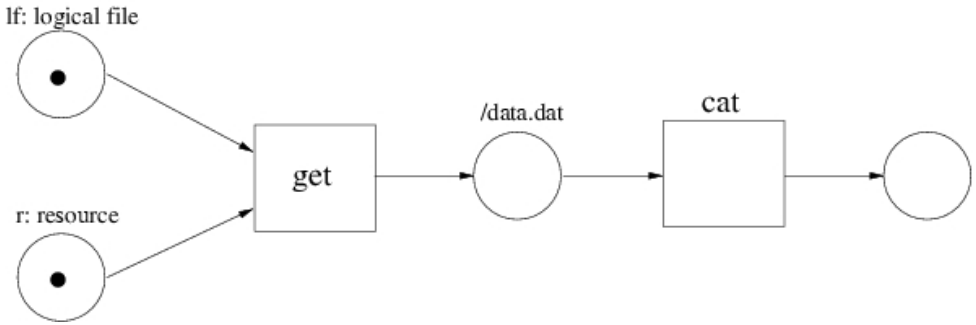
  -> SRB GSI Authentifizierung Mapping, OGSA-DAI Mapping
- Metadatenmanagement: Verwaltung von Metadaten über Dateien, Verzeichnisse, Benutzer usw., benutzereigenen Metadaten und Replikainformationen.

  -> SRB MCAT
- Datenmanagement bietet verschiedene Services, vorzugsweise als Webservices.
- Modellierung von Datentransfers und komplexeren Datenmanagementfunktionalitäten im Workflow mit Hilfe von Petri-Netzen.

Gefördert vom
Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

Modellierung von Datenmangementservices



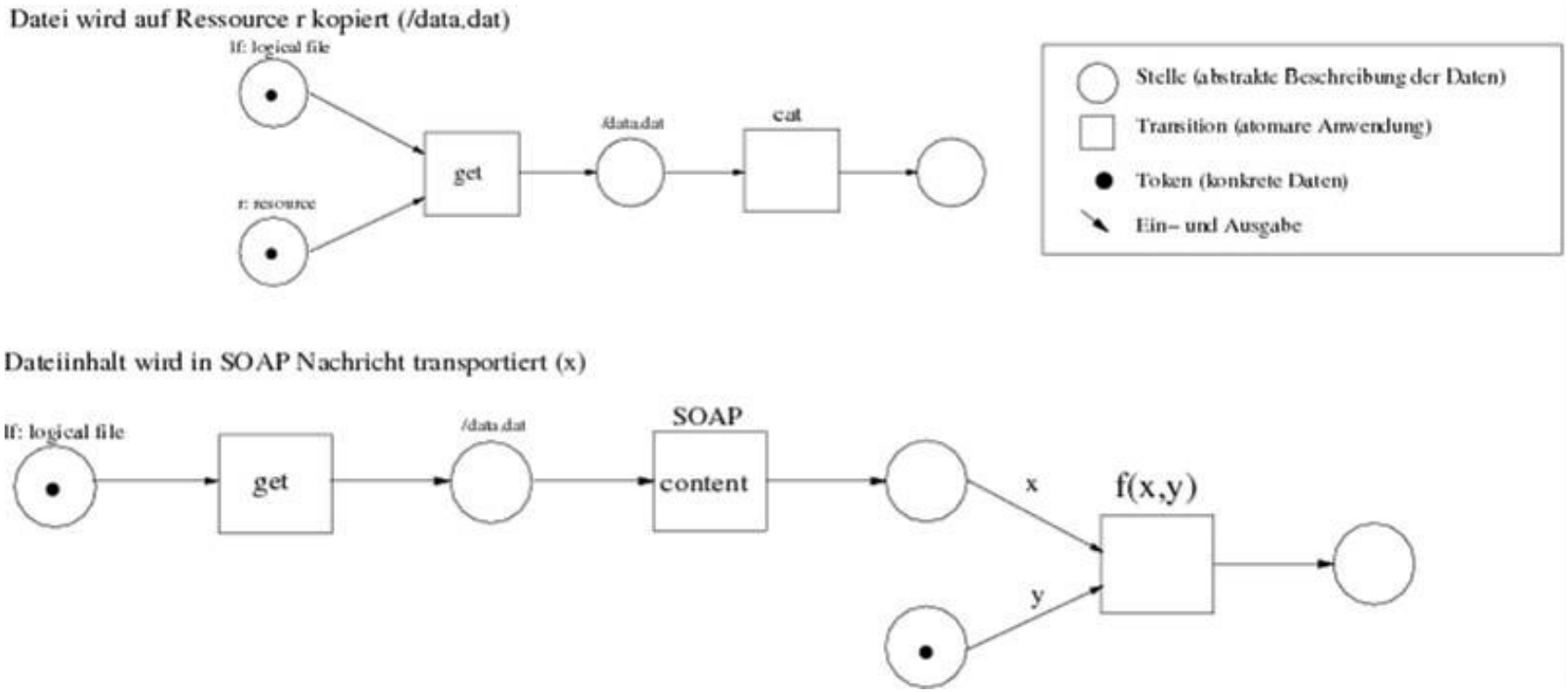


Beispiel für einen Workflow modelliert durch ein Petri-Netz:

- Transport einer Datei lf aus dem Grid-Storage-System zur Ressource r.
- Auf Ressource r wird Job cat ausgeführt.

Gefördert vom
Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

Modellierung von Datenmangementservices



Beispiel für einen Workflow modelliert durch ein Petri-Netz:

- Der Inhalt von Datei lf wird in einer SOAP Nachricht an den Webservice f(x,y) übertragen

Gefördert vom
Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

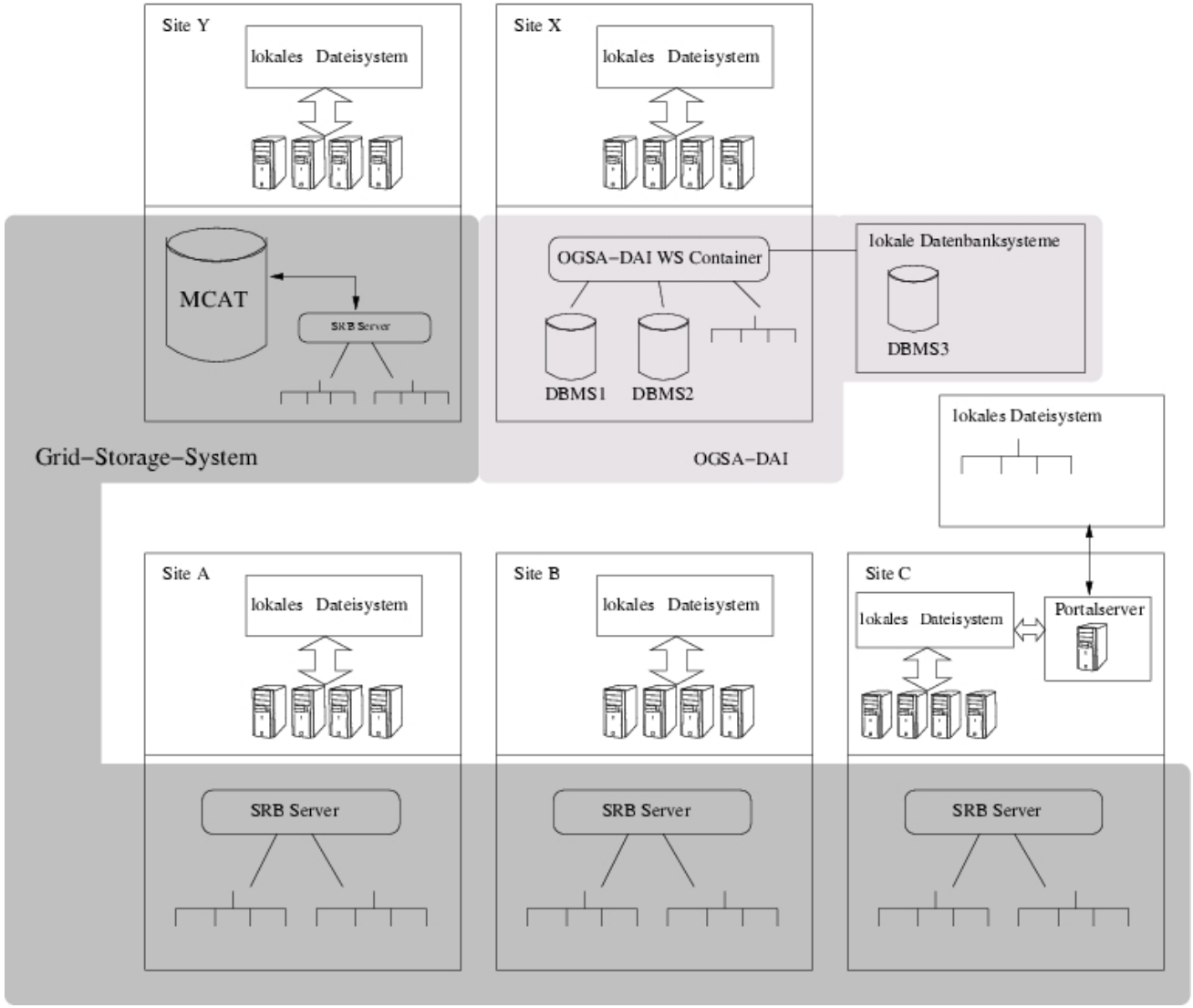
Datenmanagement

- Datenmanagementservices um neue Funktionalitäten erweiterbar

- Datenmangementservices innerhalb des Grid:
  - Datentransfer mit gridFTP zwischen Grid-Rechnern
  - Datentransfer zwischen Grid-Rechnern und Grid-Storage-System
  - Zugriff auf Datenbanken über WebServices

Gefördert vom
Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

SRB und OGSA-DAI in MediGRID



Gefördert vom
Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

SRB

- Wofür soll der SRB genutzt werden?
  - Grid-Storage-System mit globalem Namensraum. Virtualisierung der Speicherung durch Abstraktion vom physikalischen Ort.
  - Langfristige sichere Datenspeicherung, Möglichkeit zur Replizierung über mehrere Speicherressourcen.
  - Metadatenverwaltung mit MCAT (verteilt oder zentral)
  - Zugriffsrechteverwaltung
  - SRB-Clients: SCommands, JARGON, SRBAdmin
- Noch offen:
  - Eine MediGRID-Zone mit einem MCAT und pro Site ein SRB-Server.
  - Jede Site bildet eine SRB-Zone mit je einem MCAT. Verbindung der Zonen durch Zonenföderation.
  - Stresstest: Dateigrößen von mehreren Gigabyte?
- Interessante Zusatztools:
  - GridFTP Schnittstelle zum SRB
  - Matrix: Workflow aus SRB-Diensten mit SOAP/WSDL Schnittstelle (in Planung)

Gefördert vom
Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

OGSA-DAI

- Wofür soll OGSA-DAI benutzt werden?
  - Bereitstellung von Datenbanken im Grid.
  - Generischer Zugriff unabhängig vom Ort der Datenbank.
  - 1. Realisierung: GeneOntology-Datenbank und Thesaurus im MediGRID-Portal

- OGSA-DAI WSRF verfügt über Webservice Schnittstellen.
- OGSA-DAI Webservice Container kann unter Globus betrieben werden.
- Modellierung des Datenbankzugriffs als Webservice im Workflow.
- OGSA-DAI-Clients: JavaClient, Administration per GUI oder CLI

- Noch offen:
  - Funktionalität des Zugriffs auf Dateisysteme mit OGSA-DAI. Einbindung von Dateiressourcen und Verwaltung der Zugriffsrechte.
  - Neues Release: OGSA-DAI WSRF 2.2 bietet Zugriffsverwaltung für Ressourcen?

Gefördert vom
Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

Anforderungen

- SRB:
  - Datenaustausch zwischen Grid-Rechnern und SRB

- OGSA-DAI:
  - Dateizugriff nur auf strukturierte Daten, Metadaten zu Dateien?
  - Zugriffskontrolle für Dateien: Mapping auf Unix-Account unter Benutzung des Globus-Mapfiles?
  - Wie erfolgt der Datenbankzugriff wenn mehrere OGSA-DAI WS Container im Grid betrieben werden?

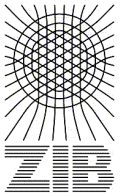
- Möglichkeit zum Upload/Download von lokalen Daten ohne Portal und ohne Installationen von Client-Interfaces auf lokalem Rechner?

Gefördert vom
Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

Nächste Schritte

- Speicherung von Daten im Grid-Storage-System:
  - Webservice für SRB put und SRB get bereitstellen.
  - GSI-Authentifizierung, Delegation der Rechte im Portal und Workflow.
- Aufbau des Grid-Storage-Systems:
  - Installationen von SRB-Servern bei den Ressourcenprovidern.
  - Integration und Bereitstellung von weiteren Datenbanken mit OGSA-DAI.
- Planung weiterer Datenmanagementfunktionalitäten:
  - Bereitstellung als Webservice.
  - Modellierung im Workflow.

Gefördert vom
Bundesministerium
für Bildung
und Forschung



Danke.

Gefördert vom
Bundesministerium
für Bildung
und Forschung