

# NAREGI Version 1と 今後の展開構想

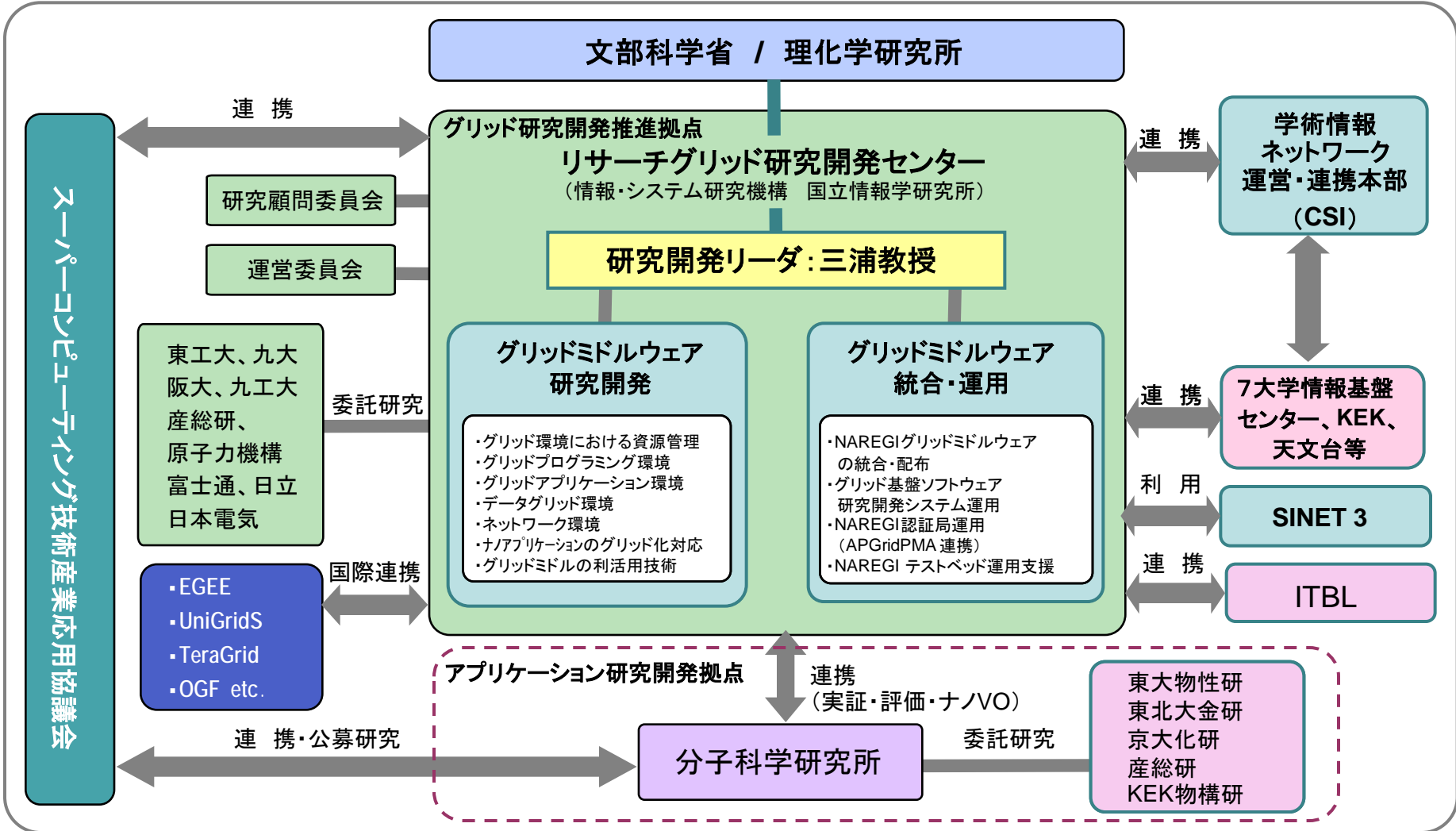
2009年2月18日  
国立情報学研究所  
リサーチグリッド研究開発センター

三浦 謙一

# 研究開発目標と経過

	平成15年度	平成16年度	平成17年度	平成18年度	平成19年度	平成20年度
	研究開発		評価	実証	高度化・強化	
研究の推移	要素技術の プロトタイプ開発 / ナノサイエンスで評価		国際 評価	公開	事後評価委員会 △ (5/13)	
	α 版 OGSAプロトタイプ					分子研・7センター 等評価
	WSRFに対応 した仕様へ変更		β 版 (OGSA/WSRF)	分子研・ 7センター等評価		
	当初の最終版の機能 + 研究環境に対応した機能		国際連携実証	β 版 - II (OGSA/WSRF) / ・ナノ実証研究 ・大規模実証		
			運用対応の 機能を追加	NAREGIミドルウェア Ver. 1.0	公開(5/9) △	
体 制	分子科学研究所による実証評価		・ナノ分野による分野別研究機関での運用評価			阪大・東工大 連携運用
			データグリッド研究開発グループを新設			
			グリッド作業部会設立 (2006/06)			グリッド作業 部会メンバー 等に順次導入
		△ グリッド作業部会メンバーの評価 ・情報基盤センターでの運用 に必要な機能等の評価				

# NAREGIプロジェクトの研究開発体制

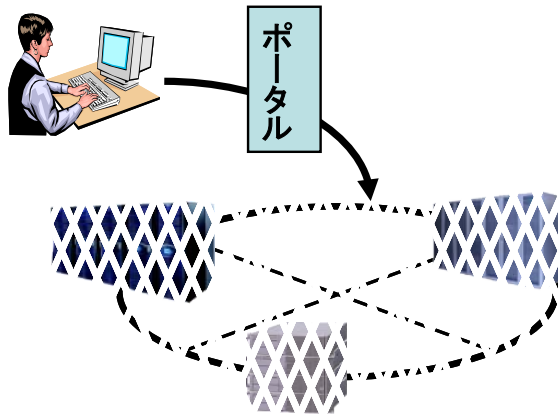


# 研究開発成果：NAREGIミドルウェアVer.1.0の主要機能

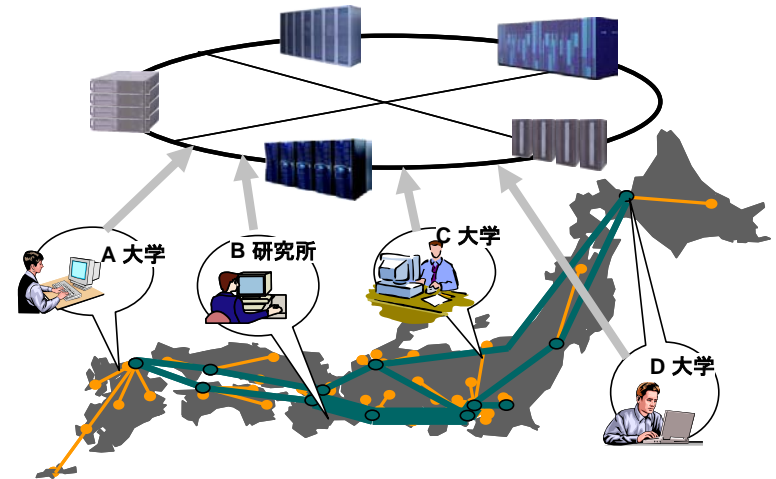
<p>計算科学をサポート</p>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1) 予約によるジョブ実行によるアーキテクチャの異なる計算資源間での連成解析</li> <li>2) バルクジョブ実行</li> <li>3) GridMPI、GridRPCの組み込み</li> <li>4) 資源管理と連携したデータグリッド</li> </ol>
<p>研究コミュニティをサポート</p>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1) VO (Virtual Organization) 単位のサービス</li> <li>2) VO管理に必要なアクセス管理・制御・管理機能設定</li> <li>3) VO単位でのデータ、及びアプリケーションの共有</li> </ol>
<p>利用環境の高度化・平準化</p>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1) ポータルにより平準化された利用環境</li> <li>2) GUIによる計算資源を意識しない操作、利用</li> <li>3) コマンドラインインターフェイスによるアプリケーション管理とジョブ実行</li> <li>4) 適合した計算資源の自動選択</li> </ol>
<p>運用をサポート</p>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1) 計算資源利用効率向上 予約ジョブ実行と非予約ジョブ実行の両立等</li> <li>2) 管理者支援機能</li> <li>3) グリッドジョブとローカルスケジューリングジョブの共存</li> <li>4) インストール・運用性の向上</li> </ol>

# NAREGIミドルウェアVer.1.0による研究環境

計算資源、分散した大規模データを意識せずに利用

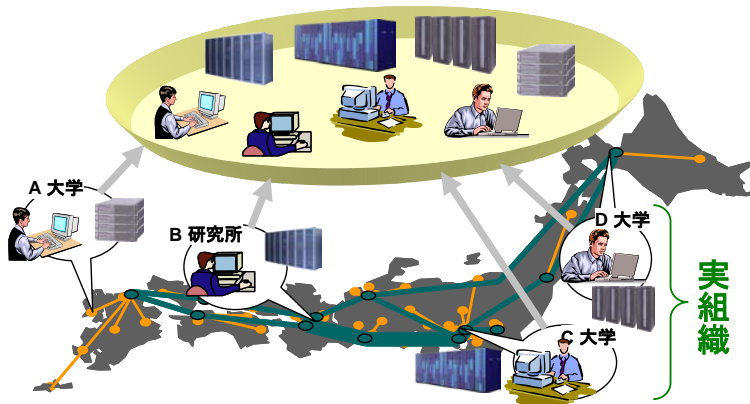


計算・研究資源をどこからでも同じように使える平準化された環境

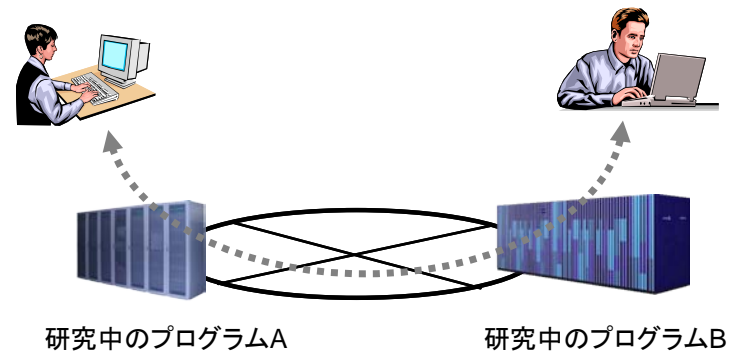


バーチャルな研究コミュニティ (VO)を容易に形成

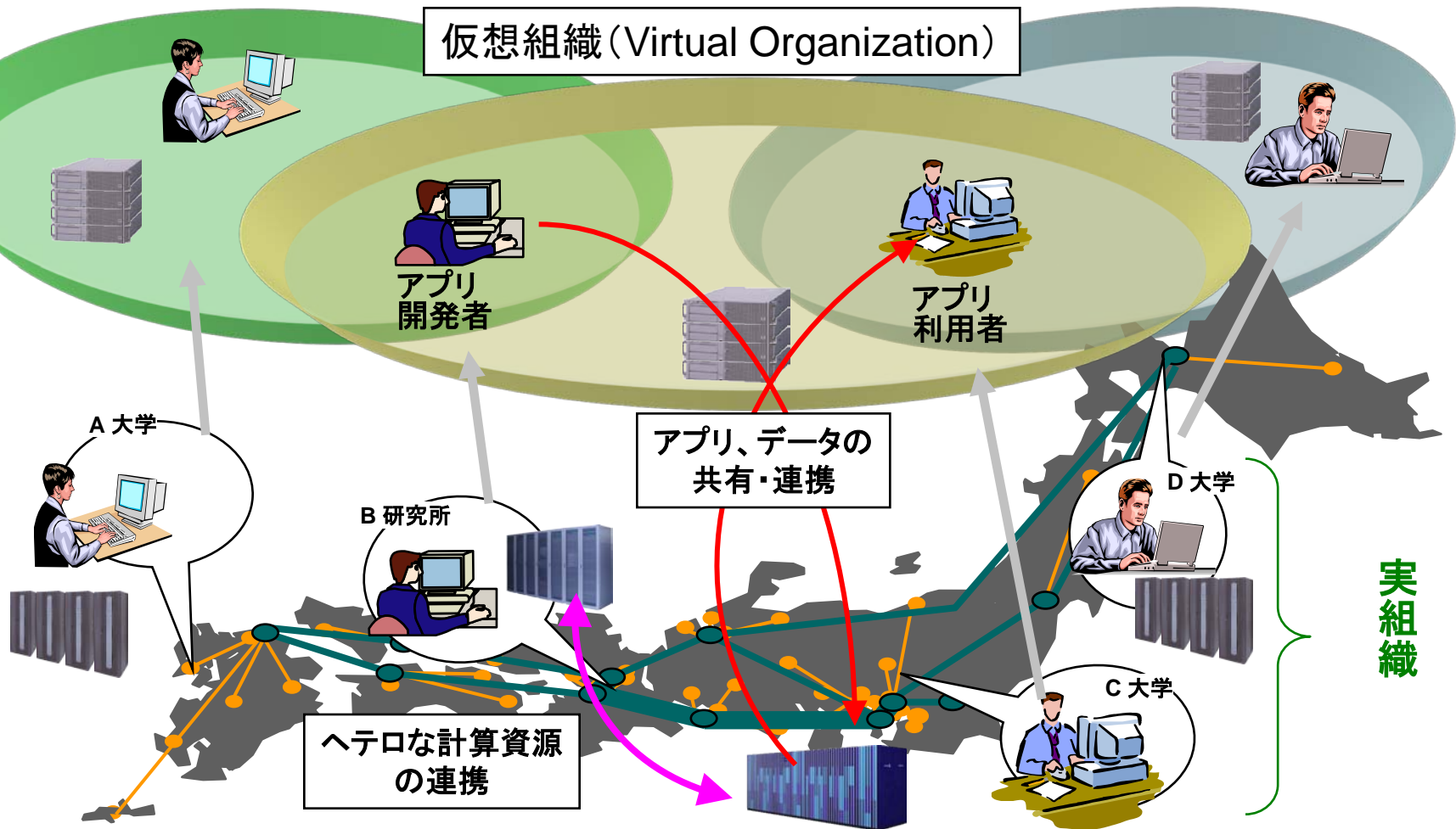
仮想組織 (Virtual Organization)



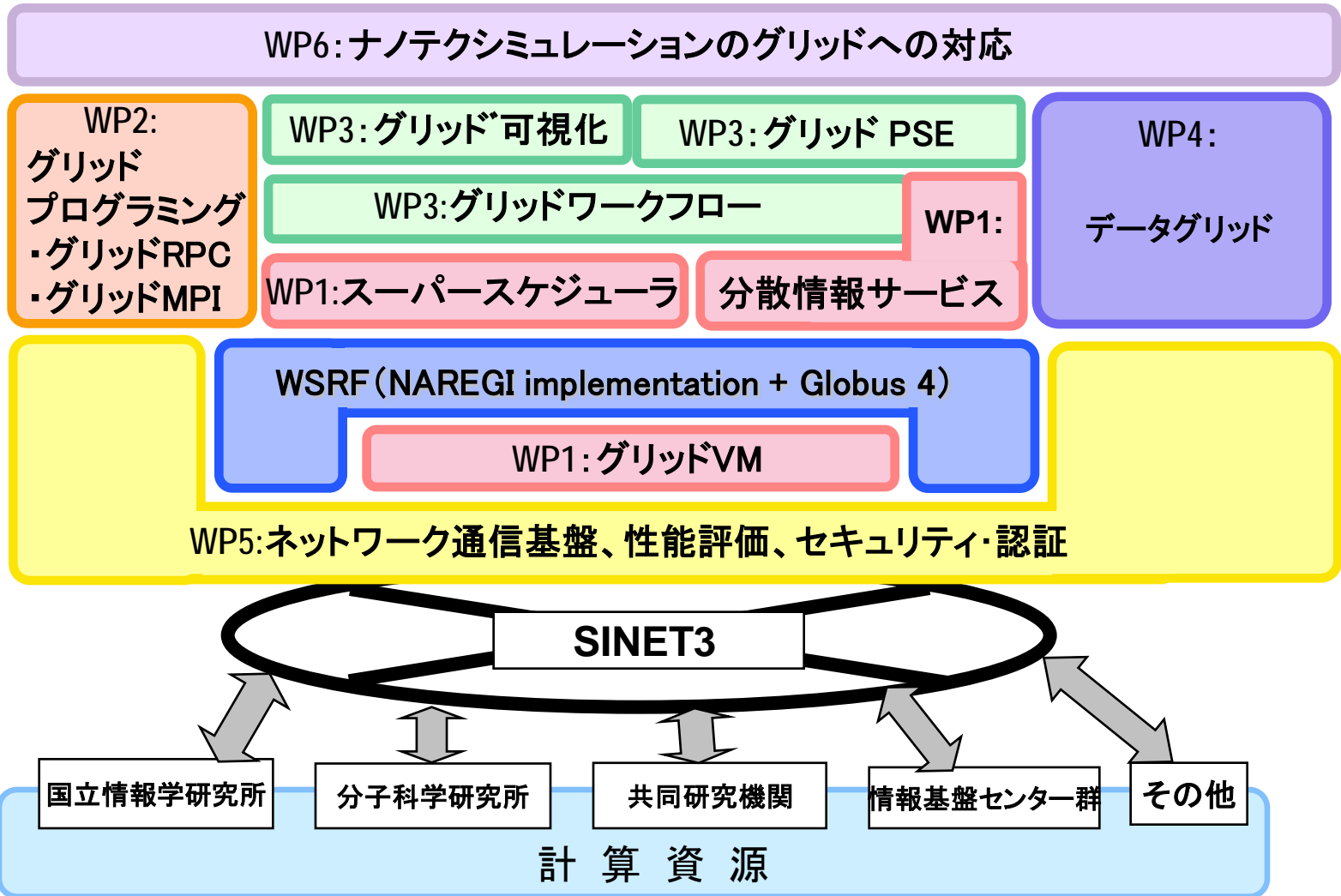
計算・研究資源を連携した研究が容易 (リアルタイムコラボレーション)



# VOによる研究コミュニティのサポート



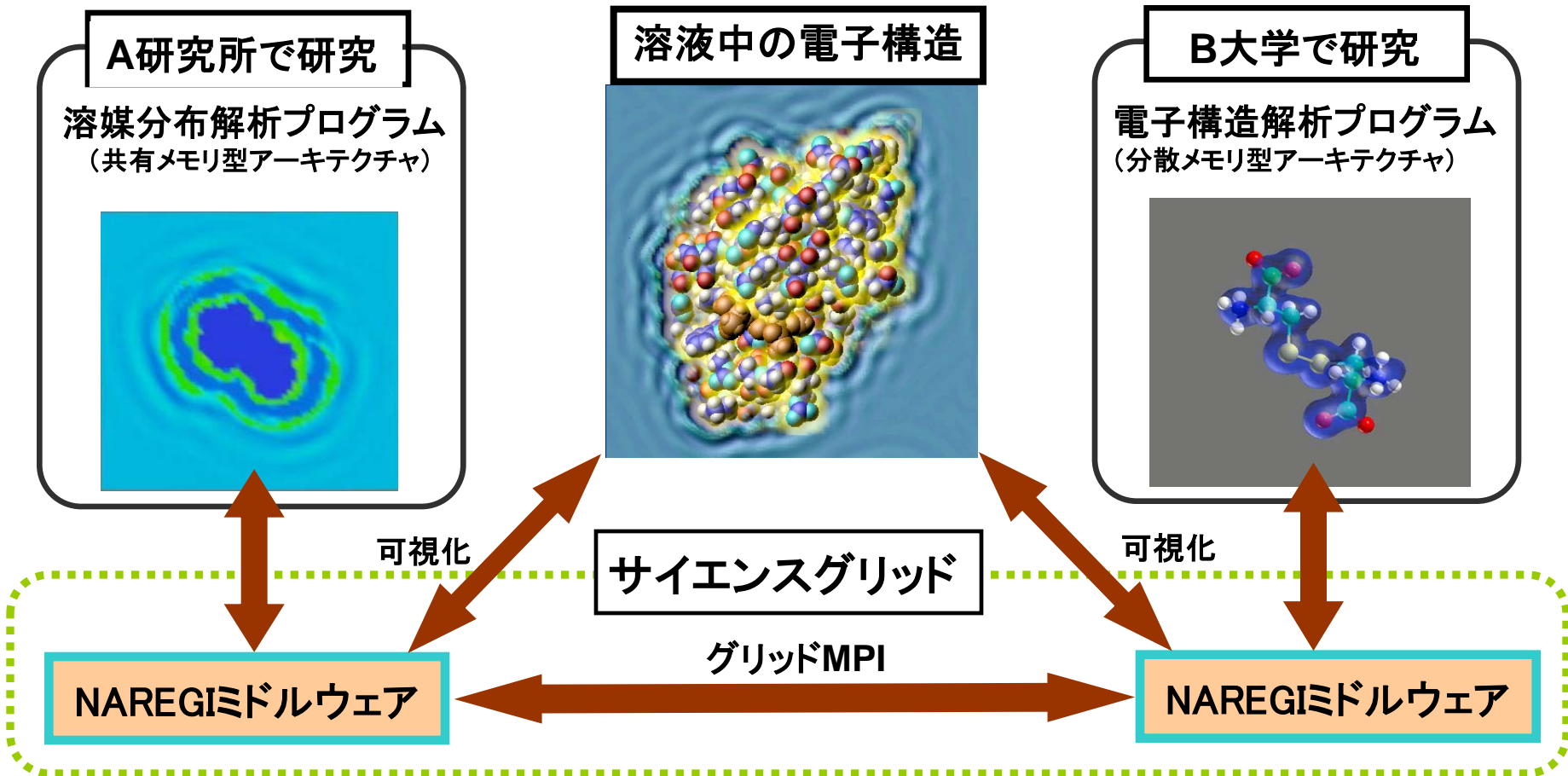
- 1) 研究連携を容易にし、研究コミュニティをサポート
- 2) アプリケーション、データなど研究分野の「知」を蓄積



PSE: Problem Solving Environment (問題解決環境)

# NAREGIミドルによる研究の高度化・強化

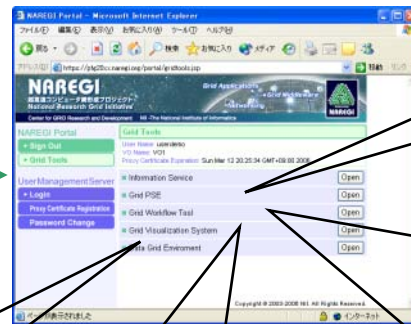
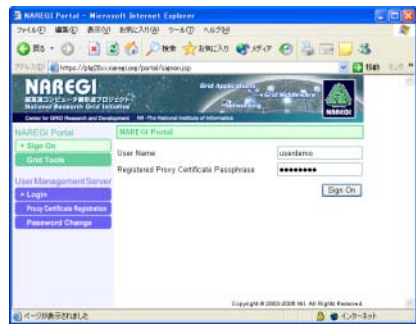
- 1) 大学・研究機関で研究中のアプリケーションをリアルタイムで連携し、研究を高度化
- 2) 研究の真髄であるアプリケーションを「知」として蓄積し、相互に活用し研究力を強化
- 3) 今後重要となるマルチフィジックスモデルの連成解析をサポートし、研究を高度化





# NAREGIミドルウェアVer.1.0の利用環境

ポータルからSingle Sign On

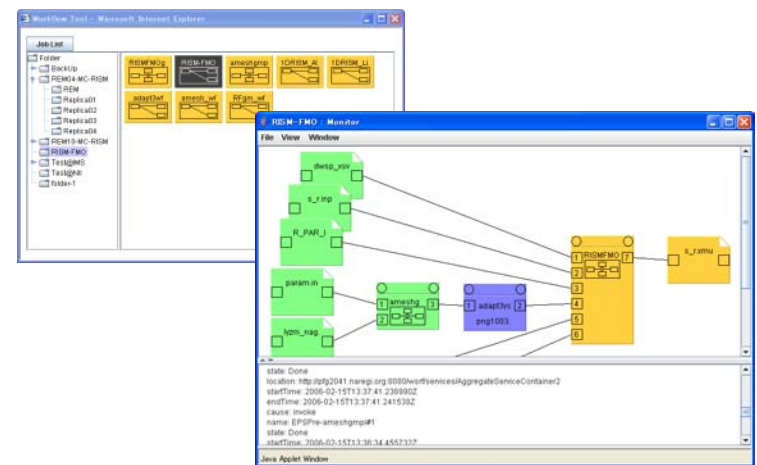


## ① PSE (Problem Solving Environment)

- ・アプリケーションプログラムを適切な計算資源に登録・配置し、コンパイル。

## ② WFT (Work Flow Tool)

- ・利用するデータの取り込み、計算処理手順などをGUIアイコンの組み合わせにより設定。
- ・ジョブの投入、進捗のモニタ
- ・WFTに組み込まれた処理要件に基づき、スーパースケジューラが計算資源を自動選択

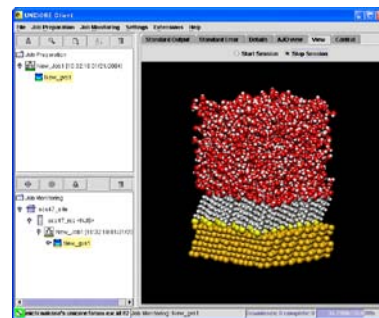


## ④ データグリッド

- ・グリッド環境でのファイルの配置・登録
- ・共有ファイルシステムへのインポート
- ・WFTと連携した計算処理へのデータの取り込み。

## ③ グリッド可視化

- ・グリッド上に分散した計算結果を分散したまま可視化。



# NAREGIミドルウェアの実証評価

## 分子科学研究所での実証

分野別研究機関のモデルとして実施

- 1) 2005年4月からα版で実証研究
- 2) 2006年5月からβ版で実証研究
- 3) 2007年6月からβ版- II で実証研究

- ①メタコンピューティング、ハイスループットコンピューティング、リアルタイムコラボレーションの実証研究を実施。
- ②22件のナノサイエンスアプリケーションによるミドルウェア実証研究を実施。
- ③問題解決、機能向上などを共同で推進し、実証研究へのフィードバックおよびNAREGIミドルウェアVer1.0への反映。
- ④ナノサイエンスVOの構築

## 情報基盤センターでの実証

情報基盤センターでの利用モデルとして実施

- 1) 2005年11月からα版を限定配布により評価
- 2) 2006年5月からβ版を公開配布により評価
- 3) 2007年7月からβ版- II による実証環境を阪大、東工大に構築
- 4) 2007年10月からグリッド作業部会メンバーに限定公開し、評価

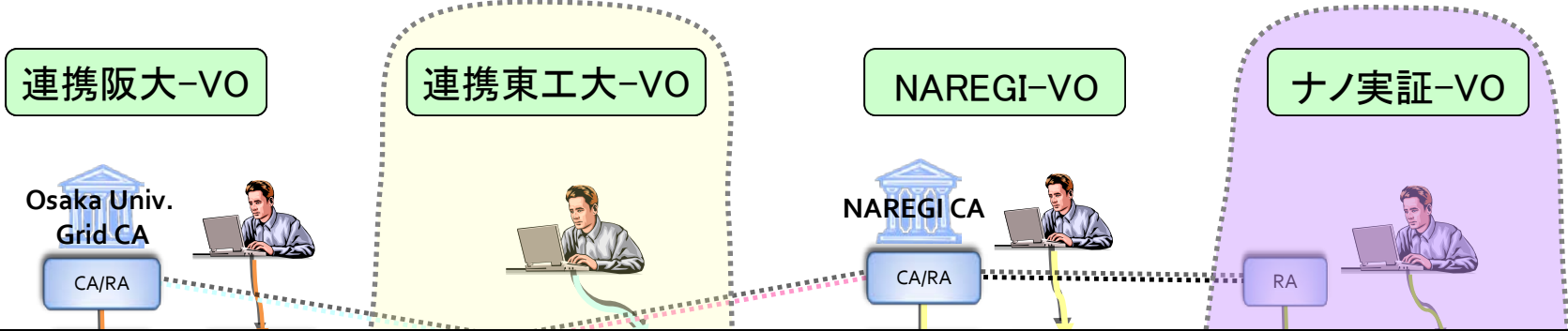
- ①認証ポリシーが異なるセンター間の相互連携
- ②VO形成、相互の資源予約管理
- ③運用関係の評価

KEK-NAOJ解析連携環境

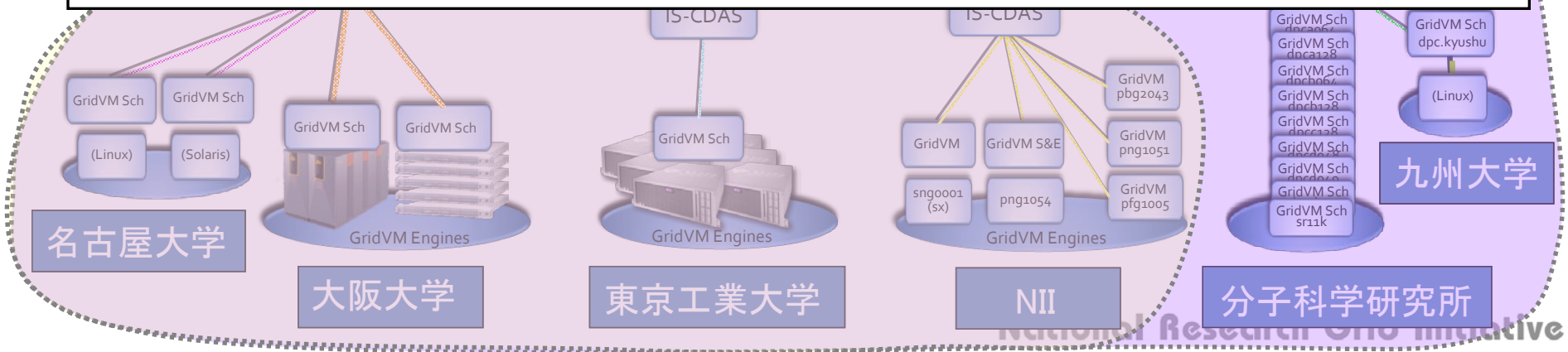
大規模実証実験を2008年3月に実施し、100テラフロップスのグリッド環境が構築しうることを確認

(大阪大学、東京工業大学、九州大学、名古屋大学、分子科学研究所、グリッド研究開発推進拠点)

# 大規模実証実験環境の構成

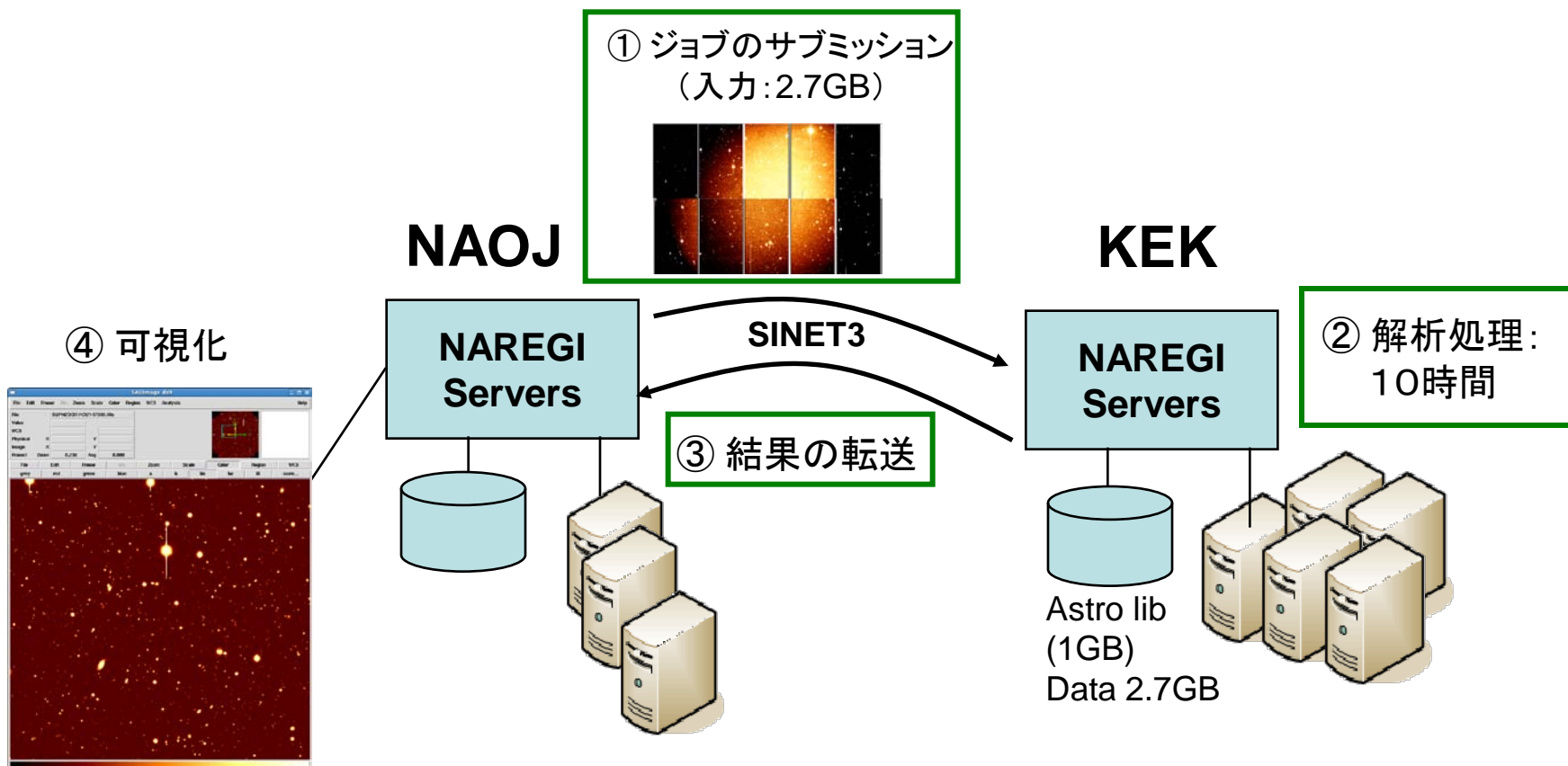


- 1) 6機関を接続し、50テラフロップスレベルの連携実験環境を構築
- 2) 6機関とも参加接続形態が異なり、実運用に近い多様な利用形態を確認
- 3) 計算機センターで運用中のシステムに導入し、複数の認証局が発行した証明書の相互利用を含めた大規模接続を実証
- 4) サイトまたがりのGridMPI、12時間クラスの大規模連成計算の動作を確認

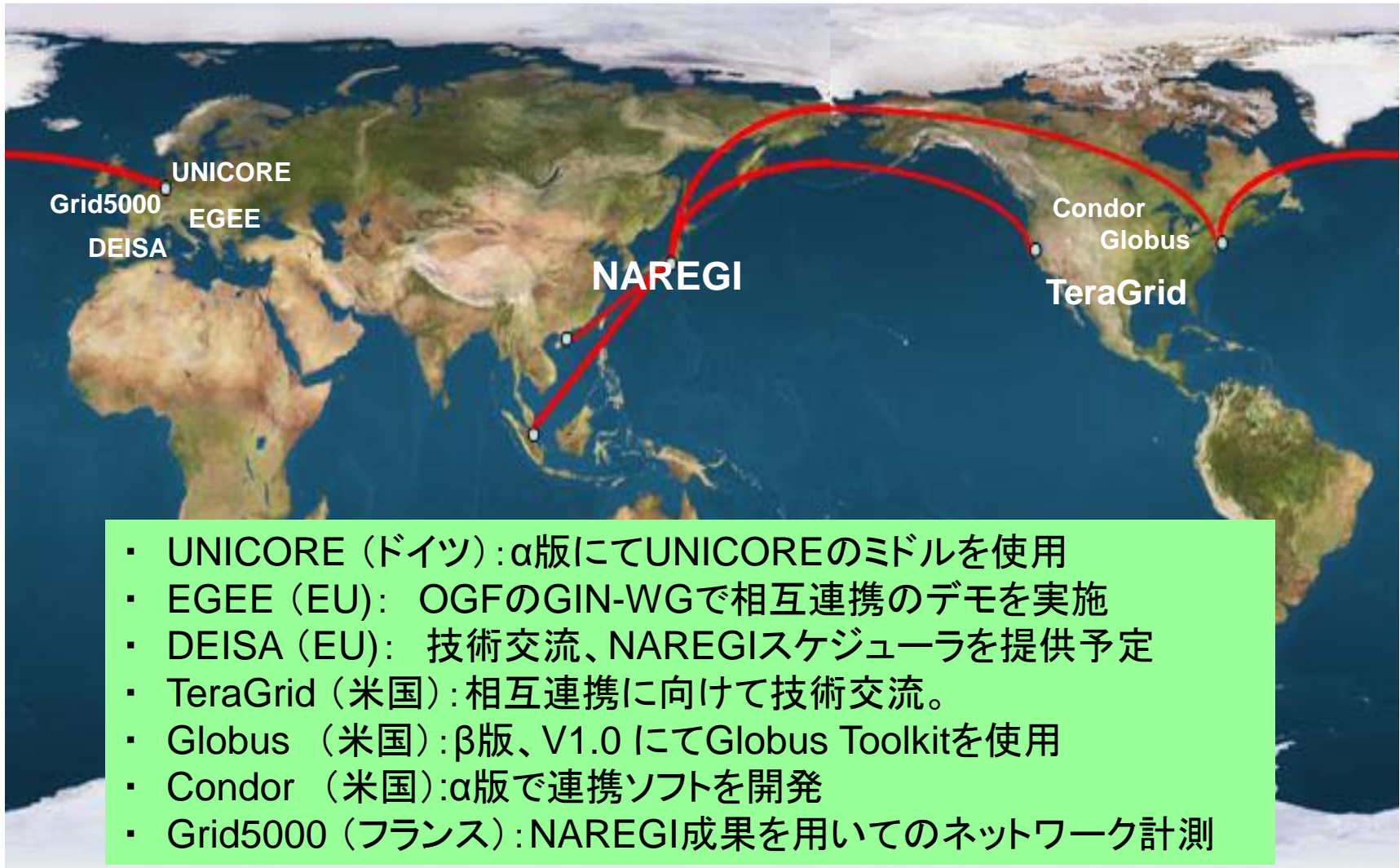


# KEK-NAOJ連携解析環境実証

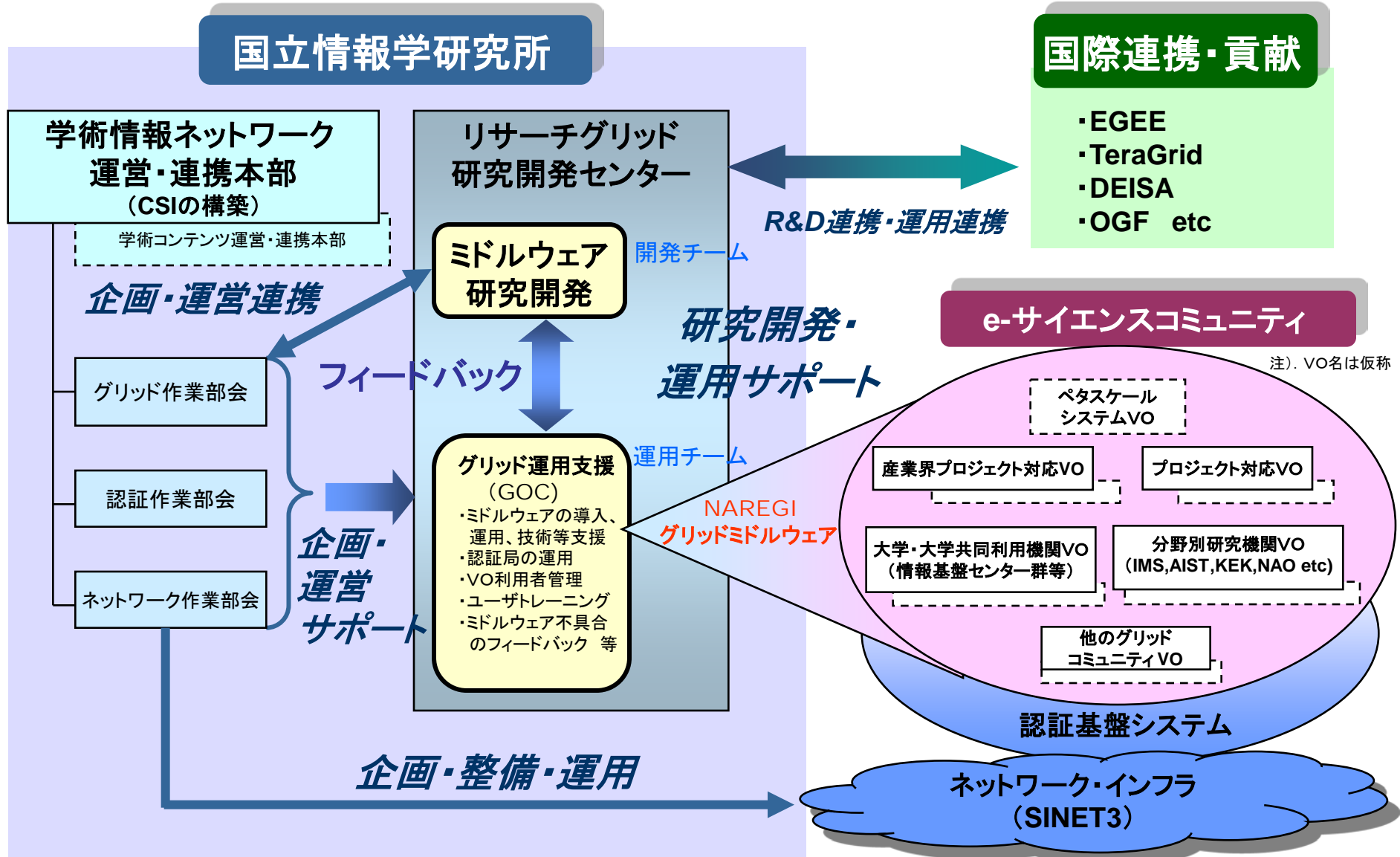
- 両研究機関に共通する大量データの解析環境の実証評価実験
- 両研究機関でNAREGIα版、β版を導入して評価
- KEK-NII 連携テスト（平成19年10月）
- KEK-NAOJ 連携テスト（平成20年3月）



# 海外のグリッドプロジェクトとの連携



# NAREGIグリッド運用モデル (2008~)



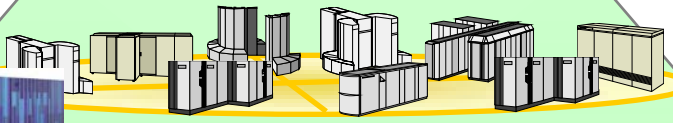
# 科学技術・学術研究の基盤となるスパコンネットワークの構築

次世代スパコン



大規模データを扱う計算を得意とするスパコン [NLS]

大学・研究機関のスパコン



主に中規模データを扱う計算を得意とするスパコン [NIS]

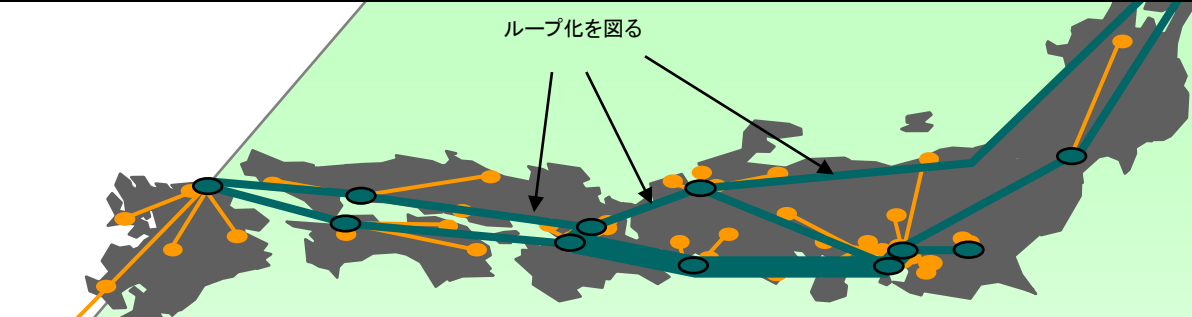
世界のグリッドと繋がる

EGEE

TeraGrid

スパコンを中核としたネットワークによって、様々な規模のスパコンの各々が連携しながら計算を行えることで、我が国の計算資源を効率的に利活用することができる。

ループ化を図る



- : 1G~10G
- : 10G
- : 20G~40G

学術情報ネットワーク

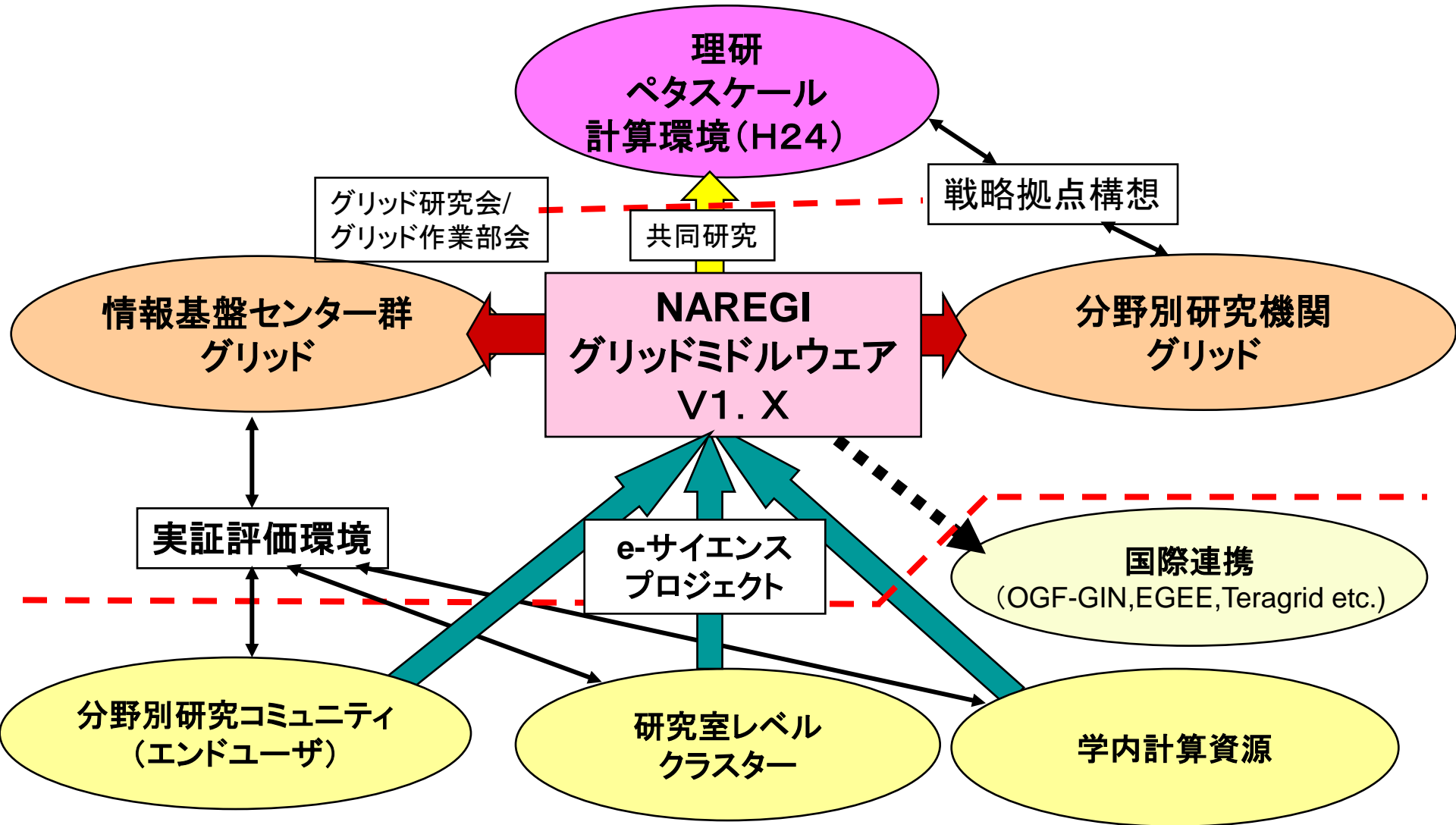
研究室レベルのシステム

主に小規模データを扱うPC及びPCクラスタ [LLS]

ユーザが日頃使用しているPC及びPCクラスタ (LLS) から大学・研究機関のスパコン (NIS)、さらには次世代スパコン (NLS) へと気軽に利用できる環境を実現する。

安心して研究教育に専念できるシームレスな研究環境の完成

# 次世代計算研究環境としての展開





題:

- ① 研究室レベルのPCクラスタ、大学・研究機関等のスーパーコンピュータ、次世代スーパーコンピュータといった様々なコンピュータからなる重層的な環境において、より処理能力の高いコンピュータを活用しようとした場合に、アプリケーションプログラムの書き換え等が必要となり、スムーズな移行が困難である
- ② 異なる組織や遠隔地の研究者が、データやソフトウェアを共有して共同研究を行おうとする場合に、PCクラスタやスーパーコンピュータ等の間のデータ共有やコンピュータの効率的かつ柔軟な活用等が求められている。

研究開発の概要:

e-サイエンス基盤(ITを活用した科学技術の研究開発のための計算科学基盤)を実現し、全国に分散する様々なコンピュータを、ユーザがそのニーズに応じて容易に利活用することを可能とするため、以下のようなソフトウェアを開発する。

様々なコンピュータにおいて、プログラムを改変せずに各コンピュータで最適に実行するためのコンパイラ(プログラミング言語で記述したソフトウェアの設計図を、コンピュータが実行できる形式に変換するソフトウェア)、ライブラリ(ある特定の機能を持った汎用性の高いプログラムを部品化し、他のプログラムから利用可能としたソフトウェア)等のシステムソフトウェア

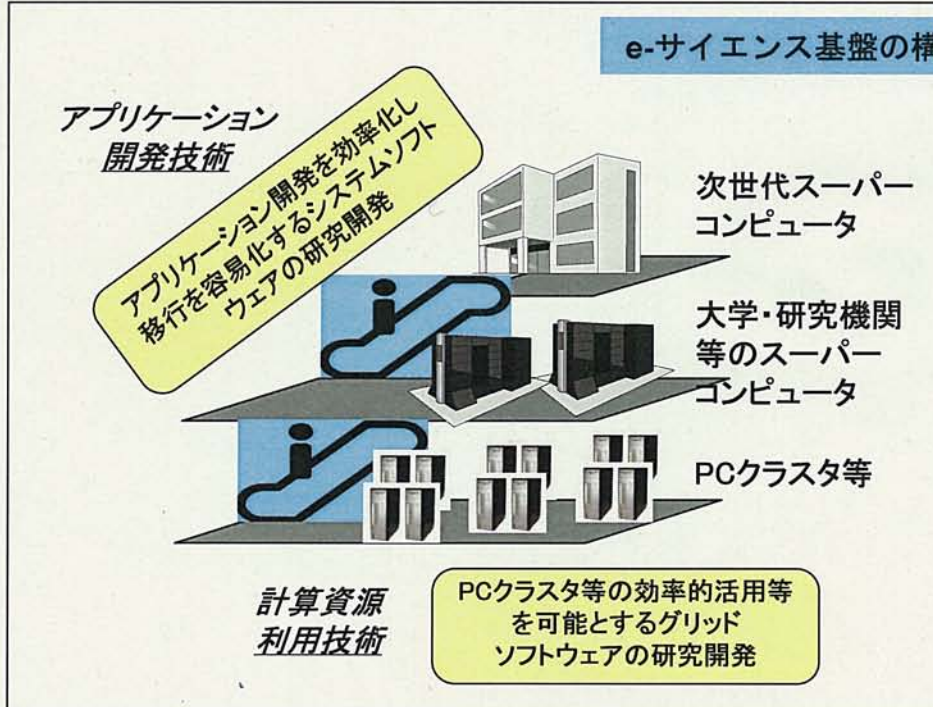
PCクラスタやスーパーコンピュータ等の間で、データ共有やコンピュータの効率的な活用等を可能とするグリッドソフトウェア(インターネット上にある計算資源を結びつけ、複合したシステムとして利用可能とするソフトウェア)

研究開発体制:

公募により選定された①東京大学(研究代表者:石川裕教授)及び②NII(研究代表者:三浦謙一教授)を研究拠点とし、研究開発や普及活動を4年間実施する。

実用化に向けた取組み:

- 開発段階  
ユーザのニーズを取込み、仕様設計等を行うとともに、ユーザによる有用性の検証を行う体制を構築し、実用化が期待できるソフトウェアを開発する。
- 開発段階から大学の情報基盤センターに設置された高性能計算機やストレージを実証評価基盤として使用し、開発に反映させる。
- 開発後  
開発したソフトウェアを、フリーソフトウェアとして公開するとともに、普及活動を行い広く研究者等の利用を促進する。
- ソフトウェアを継続的に保守・更新する体制を本事業に参画した機関を中心に構築する。



# 背景と目的

## ■ e-サイエンス

- 計算機やデータ、ユーザ等からなる研究コミュニティを柔軟に形成することにより実現する新たな科学技術研究手法

## ■ e-サイエンスの実現

- 単一のグリッドによる研究基盤とコミュニティの形成からさらに発展の段階へ
- 運用形態の異なる資源間の連携が新たに必要。
  - 研究室レベルの資源と情報基盤センターレベルの資源の連携
  - 異種グリッドミドルウェア間の連携

## 目的

研究室の資源(LLS)、情報基盤センターの高性能資源群(NIS)、異種グリッドミドルウェア上で提供される計算、データ、データベース等を柔軟に共有・連携させ、仮想研究コミュニティを形成しかつ運用するための基盤技術を確立する。

計算アプリケーションユーザ

データベースユーザ

アプリケーション開発者



**サブテーマ(1) 計算連携**  
目的: 研究室レベル・情報基盤センターレベル間でのシームレスなジョブ実行技術に関する研究  
H20年度計画:  

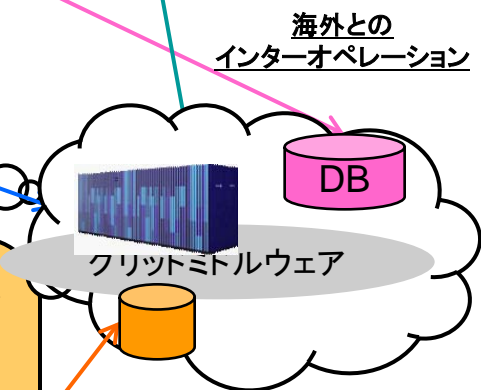
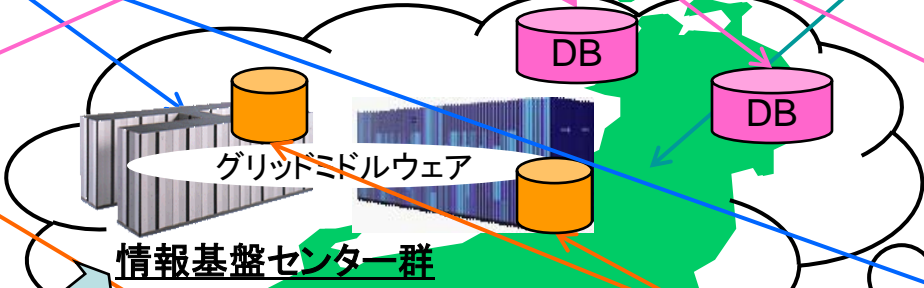
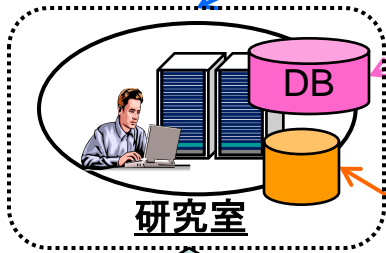
- ワークフローシステムの検討, プロトタイプ設計および実装着手
- 異種グリッド環境間の相互運用アーキテクチャの検討, プロトタイプ設計および実装着手
- アプリケーション共有方式検討, プロトタイプ設計

**サブテーマ(3) データベース連携**  
目的: 異種データベースの連携・統合, ユーザ認証情報の管理技術に関する研究  
H20年度計画:  

- データベース連携・統合ミドルウェアの設計, 実装方法の検討
- ユーザ認証情報管理ツールの設計, プロトタイプの実装

**サブテーマ(4) アプリケーションインターフェース**  
目的: 異種グリッド環境下でのアプリケーション開発者向けインターフェースに関する研究  
H20年度計画:  

- 要素技術およびユースケース調査
- 設計着手



**サブテーマ(5) 実証評価・ユーザ連携**  
目的: 実証評価基盤の構築, 情報基盤センターおよびエンドユーザと連携した実証評価  
H20年度計画:  

- 事前実証評価環境の構築および計測評価技術の開発
- 研究室レベル・情報基盤センターレベル間でのデータ共有技術に関する事前評価

情報基盤センターユーザ

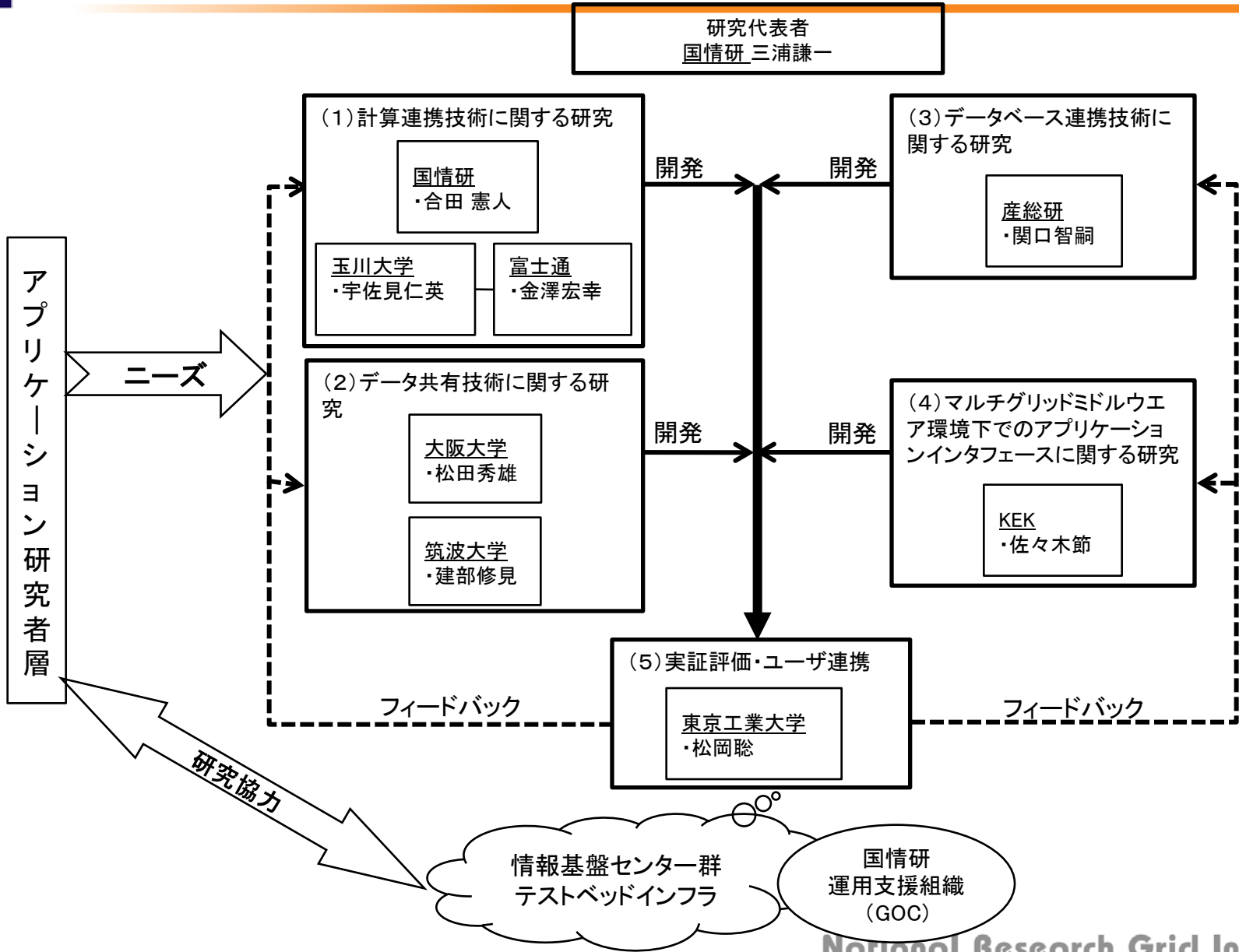
NII CSI委託事業

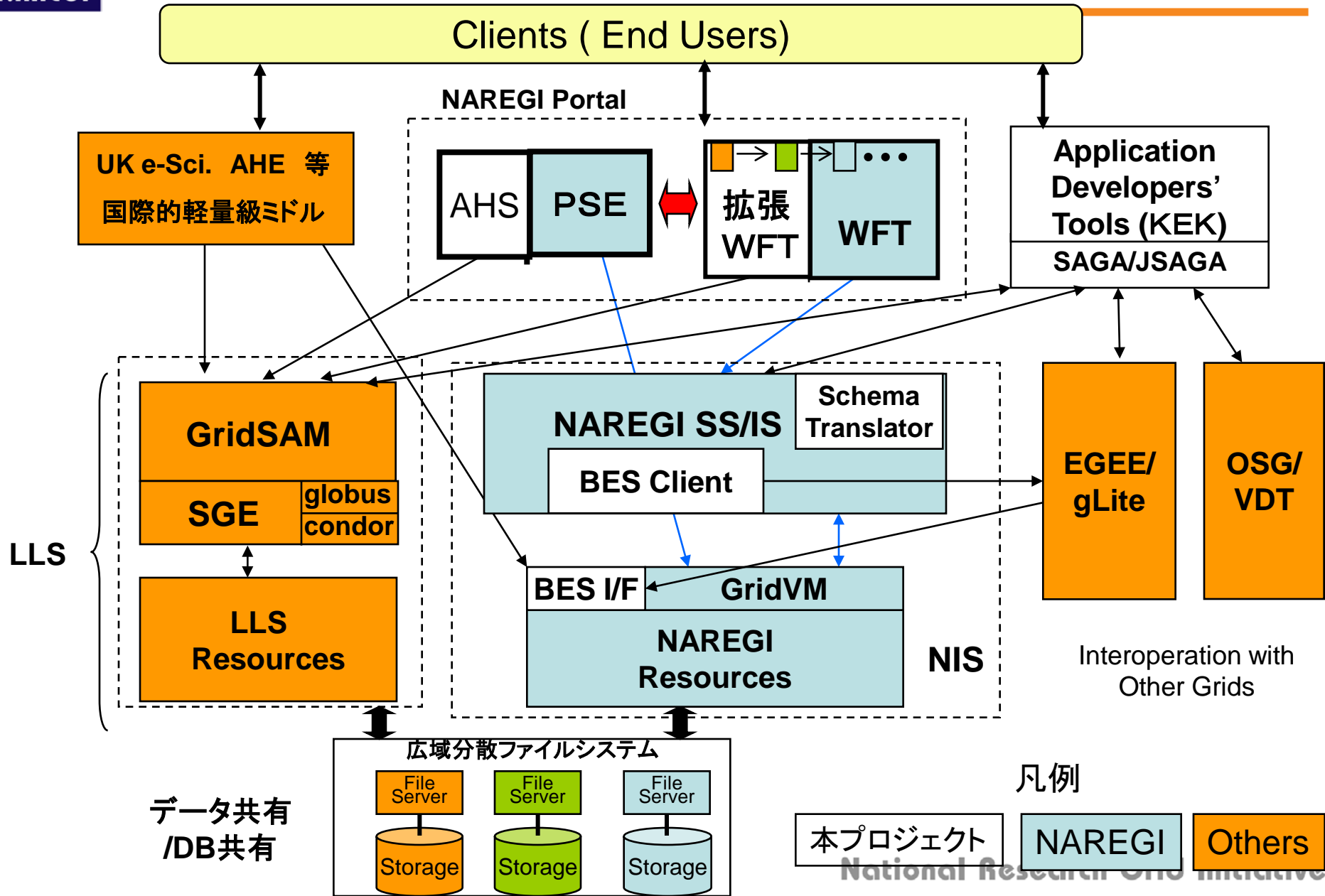
**サブテーマ(2) データ共有**  
目的: 研究室レベル・情報基盤センターレベル間, 異種グリッド環境下でのデータ共有技術に関する研究  
H20年度計画:  

- 研究室レベル・情報基盤センターレベル間の分散ファイルシステムの設計, 基本機能の実装.
- 異種グリッドミドルウェア環境下のファイルカタログシステムの基本機能の開発



# 実施体制





# 総合開発スケジュール

	H20	H21	H22	H23
(1)計算連携技術				
(2)データ共有技術	基本設計	プロトタイプ実装 ・評価	機能強化	実証評価
(3)データベース 連携技術	プロトタイプ 実装着手	詳細(機能)設計  システム実装	実証評価	品質向上
(4)アプリケーション インタフェース				
(5)実証評価・ ユーザ連携	実証評価基盤構 築・計測評価技術 開発  LLS・NIS計算資源 調査, ユーザ開拓 着手	実証基盤仮運用  ユーザ開拓拡張  実証評価および 開発へのフィード バック	実証基盤拡張・ 運用  実証評価および 開発へのフィード バック	運用レベル実証評 価および開発への フィードバック  ユーザ利用促進
予算	1.64億円	1.46億円	?	?

# LLSレベルの計算資源の開拓と 実証評価基盤への取り込み

- NISからの「プロトタイピング」と「プロモーション」によるインセンティブを示してLLS連携を開拓
  - 身近なNISとの連携により実証評価基盤へマイグレートしていく
    - e.g. 大阪大学サイバーメディアセンター
      - 超高圧電子顕微鏡センター
      - 核物理研究センター (JLDG: Japan Lattice Data Grid)
      - レーザーエネルギー学研究中心
    - e.g. 名古屋大学情報基盤センター
      - 太陽地球環境研究所