

仮想スーパーコンピュータセンタ利用環境 GridLibの構築

産業技術総合研究所 グリッド研究センター ○関口 智嗣

Development of user environment GridLib for virtual supercomputer center
Satoshi Sekiguchi, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology

Abstract:

A virtual supercomputer center (VSC) allows users to obtain high performance computing services without knowing a profile of the computer systems such as architecture types, operating systems, installed locations and network routes to access. The GridLib system has been designed to produce the VSC. We have developed two components; one is an interface that makes LAPACK and IMSL into remote executable libraries compliant with standard GridRPC protocol; the other, named Grid PSE Builder, is a software toolkit to build a portal system with a simple web interface, which invokes package programs on remote. To demonstrate the GridLib's performance, we have deployed GridLib on several Cluster systems so that users can run libraries and package programs through the portal systems

1. はじめに

仮想スーパーコンピュータセンタとは、ユーザがスーパーコンピュータの機種や設置場所を意識することなく、スーパーコンピュータが提供する高性能な計算サービスを楽しむことを目指したシステムである。GridLibは仮想スーパーコンピュータセンタの実現を目指したシステムであり、ここでは高性能な計算サービスとしてスーパーコンピュータ上で実行される科学技術計算ライブラリやパッケージプログラムの遠隔実行を提供する機能に限定した。本課題においてはユーザが簡便に、効果的に、かつ安全に利用するために必要な基盤技術の研究開発と整備を目的とし、実用的な利用に供することを目指した。具体的には下記の目標と成果を得た。

1. 科学技術計算ライブラリとして国際的に著名なLAPACK, IMSL等を設定し、標準規格であるGridRPCを用いて遠隔利用可能とするためのインタフェースの開発を行った。ここで、GridRPCの基本機構は産業技術総合研究所で開発中のNinf-Gによって実現した。成果はダウンロード可能となり、一部はIMSLの作成・発売元でもある Visual Numerics 社からも製品を有効に使うための機能として宣伝されている。
2. 科学技術計算用パッケージプログラムとして量子化学計算用ソフトウェアGaussian, 熱流体解析用ソフトウェアPhoenixs等を設定し、Webブラウザによるユーザインタフェースを開発し、強固なセキュリティとユーザに負担のないソフトウェアの簡便な実行・監視を実現した。成果物はGridPSE Builderとして汎用性に留意し、個々のパッケージには極力依存しないように構成した。成果はGaussian Portal として産業技術総合研究所先端情報計算センターにおいてユーザに公開されている。Phoenixs Portal は民間企業との共同研究として利用されている。
3. これらのシステムはITBL機関のひとつである理化学研究所のクラスタ計算機環境利用の協力を得てネットワークならびにコンピュータ上に実装し、動作確認を行った。これにより、ライブラリ

やパッケージソフトの利用に際し、バックエンドのスーパーコンピュータを意識することなく実行可能となった。

2. 研究開発項目とその成果概要

2.1 GridLibシステム設計と運用管理

科学技術計算ライブラリをGridLibにより仮想スーパーコンピュータセンタ上で遠隔実行するための機構を設計し、運用するためのインタフェースを開発する。遠隔実行の機構としてGridRPCを用いた設計と実装を行い（図1）、フリーソフトウェアであるLAPACK、ScaLAPACK、FFTWについてインタフェースプログラムを開発した。また、その性能に関して精度の検証を行い実用に耐えうることを確認した。

また、商用の数値ライブラリをGridLibとして遠隔利用するという実用性の評価を行った。米国Visual Numerics 社の数値計算・統計解析ライブラリIMSL について、日本ビジュアルニューメリックス社の協力と試用ライセンスの提供を受けて実現した。ソースコードを閲覧することなく、IMSLのマニュアルに記述された関数の使用法を参照するだけで、インタフェースを作成することができた。また、アーキテクチャーの異なるヘテロな計算機環境で、サーバ・クライアントの関係を構築し計算精度の評価を行った。計算精度について計算の誤差ノルムをローカル計算とネットワーク計算で算出して比較した。今回の結果では最小精度の範囲で相違が生じていたが、ユーザにとってはいずれのコンピュータで実行したかという点に関して意識する必要がない。

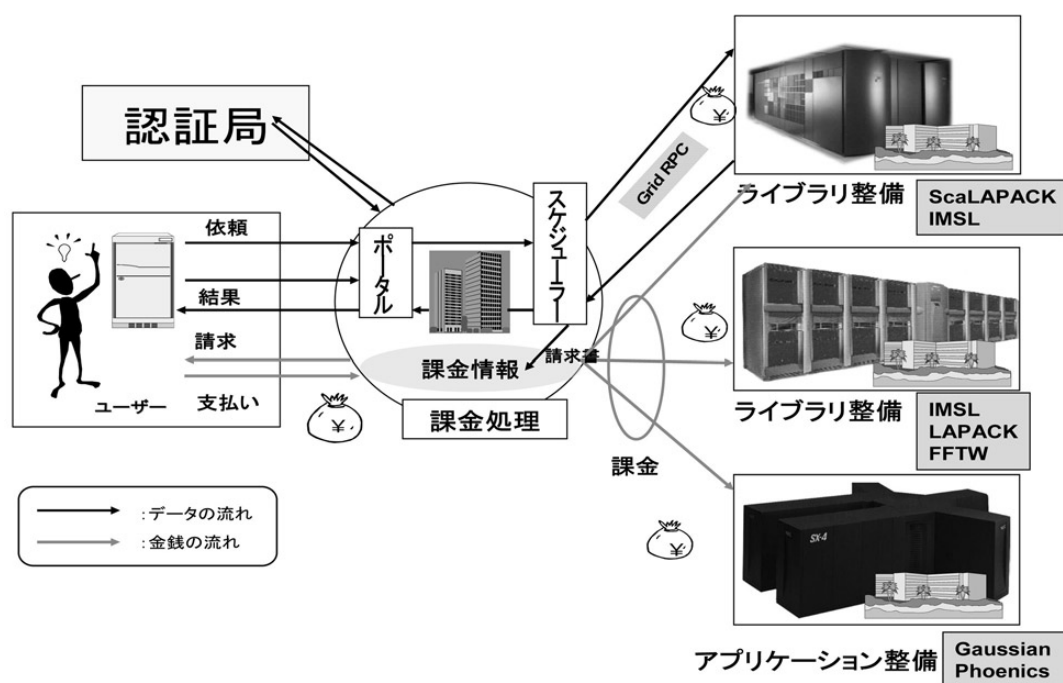


図1 GridLib による仮想スーパーコンピュータセンター

2.2 GridLibスケジューラの設計と実装

複数のコンピュータが利用可能な場合に、ユーザは仮想スーパーコンピュータセンタを構成するコンピュータの状況を意識せずに利用できる環境を提供する。ユーザが指定のライブラリ名から自動的に最適なスーパーコンピュータを選択するスケジューラの開発を行った。ホスト名が指定されていない場合に、ラ

イブラリが実行可能なコンピュータからその時点で利用可能なホストを選択し実行を依頼する。具体的には実行可能なコンピュータ名の一覧を取得し、それらのコンピュータに対してCPUの稼働率を問い合わせ、負荷の少ないサーバに実行を依頼する。コンピュータを選択する条件はスケジューリングの関数部分を入れ替えることで任意に与えることを可能とした。

2.3 GridLibユーザインタフェースの構築と実装

科学技術計算用パッケージプログラムの遠隔実行を提供する機能としてユーザインタフェースの構築を行う。ユーザが個別のスーパーコンピュータに直接ログインすることなく、ユーザ端末から必要とするパッケージプログラム名を指定するだけでユーザの要求に応じた最適なスーパーコンピュータ上でライブラリを実行し、計算結果を取得する環境を構築する。成果物はGridPSE Builderとして汎用性に留意し、個々のパッケージには極力依存しないように構成した。Webブラウザによるユーザインタフェースを開発し、強固なセキュリティとユーザに負担のない簡便なソフトウェアへの実行・監視を実現した(図2)。

GridPSE Builderはユーザ用ポータルを構築するための様々なコンポーネントをポータル構築ツールとして提供することを目標とした。これによって、セキュリティやWebプログラミングに関する高度な知識を必要とせずとも、既存のライブラリやアプリケーションをWebブラウザから利用可能なポータルを容易に構築することを可能とした。GridPSE BuilderとしてはサインオンツールとコンポーネントXMLに特徴がある。サインオンツールは、クライアントとサーバ間でのSSL相互認証を行い、ユーザの証明書に基づいてグリッド環境へのアクセスを可能にする。コンポーネントXMLは、ライブラリやアプリケーションの実行に必要なインタフェースを記述するXMLファイルであり、この記述に基づいて、ユーザによるパラメータやファイルの入力が可能なWeb画面の簡便な生成が可能である。GridPSE Builderを利用して、量子化学計算用ソフトウェアGaussian, 熱流体解析用ソフトウェアPhoenixs等を利用するためのWebポータルを構築して利用者に公開した。

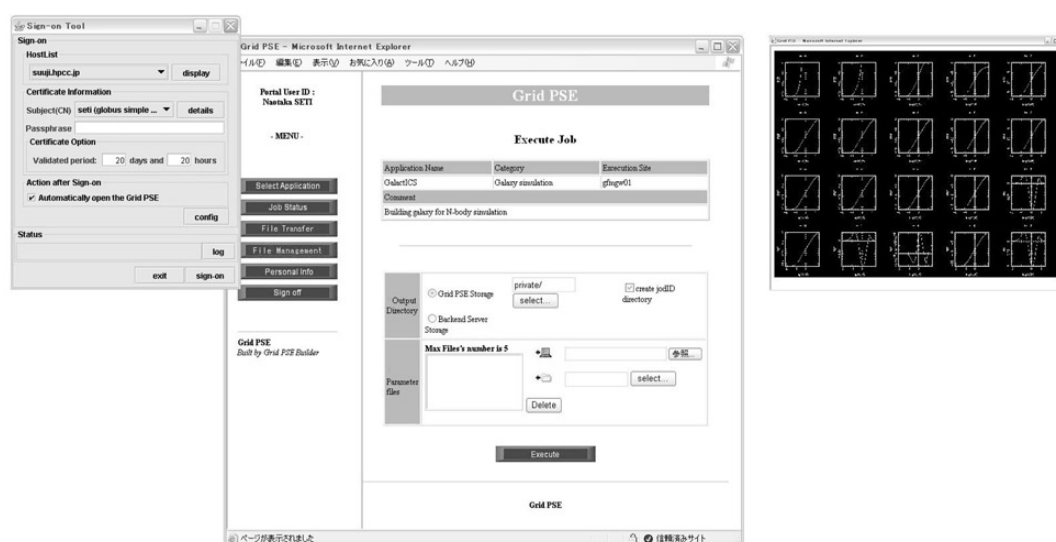


図1 GridLibによる仮想スーパーコンピュータセンター

2.4 GridLibにおける課金システムの実現

仮想スーパーコンピュータセンターを実用に供するためには課金情報の取扱が必須であり、各サイトの課金ポリシーに応じた課金を行なうシステムの基礎的研究と予備的開発を行なうことを目標とした。

ディスクの使用に対する課金は、長期的な課金制度が一般的であり、ジョブのリクエスト1件毎ではCPUへの課金が最も重要となる。GridLibによりライブラリの遠隔利用を行う場合にはCPUのみが課金のための情報として得られる。そこで、実行されたライブラリおよびパッケージのCPUに関する利用時間のみを対象として課金の仕組みを組み込み、必要な情報が得られることを確認した。産業技術総合研究所先端情報計算センターにおける具体的な課金データに合わせて実装し、稼動することを確認した。

2.5 ITBL上での環境構築と稼動評価

GridLibをITBL環境に構築し、稼動評価を行うため防災科学技術研究所および理化学研究所の研究協力を得た。

防災科学技術研究所では、ベクトル型スーパーコンピュータであるCraySV1システムにGridLib基本機能を搭載し、つくばWAN経由で利用できることを確認した。産総研に設置された同型機と相互利用可能となるよう基本部の動作確認を行った。

理化学研究所では、Linuxクラスタと、SUNのフロントエンドマシンに対してGridLibを搭載し、計算機を意識することなく、ネットワークを経由して科学技術計算用ライブラリを遠隔実行する稼動評価を行った。具体的には、ScaLAPACKを新規にインストールした。フロントエンド上でGridLibを呼び出すプログラムを実行し、スケジューラ機能を用いてLinuxクラスタ上の利用可能なサーバでScaLAPACKのリモートライブラリを呼び出し、実行可能であることを確認した。

2.6 産総研スーパークラスタ上での環境構築と評価

大規模システムに対する適合性を調べるため、平成16年3月に導入されたAISTスーパークラスタ（産総研保有）上にGridLib環境を構築し、利用環境の評価を行った。ユーザインタフェースとして開発したポータル構築ツールを用いて、スーパークラスタ上でライブラリおよびアプリケーションを簡便に実行可能なポータルを構築した。流体解析のPhoenix、量子化学計算のGaussian、ユーザが開発したプログラムなどをポータル化し、スーパークラスタのユーザに開放した。使い勝手に関して好評を得るとともに、画面構成のデザイン、ファイル等の利用に関する要望など、いくつか改善点のフィードバックを得た。

3. ネットワークの活用について

研究協力機関が接続されたネットワークとして「つくばWAN」「省際ネットワーク（後にSINETに統合）」「Super SINET」を利用した。ITBL環境に対してはSINET経由での接続を行った。ITBL環境等においてGridLibを搭載しVSCの構築を行い、高速なネットワークを経由することでスーパーコンピュータの遠隔利用が可能であることを示した。また、産総研スーパークラスタ上のシステムに関しては、GridLibを用いて「つくばWAN」経由の利用を行った。ネットワークを活用し誰でもスーパーコンピュータを意識することなく簡単に利用できることを示した。

4. まとめ

GridLibは仮想スーパーコンピュータセンタの実現を目指したシステムである。実現した機能としてスーパーコンピュータ上で実行される科学技術計算ライブラリやパッケージプログラムの遠隔実行に関して研究開発を実施した。成果として以下の3点を得た。（1）科学技術計算ライブラリとして国際的に著名なLAPACK, IMSL等を設定し、標準規格であるGridRPCを用いて遠隔利用可能とするためのインタフェースの研究開発。（2）量子化学計算用ソフトウェアGaussian, 熱流体解析用ソフトウェアPhoenix等をWeb

ブラウザ経由で実行するためのユーザインタフェースと実行・監視方式の実現。(3) 理化学研究所のクラスタ計算機環境を用いて強調動作の確認を行った。仮想スーパーコンピュータセンタとして実用に供されるまでには研究開発を継続すべき項目が残ったが、基本機能の実現を示すことができた。

5. 研究開発実施体制

代表研究者 関口 智嗣 産業技術総合研究所 グリッド研究センター

研究分担

研究開発項目：GridLibシステム設計と運用管理

産業技術総合研究所 グリッド研究センター センター長 関口智嗣

研究開発項目：GridLibスケジューラの設計と実装

産業技術総合研究所 グリッド研究センター 基盤ソフトチーム長 田中良夫

研究開発項目：GridLibユーザインタフェースの構築と実装

産業技術総合研究所 グリッド研究センター 建部修見、首藤一幸

研究開発項目：GridLibにおける課金システムの実現

産業技術総合研究所 グリッド研究センター セキュアプログラミングチーム長 高木浩光

研究協力

研究開発項目：ITBLセキュリティポリシーの運用

理化学研究所 情報基盤研究部情報環境室 姫野龍太郎

研究開発項目：ITBLの運用調整

宇宙航空研究開発機構 情報化推進部 参事

(旧) 日本原子力研究所 計算科学技術推進センター ITBL利用推進室長 福田正大

研究開発項目：ITBL/つくばWANの運用調整

防災科学技術研究所 防災情報研究センター ネットワーク管理室長 佐藤 一雄