

e-サイエンスを実現するグリッド技術

Grid Technology Enabling e-Science

三浦謙一

合田憲人

宇佐見仁英

田中義一

佐賀一繁

山田清志

坂根栄作

Kenichi MIURA

Kento AIDA

Hitohide USAMI

Yoshikazu TANAKA

Kazushige SAGA

Kiyoshi YAMADA

Eisaku SAKANE

何かわかる？

ネットワークを活用して研究室のクラスタ計算機から国内外のスーパーコンピュータやストレージを連携させて一つのシステムのように見せることにより、これまで実現できなかった大規模シミュレーションや大規模データ処理を可能にするとともに、災害にも強い情報インフラを実現することを目標にしています。

どんな研究？

国内外のクラスタ計算機やスーパーコンピュータから構成される複合環境上で、シミュレーションやデータ処理などのアプリケーションプログラムを分散実行するためのソフトウェアや、アプリケーションプログラムを複数の研究者が共有して使うためのソフトウェアの研究開発を行っています。

状況設定

科学計算では、前処理、本処理、後処理に複数のアプリケーションを使用し、各アプリケーションや実行規模に適した複数のコンピュータを使用するケースが多くあります。また、共同研究で計算資源、アプリケーション、データを共有する場合は、資源が地理的に遠く離れていることもあります。このとき、これら計算資源の連携がよく取れていないと、前処理、本処理、後処理といった計算ワークフローの途中で人間の操作が必要となり、ワークフローの実行効率が低下します。たとえば、以下のような場合が想定されます。

- 実験結果は研究室システムにあるが計算パワーは不十分 ⇒ 実験結果を情報基盤センターやグリッド上の大型計算資源に転送・実行
- 手持ちの計算機ではアプリケーションの実行効率が悪い ⇒ アプリケーションデータを他組織の計算機に転送・実行
- 計算資源が足りない ⇒ 他組織の計算機を借用・実行
- 共同研究先とアプリケーションを共有したい
- 異なる種類のグリッド上の計算資源を使いたい

研究状況

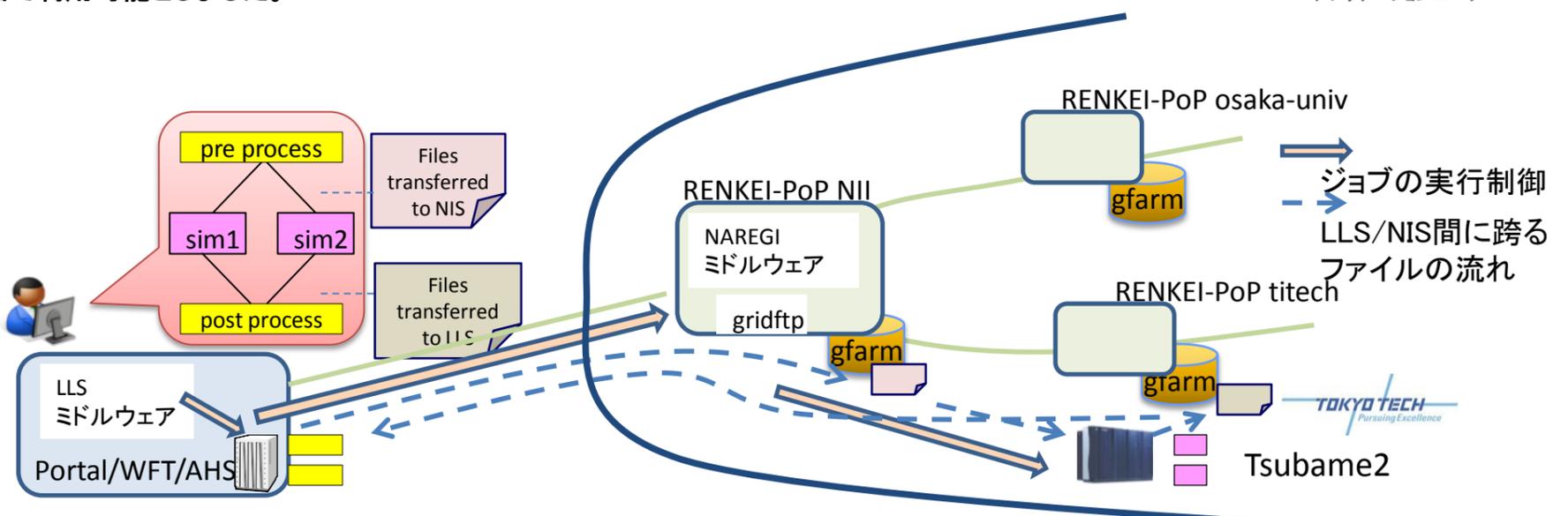
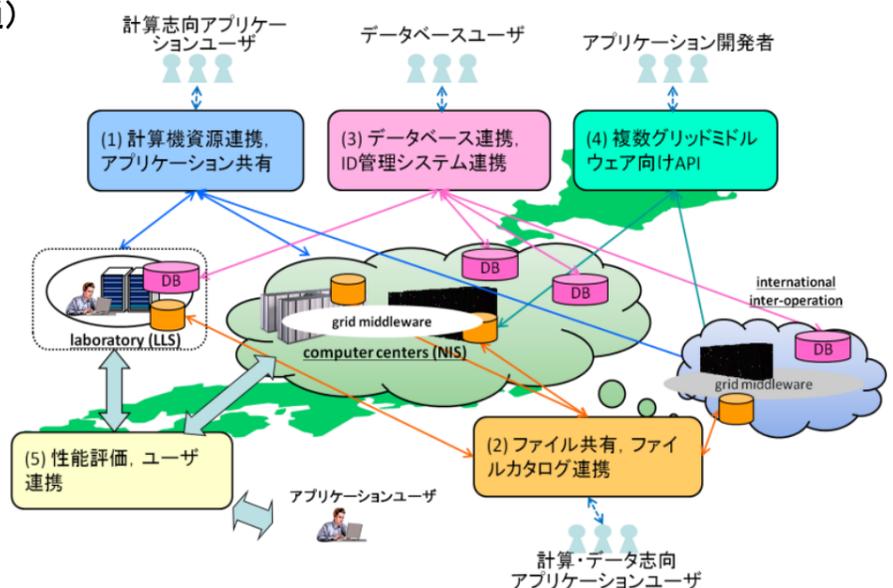
本研究は、文部科学省の科学技術試験研究委託事業による委託業務「次世代IT基盤構築のための研究開発「e-サイエンス実現のためのシステム統合・連携ソフトウェアの研究開発」(通称:RENKEIプロジェクト)のサブテーマとして実行されています。本プロジェクトは以下のサブテーマから構成されています。

- 計算資源連携、アプリケーション共有(国立情報学研究所、玉川大学、富士通)
- ファイル共有、ファイルカタログ連携(筑波大学、大阪大学)
- データベース連携、ID管理システム連携(産業総合研究所)
- 複数グリッドミドルウェア向けAPI(高エネルギー研究所)
- 性能評価、ユーザー連携(東京工業大学、大阪大学)

計算資源連携:ワークフローツール、アプリケーション共有

テストベッドの構築

■ ユーザ連携グループが開発し、全国の情報基盤センタに展開されているRENKEI-POP(Point of Presence)のNII拠点に、本研究所が開発したNAREGIミドルウェアを配置し、日本最高速のスーパーコンピュータ東工大TSUBAME2(2.4PFlops)を、NAREGIミドルウェア経由で利用可能としました。



■ NII(一ツ橋)の研究室環境に、本研究所が開発したLLS(Laboratory Level System)ミドルウェアを配置し、研究室内の計算資源と、NII拠点のRENKEI-POP上のNAREGI-ミドルウェアと連携してTSUBAME2へのジョブ投入とモニタリングを可能としています。

■ LLSミドルウェアは、研究室の計算資源で前処理(格子生成など)、情報基盤センタのスーパーコンピュータでシミュレーションを行い、研究室の計算資源で後処理(結果の解析や可視化など)のプログラムの連携と実行を可能とするワークフローシステムと、作成したワークフロープログラムのグループ内メンバの共有化する機能があります。

■ 研究室と情報基盤センタの連携のために必要なファイルの共有に関しては、全国のRENKEI-POP上に展開されたgfarm広域分散ファイルを、NII拠点のRENKEI-POP上のローカルストレージを利用したgridftpによるファイルステージングを利用することにより可能としています。

OpenFOAMによる実証

■ 本システムの実証のため、化学反応や乱流、熱伝達を含む複雑な流体の流れの現象をシミュレートできるOpenFOAM(Field Operation and Manipulation)というオープンなCFDツールボックスに対して適用を開始しています。

今後の進め方

■ OpenFOAM利用者のために、OpenFOAMのコマンド群を予めワークフローレポジトリに登録しておくことにより、ワークフロープログラミングのための負荷を軽減します。

■ 玉川大学研究室に上記RENKEI-POPのNAREGI-ミドルウェアNIIと結合するLLSシステムを構築し、PSEコミュニティメンバに公開して実証研究を進めます。

計算資源連携: 異種グリッド間インターオペレーション

■ 背景

グリッドインフラが使用するミドルウェアは国や地域により異なり、現状では互換性がありません。国際的な共同研究の円滑な推進には、参加機関の計算資源の連携が重要であり、異種グリッド間のインターオペレーションが求められています。このため、世界の主要なグリッドプロジェクトは、標準仕様準拠のインターオペレーション可能なミドルウェアの研究開発を進めています。

■ 研究開発

RENKEIプロジェクトでも、国際的な共同研究における計算資源連携に対応するために、本研究所が開発したNAREGIグリッドミドルウェアを基に、国際標準仕様HPCBPに準拠したジョブ実行機能、ジョブ投入機能、GLUEに準拠した資源情報サービスの研究開発を行っています。

■ 研究状況

HPCBP準拠ジョブ実行機能を研究開発し、欧米のグリッドとの実証実験を行いました。英国からRENKEIを含む5カ国、5種類のHPCBP準拠のグリッド環境にジョブを投入し、正常終了することを確認しています。これは、eScienceの国際会議などでデモンストレーションを行いました。

HPCBP準拠のジョブ投入機構では、米国の次期TeraGridの候補の1つであるXSEDEにジョブ投入し、正常終了することを確認しました。現在は、RENKEIのWFT環境から、RENKEI/NAREGIの計算資源と他グリッドのHPCBP準拠計算資源をシームレスに使用可能とするための研究開発を行っています。完成後は他のサブテーマと連携した実証実験を行う予定です。

