

グリッドコンピューティングと名大センターの取り組み

永 井 亨 津 田 知 子

．はじめに

ここ2, 3年“グリッド”という言葉が計算機分野で耳にすることが多くなってきました。本センターでも、2001年度にスーパーコンピュータにグリッド用のソフトウェアが、2002年度にはグリッド用のシステムが導入されたりと、徐々にその取り組みが行われています。本稿では、グリッドコンピューティングとは何なのか、本センターの取り組みの状況をシステムを中心に紹介することにします。

．グリッドコンピューティングとは

グリッド (grid) という言葉は、もともと電力供給網 (electric power grid) のアナロジーからきています〔1〕。すなわち、コンセントに電気製品のプラグを差し込めば、電気がどこの発電所で発電され、そこからどういう経路をたどって送られてきたかを意識することなくいつでも利用できるように、グリッドコンピューティングは、計算機・ストレージシステム・(大規模な)観測装置や計測装置から出力されるデータ・アプリケーションソフトウェアなどの地理的に分散したさまざまな資源をネットワーク (Internet) に接続することにより、これらの資源の所在を意識することなく、仮想的に統一された利用環境 (すなわち、“どこでも”、“誰でも”が利用できる環境) を提供しようというものです。

グリッドコンピューティングでは、利用者・計算機・データ・ソフトウェア等をあたかも1つのシステムとしてみなす「仮想組織」(virtual organization) という概念を導入し、資源の共有や動的な配分・データの共有連携・認証等のセキュリティの機能を備えている点で従来の分散並列処理と異なるといえるでしょう。例えば、実在する計算機センターは複数の仮想組織に属していてもよく、また、その計算機センターの計算機A・Bについて、Aは仮想組織Pだけに属していて、一方、Bは仮想組織PとQに属する、ということもあり得るのです(図1参照)〔2〕。そして、グリッドコンピューティングにより、複数のスーパーコンピュータを接続して演算処理能力を格段に高めたり、世界的にみても数の少ない特殊で高価な観測装置や、実験装置から得られる膨大なデータを共有したりすることが実現できると期待されています。

グリッドコンピューティングは表1のように4つの層からなる階層構造をとります〔3〕。

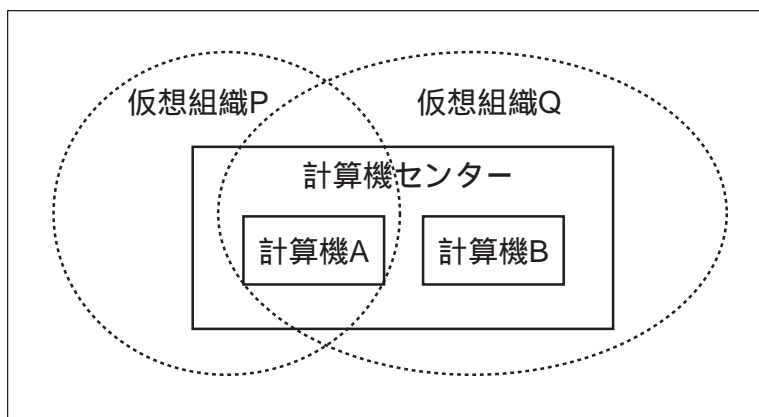


図1 仮想組織と実在する資源の関係

表1 グリッドコンピューティングの階層構造

第1層	基盤	計算機，ストレージ，データ，ネットワーク，OS，通信プロトコル等
第2層	ミドルウェア	スケジューラ，資源管理，セキュリティ，データアクセス，情報サービス等
第3層	上位ツール	コンパイラ，可視化ツール，数学ライブラリ，通信ライブラリ等
第4層	アプリケーション	distributed supercomputing， high-throughput computing， data-intensive computing 等

グリッド構築に向けて米国や欧州各国でプロジェクトが進行中で，日本でもITBL（IT-Based Laboratory）〔4〕，スーパーSINET〔5〕，NaReGI（National Research Grid Initiative）などのプロジェクトが進行中です。

これまでのグリッドコンピューティングに関する活動は第2層のミドルウェアの開発が中心で，実装されたものとしてはGlobus Toolkit〔6〕，UNICORE〔7〕，STA〔8〕などがあります。また，グリッド技術とWebサービスとを統合したグリッドシステムアーキテクチャの標準化を目指してOGSA（Open Grid Services Architecture）プロジェクト〔9〕も進行中で，これは科学技術分野だけでなくビジネス分野への応用をも視野に入れていきます。OGSAにより，分散環境，異機種プラットフォーム環境，動的な仮想組織にわたるサービスを統合することが可能となります。したがって，高信頼でスケーラブルで，エンドユーザにとっては，性能保障（QoS）が可能なシステム構築ができることとなります。

本センターは，スーパーSINETプロジェクトに全国共同利用の情報基盤センター群（当センターのほかには北海道大学情報基盤センター，東北大学情報シナジーセンター，東京大学情報基盤センター，京都大学学術情報メディアセンター，大阪大学サイバーメディアセンター，九州大学情報基盤センター及び国立情報学研究所があります）の一員として参加しています（図2）。単一

のスーパーコンピュータでは達成できないような超大規模計算の実現，各センターのマシンのアーキテクチャに適した計算を分配することによる効率向上，処理負荷の分散によるレスポンスとサービスの向上，大量データの高速処理などの実証的研究を推進しています。ただし，各センターのスーパーコンピュータは全国共同利用のサービスマシンとして高稼働率を維持していますから，グリッド研究のために割ける資源は限定的なものにならざるを得ません。このため，各センターは昨年度，表2に示すようなグリッドコンピューティングシステムを導入しました。

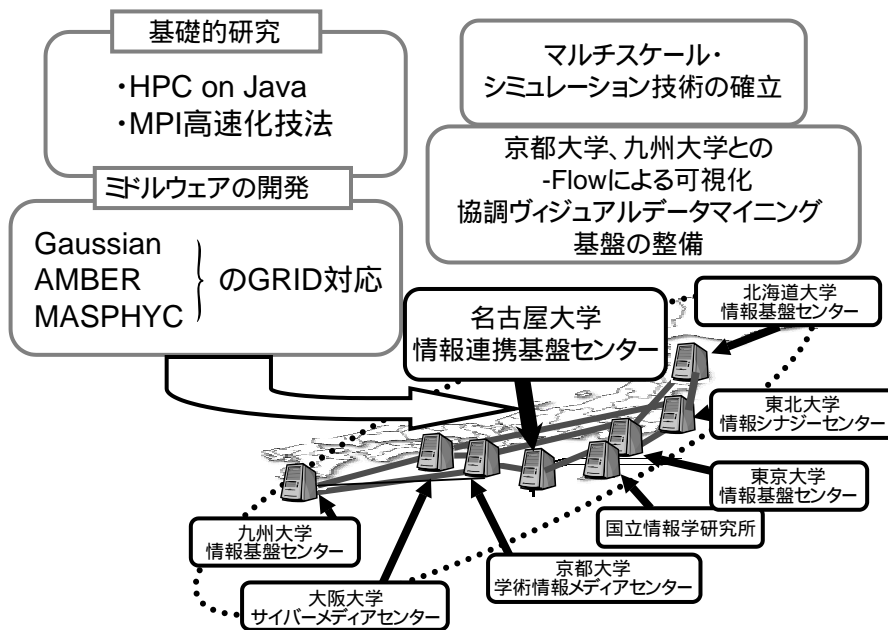


図2 本センターのグリッドコンピューティングへの取り組み

表2 導入されたグリッドコンピューティングシステム

北大センター	Onyx300による可視化サーバとSR8000/Compact
東北大センター	SX-7GIによるグリッドシステム
東大センター	グリッド研究・教育用計算機システム(並列計算機, PCクラスター)
名大センター	PRIMEPOWER HPC-2500, 32CPU*2ノード
京大センター	PRIMEPOWER HPC-2500 96CPU
阪大センター	CAVE, Onyx300によるデータグリッドシステム
九大センター	PRIMEPOWER850*2ノード(32CPU), ディスクアレイ

本センターではスーパーコンピュータVPP5000にGlobus Toolkitをインストールし，京大センターのVPP800との間で，Globusを用いた分散並列処理の基礎的な性能測定を行いました〔10〕。また，京大センターのVPP800から本センターのVPP5000にジョブを投入し，VPP5000上の流体解析システム -FLOWで計算した結果を京大センターで可視化するという遠隔可視化実験にも成功しています。おそらく，ベクトル計算機同士を接続したグリッドコンピューティングは世界でも初

めてではないかと思われます。

表 2 に示したように、本センターにはグリッドコンピューティングシステムとしてFujitsu PRIMEPOWER HPC2500（以下HPC2500と呼びます）が導入されましたので、今後はHPC2500を中心として研究を進めることになります。

・グリッド用システムのネットワーク構成

前述したようにスーパーSINETのグリッドプロジェクトは、7センターを中心にして、構築されています。本センターのシステムが、このグリッドプロジェクトとどのように接続されているかを図3に示します。本センターでは、現在、スーパーコンピュータVPP5000とグリッドコンピューティングシステムとして新規に導入されたグリッドシステムngrd1、ngrd2がグリッドプロジェクトのために使用できます。これらのシステムでは、グリッド用のソフトウェアであるGlobusやMPICH-G2が動作するようになっています。しかしながら、スーパーコンピュータVPP5000は、サービス運用中のシステムであり、その利用率が極めて高くなっているため、グリッドコンピューティングの技術開発と実証実験を行うことはほとんど不可能な状態です。この目的のために前年度の補正予算で導入されたのが、HPC2500です。

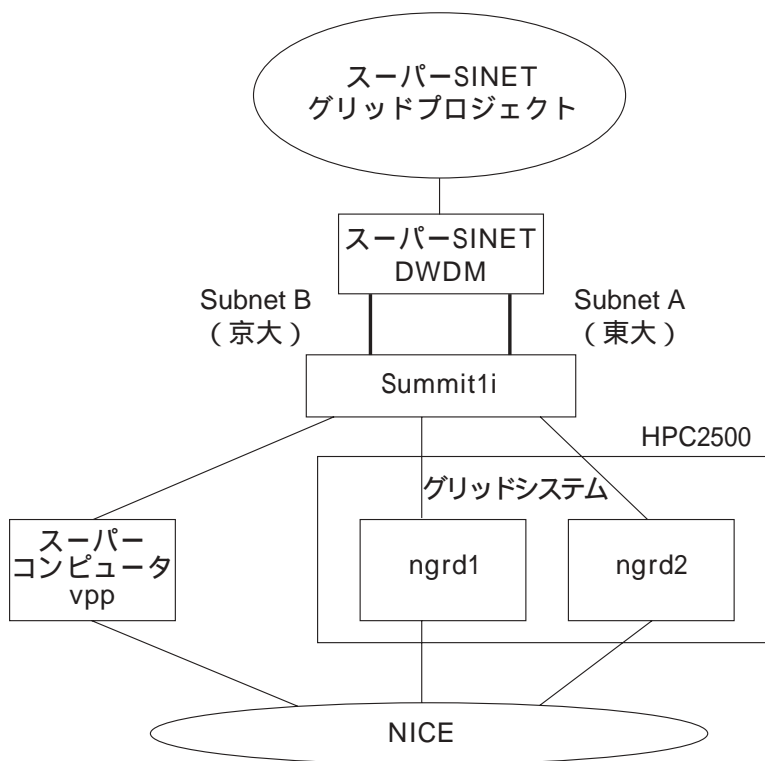


図3 グリッドシステムネットワーク接続図

・ HPC2500の構成と性能

HPC2500は、現有のスーパーコンピュータVPP5000のようなベクトル並列型ではなく、スカラ並列型スーパーコンピュータです。このHPC2500は、2ノード構成で、ノードあたりCPU32台、メモリ32GBを搭載しています。システムの構成図を図4に示します。ノードは、8個のCPUと、8GBのメモリが搭載されたシステムボードから構成されるメモリ共有型のSMP (Symmetric Multi-processor) で、ノードとノードの間は、4GB/s × 2 (in/out) の伝送性能の高速光インターコネクタにより結合されています。システム全体の理論最大性能は、332.8Gflopsです。

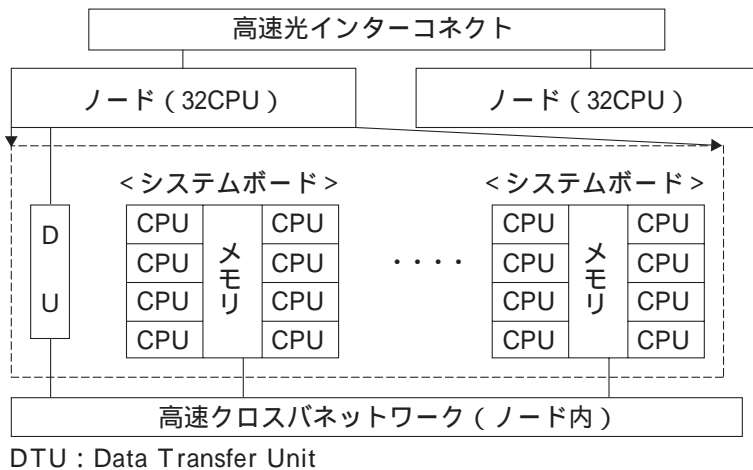


図4 HPC2500システム構成図

現有のスーパーコンピュータシステムVPP5000との違いを表3に示しておきます。

表3 HPC2500とVPP5000との比較表

項目	HPC2500	VPP5000
処理方式	スカラ並列 ノード内 (共有メモリ) ノード間 (分散メモリ)	分散メモリ型ベクトル並列
プロセッサの理論最大性能	5.2Gflops	9.6Gflops
メモリ	32GB / ノード	16GB / PE
クロスバネットワークの転送速度	4GB / 秒	1.6GB / 秒
性能向上のために	<ul style="list-style-type: none"> ・スカラCPUによる高速化 ・スレッド並列による高速化 ・複数ノードでの並列実行による高速化 	<ul style="list-style-type: none"> ・ベクトル化による高速化 ・複数PEでの並列実行による高速化

・ HPC2500のソフトウェア

HPC2500のOSは、Solaris8です。HPC2500で、利用できるソフトウェアを表4に示します。VPP5000とほぼ同じようなソフトウェアが利用できます。グリッドシステムとしては、当然のことながらGlobus Toolkit 2.0やMPICH-G2などのグリッドのためのソフトウェアが利用できます。また、VPP5000でVPP Fortranを利用して並列処理を行っていた利用者には、XPFortranを利用することにより、プログラムが継承できます。

表4 HPC2500で利用できるソフトウェア

項目	ソフトウェア
プログラミング言語	Fortran C C++
並列処理言語	OpenMP XPFortran
数値計算ライブラリ	SSL NUMPAC BLAS, LAPACK, ScaLAPACK
メッセージパッシングライブラリ	MPI2.0
アプリケーションプログラム	-FLOW (汎用3次元流体解析システム) LS-DYNA (非線形動的構造解析プログラム) MASPHYC (材料設計プログラム) AMBER (分子構造計算プログラム) Gaussian98 (分子軌道法プログラム) MOLPRO (非経験的分子軌道法プログラム)
グリッド用ソフトウェア	Globus Toolkit 2.0 MPICH-G 2

・ 利用するためには

グリッドシステムは、前述したようにグリッド研究推進のために導入されたシステムです。そのため、このシステムを利用するには、グリッド研究の発展または推進実験に協力していただくことが前提となります。センターでは、そのためのプロジェクトを公募しています。公募要領は、センターのホームページに掲載しています。関心ある方の応募をお待ちしています。

このグリッドシステムの運用は、本センターのグリッド研究推進実験プロジェクトに参加していただいた方々のご意見を参考に、より使いやすいシステムにしていくことを考えています。しかし、ある程度の運用案があった方が利用しやすいのではということで、スーパーコンピュータVPP5000の運用を参考にジョブ種別を考えてみました。グリッドシステムのジョブ種別を表5に示します。とりあえず、ここからスタートしましょう。

表5 ジョブ種別

バッチジョブ	キュー名	使用可能 CPU数	CPU使用時間		メモリ		ラージページ		ユーザ DTU
			標準値	制限値	標準値	制限値	標準値	制限値	
	gx	8	10時間	50時間	16GB	16GB	0 GB	8 GB	利用不可
	gy	24	10時間	100時間	32GB	32GB	0 GB	32GB	利用可能
	gz	48	100時間	500時間	60GB	60GB	0 GB	64GB	利用可能
TSS	-	8	10時間	-	32GB	-	0 GB		利用不可

. おわりに

この稿では、グリッドとはどのようなものか、スーパーSINETのグリッドプロジェクトとそれに接続されている本センターのシステムの構成等について、述べてきました。これで、グリッドについての概観を少しでも掴んでいただけたら幸いです。このプロジェクトは、現在、ハード的な準備が整い、これからプロジェクトに参加して下さるユーザの方々と本格的な実証実験が始まるといった段階です。実際の利用に際してのソフトウェアに関するもう少し詳しい話は、手引きなどの形で纏めて、お知らせしていきたいと思っています。

参考文献

- [1] I. Foster and C. Kesselman (1999) The GRID : Blueprint for a New Computing Infrastructure. Morgan Kaufmann, 677pp.
- [2] F. Berman et al. (2003) Grid Computing : Making the Global Infrastructure a Reality. Wiley, 1012pp.
- [3] 三浦謙一 (2002) グリッドコンピューティングの動向について , 京都大学学術情報メディアセンター全国共同利用版・広報, Vol.1, No. 3, 167-172.
- [4] <http://www.itbl.jp/>
- [5] http://www.sinet.ad.jp/s_sinet/
- [6] <http://www.globus.org/>
- [7] <http://www.unicore.org/>
- [8] <http://www.jaeri.go.jp/>
- [9] <http://www.globus.org/ogsa/>
- [10] 平成14年度グリッド研究報告書 , 全国共同利用大型計算機センターグリッド研究推進委員会 (2003)

(ながい とおる : 名古屋大学情報連携基盤センター大規模計算支援環境研究部門)

(つだ ともこ : 名古屋大学情報連携基盤センター学術情報開発研究部門)