3-2-1-3. NAREGI

宇佐見 仁英（国立情報学研究所）

NAREGI は広域分散型の最先端研究教育用大規模計算（サイエンスグリッド）環境を実現するための世界標準による実運用に耐える品質のグリッドミドルウェアを研究開発することを目的としている。NAREGI は 2003 年から文部科学省が進める「超高速コンピュータ網形成プロジェクト（National Research Grid Initiative：通称 NAREGI）」としてスタートした。2006 年度から文部科学省が進める「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用プロジェクト」におけるサイエンスグリッド NAREGI プログラムとして、これまでのプロジェクトの成果を継承すると共に、次世代のペタスケールスーパーコンピュータ利用環境も視野に入れ、継続して研究開発を進めている。

本 WG として、サイエンス Grid 環境での実施研究の一環として、主に NAREGI ミドルウェアを導入し、その検討、構築、適用等の情報交換を実施することになった。本 WG での活動順に年を追って紹介しているので、NAREGI に関する各記述内容が必ずしも最新の情報でないことに注意されたい。ここでは、NAREGI プロジェクトに関連する報告として下記の 3 件を紹介する。

(1) NAREGI の概要と現状 [添付資料 3-2-1-3-1] (宇佐見)

2004 年 12 月時点での報告であり、UNICORE をベースとした NAREGI ミドルウェアα版（内部評価用；機能評価を行うために限定したユーザに提供）の概要と現状である。特に、2004 年度時点では、データグリッド機能が無く、グリッド空間（広域分散環境）でのデータハンドリング等の機能が実現していない状況である。しかしながら、予約によるメタスケジュール等のための資源要求等、現在実現されている資源管理等の基本機能は出来上がっており、それらの機能について詳細を紹介した。

(2) UNICORE 構成[添付資料 3-2-1-3-2] (永井)

NAREGI ミドルウェアα版が UNICORE をベースとしており、NAREGI ミドルウェア導入評価の準備段階として UNICORE の環境を整えることにした。UNICORE を導入するハードウェア、ネットワーク接続環境を含めた UNICORE 環境の構成を紹介した。

(3) NAREGI におけるナノシミュレーションのグリッド化と応用事例 [添付資料 3-2-1-3-3] (青柳)

NAREGI の一つの研究グループ WP６(Work package)から、NAREGI ミドルウェアα版を使ったアプリケーションのグリッド化と応用事例について紹介した。特に、次世代のシミュレーション技術として重要なマルチフィジックス解析での連成アプリケーションについて、ナノサイエンスにおける連成シナリオの分析から、RISM-FMO による溶媒中の分子の振る舞いを解析する事例も紹介した。また、GAMES-FMO を利用した比較的大規模な例としてグラミシン分子の解析、データベースを利用したタンパク質最適構造と初期電子密度の事例等、アプリケーションのグリッド化のための方法論、連成アプリケーションのためのミドルウェア、実際の応用例まで幅広い活動を報告した。