1

NAREGI の概要と現状

2004年12月1日

国立情報学研究所 リサーチグリッド連携研究センター
客員教授 宇佐見 仁英

2

NAREGIプロジェクトの概要

1）正式名称
「超高速コンピュータ網形成プロジェクト」
(英文名：National Research Grid Initiative)

2）文部科学省の「経済活性化のためのリーディングプロジェクト」の一環として推進

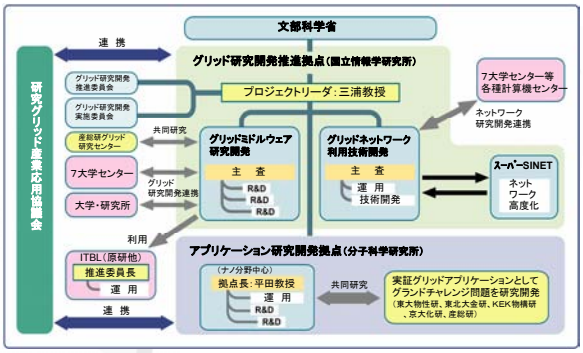
3）5ヶ年計画として2003年4月にスタート

4）国立情報学研究所と分子科学研究所を二拠点とし、その他の共同研究機関、大学、産業界を含む産・学・官連携研究開発体制

次世代の研究開発、製品開発に不可欠な大規模シミュレーションなどを実現するグリッド基盤用ソフトウェア（サイエンスグリッド）の研究開発を推進（実際はセンター間サーバグリッド用）

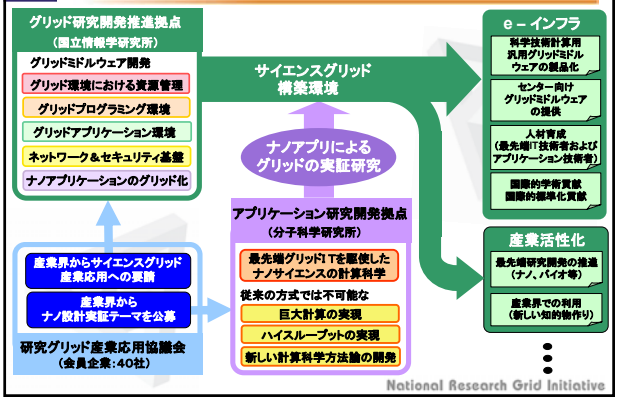
3

NAREGI研究開発体制



4

NAREGIプロジェクトの目指すところ



5

グリッド研究開発推進拠点研究項目

1） グリッド環境における資源管理 …… WP1
松岡（東工大）、河野（電通大）、合田（東工大）

2） グリッドプログラミング環境 …… WP2
関口（産総研）、石川（産総研）

3） グリッドアプリケーション環境 …… WP3
三浦（国情研）、川田（宇都宮大）、佐藤（筑波大）

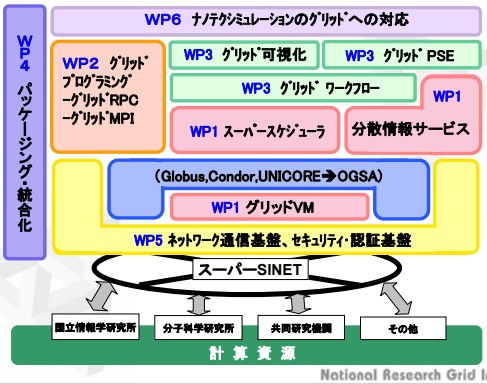
4） グリッドソフトウェア統合・運用技術 …… WP4
三浦（国情研）

5） グリッド対応ネットワーク通信基盤 …… WP5
下條（阪大）、尾家（九工大）、今瀬（阪大）

6） ナノシミュレーションのグリッド化 …… WP6
青柳（九大）

6

NAREGI Software Stack



アプリケーションモデル

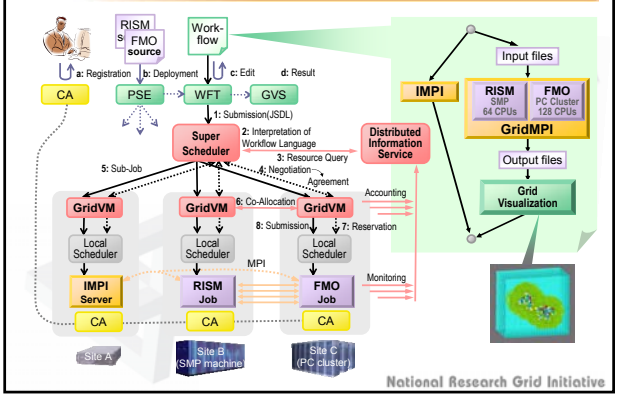
7

- 単一並列ジョブ(メモリ共有orメモリ分散向き問題)
  - ⇨ 複数サイトに跨らない範囲での並列ジョブ・・・・・○
- 複数の単一並列ジョブ(パラメータサーベイ、最適化問題)
  - ⇨ 複数サイトでの同時並行処理・・・・・・・・・・・・・・・◎
- 疎結合複数ジョブ(Multi-physics, Multi-resolution 問題)
  - ⇨ 計算コストに対して通信コストが無視できる・・・・○
- 蜜結合複数ジョブ(Multi-physics, Multi-resolution 問題)
  - ⇨ 計算コストに対して通信コストが無視できない・・△

National Research Grid Initiative

NAREGI実行シナリオ(マルチサイトMPIジョブ)

8



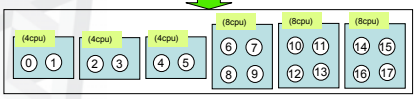
National Research Grid Initiative

WP1: 計算資源の要求

9

- アプリケーション開発者は、ジョブの資源要件を JSDL 仕様(ProcessTopology)で記述する。
  - ⇨ エンドユーザは、実行マシンを指定する必要がない

```
<ProcessTopology>
    <virtualHost total="3" mappedTo="realHost" >
      <Process total="2" ><threads>2</threads></Process>
    </virtualHost>
    <virtualHost total="3" mappedTo="realHost" >
      <Process total="4" ><threads>2</threads></Process>
    </virtualHost>
</ProcessTopology>
```

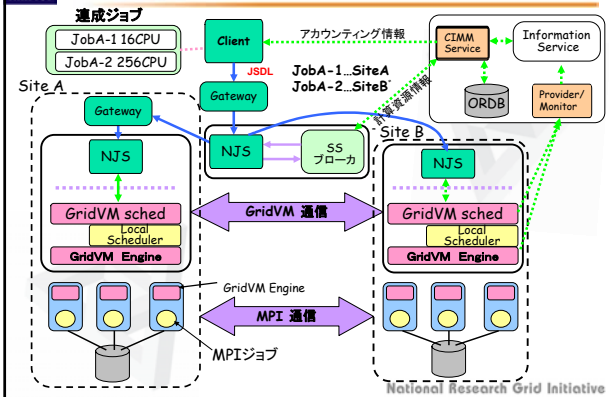


GGF JSDL－WGで仕様提案中

National Research Grid Initiative

WP1: マルチサイトジョブ実現イメージ

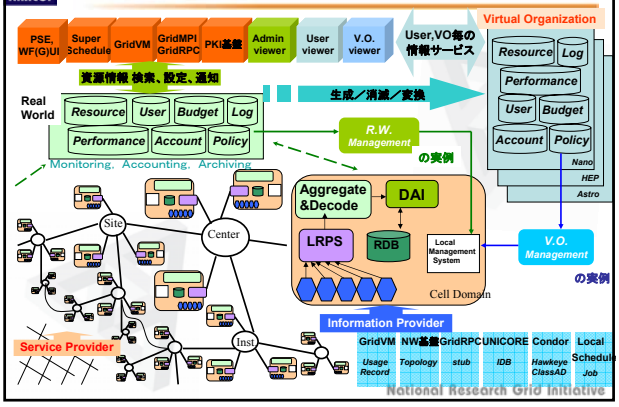
10



National Research Grid Initiative

WP1: グリッド情報サービス

11



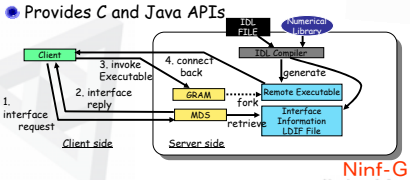
National Research Grid Initiative

WP2: GridRPC/Ninf-G2

12

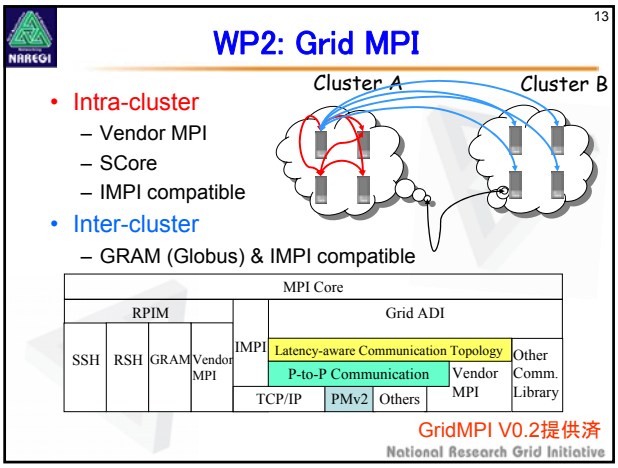
GridRPC

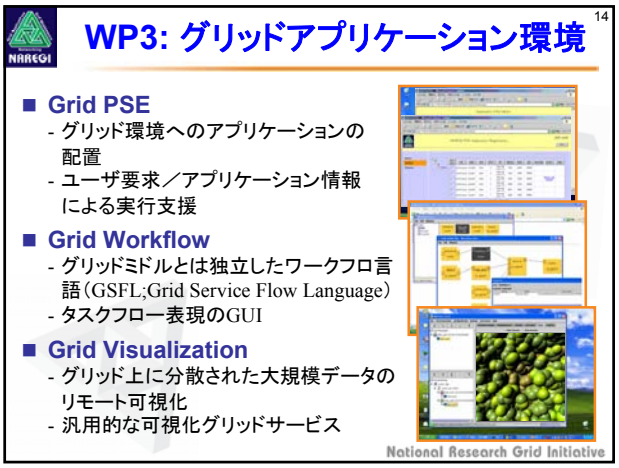
- Programming Model using RPC on the Grid
- High-level, taylored for Scientific Computing (c.f. SOAP-RPC)
- GridRPC API standardization by GGF GridRPC WG
- Ninf-G Version 2
  - A reference implementation of GridRPC API
  - Implemented on top of Globus Toolkit 2.0 (3.0 experimental)
  - Provides C and Java APIs

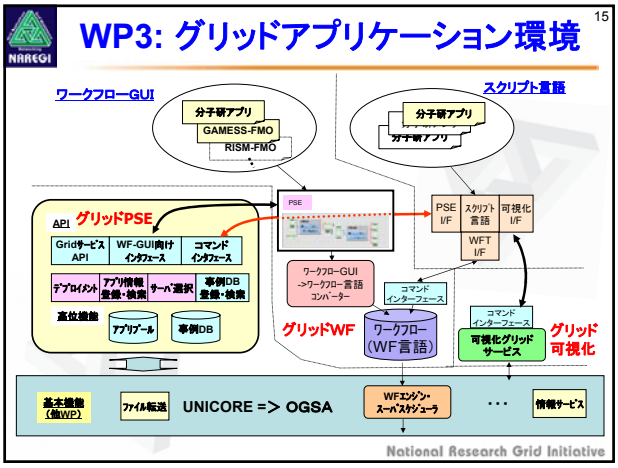


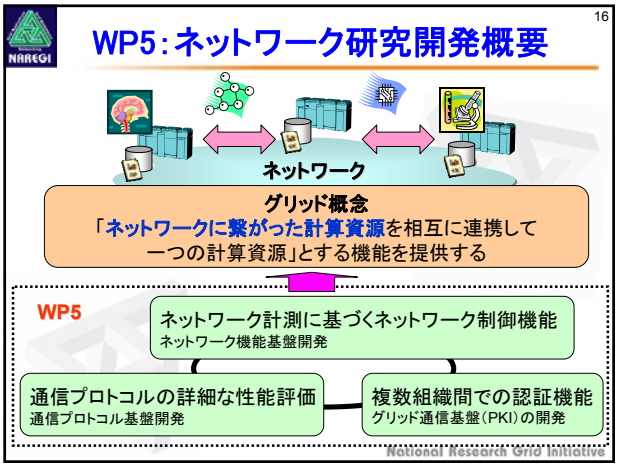
Ninf-G V2.2.0提供済

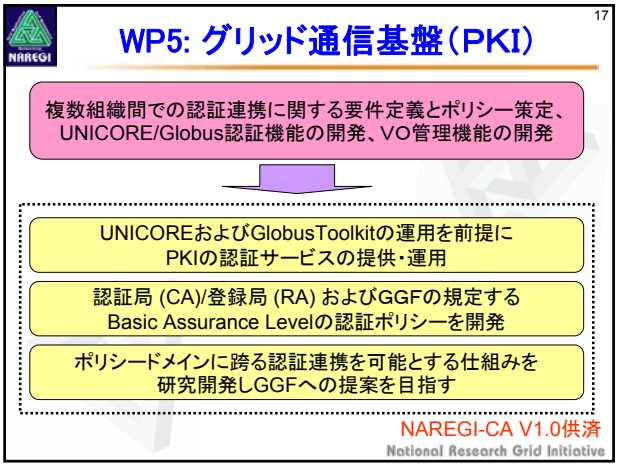
National Research Grid Initiative

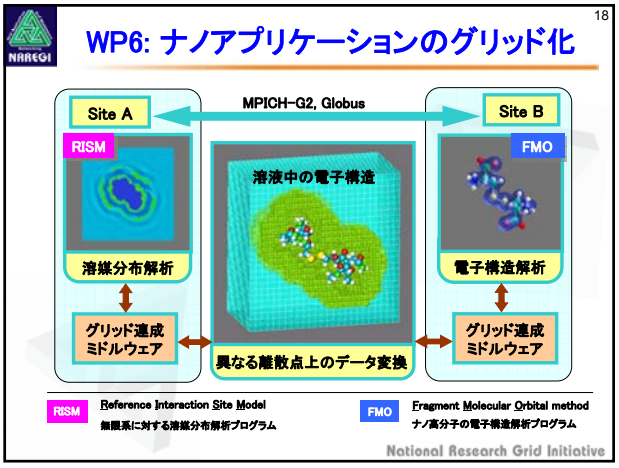

13
WP2: Grid MPI
Intra-cluster
– Vendor MPI
– SCore
– IMPI compatible
Inter-cluster
– GRAM (Globus) & IMPI compatible
Cluster A
Cluster B
MPI Core
RPIM
SSH
RSH
GRAM
Vendor MPI
IMPI
Grid ADI
Latency-aware Communication Topology
P-to-P Communication
TCP/IP
PMv2
Others
Vendor MPI
Other Comm. Library
GridMPI V0.2提供済
National Research Grid Initiative

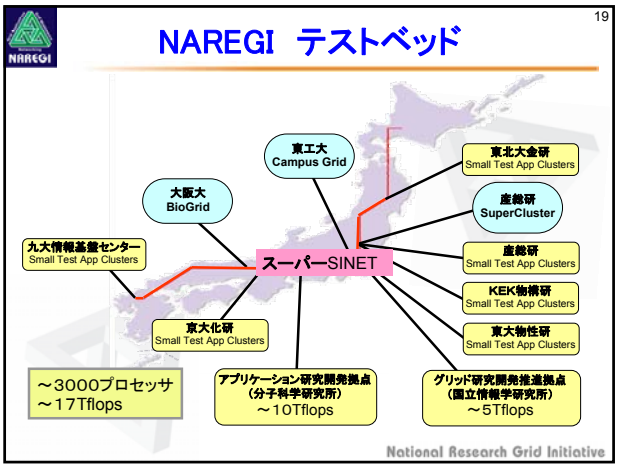

14
WP3: グリッドアプリケーション環境
Grid PSE
- グリッド環境へのアプリケーションの配置
- ユーザ要求／アプリケーション情報による実行支援
Grid Workflow
- グリッドミドルとは独立したワークフロ言語（GSFL;Grid Service Flow Language）
- タスクフロー表現のGUI
Grid Visualization
- グリッド上に分散された大規模データのリモート可視化
- 汎用的な可視化グリッドサービス
National Research Grid Initiative

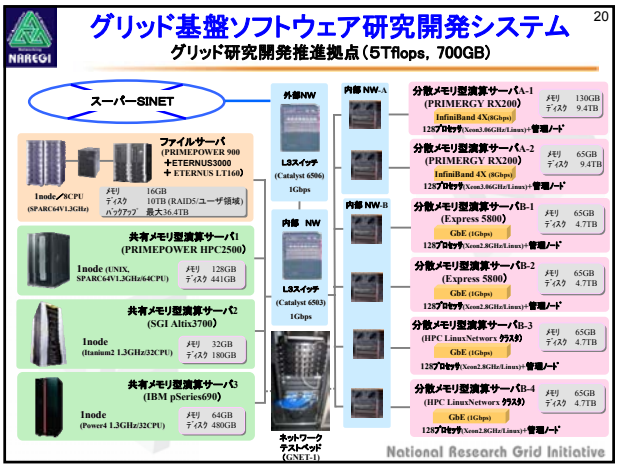

15
WP3: グリッドアプリケーション環境
ワークフローGUI
スクリプト言語
分子研アプリ
GAMESS-FMO
RISM-FMO
グリッドPSE
API
Gridサービス API
WF-GUI向け インタフェース
コマンド インタフェース
デプロイメント
アプリ情報 登録・検索
サーバ選択
事例DB 登録・検索
高位機能
アプリプール
事例DB
PSE
PSE I/F
スクリプト言語
可視化 I/F
WFT I/F
ワークフローGUI ->ワークフロー言語 コンパーター
コマンド インターフェース
グリッドWF
ワークフロー (WF言語)
コマンド インターフェース
可視化グリッド サービス
グリッド 可視化
基本機能 (他WP)
ファイル転送
UNICORE => OGSA
WFエンジン・ スーパスケジューラ
情報サービス
National Research Grid Initiative

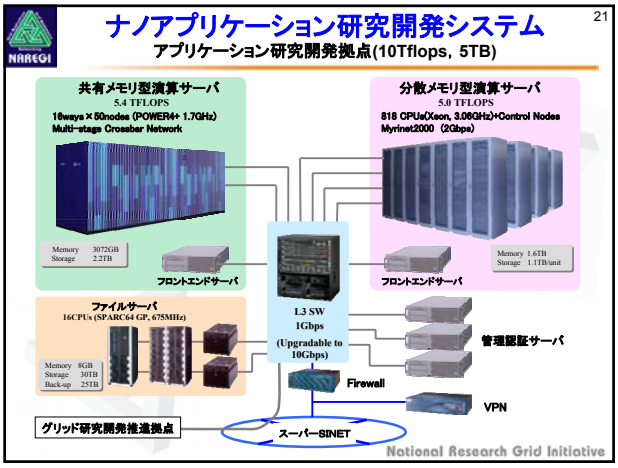

16
WP5：ネットワーク研究開発概要
ネットワーク
グリッド概念
「ネットワークに繋がった計算資源を相互に連携して一つの計算資源」とする機能を提供する
WP5
ネットワーク計測に基づくネットワーク制御機能
ネットワーク機能基盤開発
通信プロトコルの詳細な性能評価
通信プロトコル基盤開発
複数組織間での認証機能
グリッド通信基盤（PKI）の開発
National Research Grid Initiative

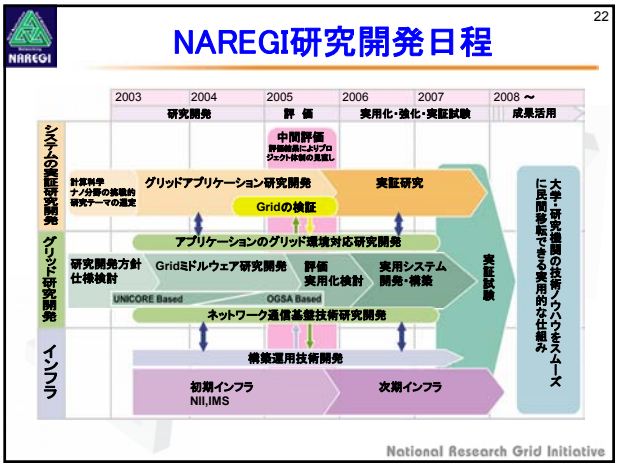

17
WP5: グリッド通信基盤（PKI）
複数組織間での認証連携に関する要件定義とポリシー策定、UNICORE/Globus認証機能の開発、VO管理機能の開発
UNICOREおよびGlobusToolkitの運用を前提にPKIの認証サービスの提供・運用
認証局 (CA)/登録局 (RA) およびGGFの規定するBasic Assurance Levelの認証ポリシーを開発
ポリシードメインに跨る認証連携を可能とする仕組みを研究開発しGGFへの提案を目指す
NAREGI-CA V1.0供済
National Research Grid Initiative

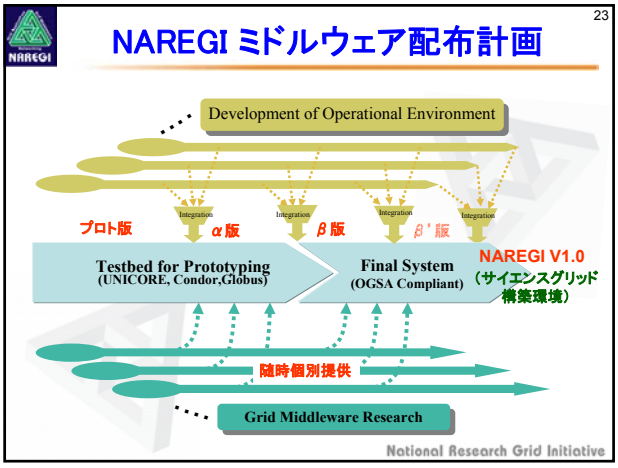

18
WP6: ナノアプリケーションのグリッド化
Site A
MPICH-G2, Globus
Site B
RISM
FMO
溶液中の電子構造
溶媒分布解析
電子構造解析
グリッド連成 ミドルウェア
異なる離散点上のデータ変換
グリッド連成 ミドルウェア
RISM Reference Interaction Site Model
無限系に対する溶媒分布解析プログラム
FMO Fragment Molecular Orbital method
ナノ高分子の電子構造解析プログラム
National Research Grid Initiative

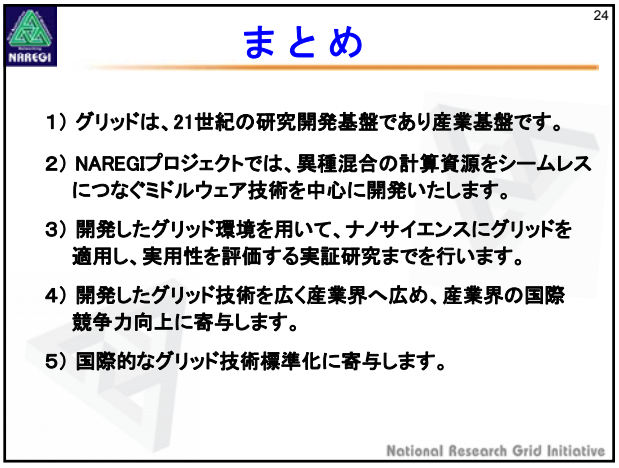

19
NAREGI テストベッド
東工大
Campus Grid
大阪大
BioGrid
九大情報基盤センター
Small Test App Clusters
スーパーSINET
東北大金研
Small Test App Clusters
産総研
SuperCluster
産総研
Small Test App Clusters
KEK物構研
Small Test App Clusters
東大物性研
Small Test App Clusters
京大化研
Small Test App Clusters
～3000プロセッサ
～17Tflops
アプリケーション研究開発拠点
（分子科学研究所）
～10Tflops
グリッド研究開発推進拠点
（国立情報学研究所）
～5Tflops
National Research Grid Initiative

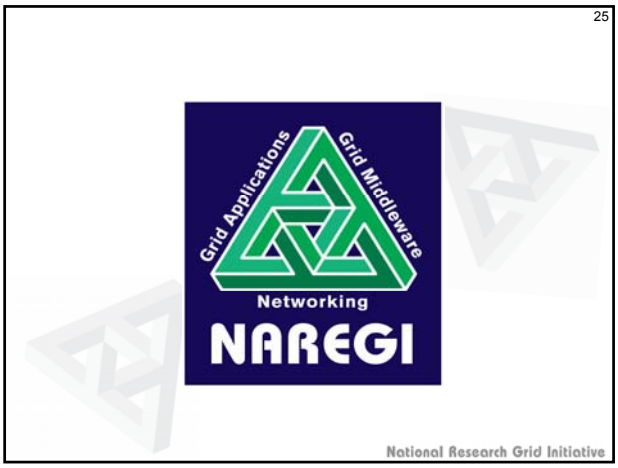

20
グリッド基盤ソフトウェア研究開発システム
グリッド研究開発推進拠点（5Tflops，700GB）
スーパーSINET
外部NW
内部 NW-A
内部 NW-B
内部 NW
L3スイッチ
(Catalyst 6506)
1Gbps
L3スイッチ
(Catalyst 6503)
1Gbps
ファイルサーバ
(PRIMEPOWER 900
+ETERNUS3000
+ ETERNUS LT160)
共有メモリ型演算サーバ1
(PRIMEPOWER HPC2500)
共有メモリ型演算サーバ2
(SGI Altix3700)
共有メモリ型演算サーバ3
(IBM pSeries690)
分散メモリ型演算サーバA-1
(PRIMERGY RX200)
InfiniBand 4X(8Gbps)
分散メモリ型演算サーバA-2
(PRIMERGY RX200)
InfiniBand 4X (8Gbps)
分散メモリ型演算サーバB-1
(Express 5800)
GbE (1Gbps)
分散メモリ型演算サーバB-2
(Express 5800)
GbE (1Gbps)
分散メモリ型演算サーバB-3
(HPC LinuxNetworx クラスタ)
GbE (1Gbps)
分散メモリ型演算サーバB-4
(HPC LinuxNetworx クラスタ)
GbE (1Gbps)
ネットワークテストベッド
(GNET-1)
National Research Grid Initiative


21
ナノアプリケーション研究開発システム
アプリケーション研究開発拠点(10Tflops，5TB)
共有メモリ型演算サーバ
5.4 TFLOPS
16ways×50nodes (POWER4+ 1.7GHz)
Multi-stage Crossbar Network
分散メモリ型演算サーバ
5.0 TFLOPS
818 CPUs(Xeon, 3.06GHz)+Control Nodes
Myrinet2000 (2Gbps)
フロントエンドサーバ
ファイルサーバ
16CPUs (SPARC64 GP, 675MHz)
L3 SW
1Gbps
(Upgradable to
10Gbps)
管理認証サーバ
Firewall
VPN
グリッド研究開発推進拠点
スーパーSINET
National Research Grid Initiative


22
NAREGI研究開発日程
2003
2004
2005
2006
2007
2008 ～
研究開発
評 価
実用化・強化・実証試験
成果活用
システムの実証研究開発
グリッド研究開発
インフラ
中間評価
計算科学
ナノ分野の戦略的
研究テーマの選定
グリッドアプリケーション研究開発
実証研究
Gridの検証
アプリケーションのグリッド環境対応研究開発
研究開発方針
仕様検討
Gridミドルウェア研究開発
評価
実用化検討
実用システム
開発・構築
UNICORE Based
OGSA Based
ネットワーク通信基盤技術研究開発
構築運用技術開発
初期インフラ
NII,IMS
次期インフラ
実証試験
大学・研究機関の技術ノウハウをスムーズに民間移転できる実用的な仕組み
National Research Grid Initiative


23
NAREGI ミドルウェア配布計画
Development of Operational Environment
プロト版
α版
β版
β'版
Integration
Testbed for Prototyping
(UNICORE, Condor,Globus)
Final System
(OGSA Compliant)
NAREGI V1.0
（サイエンスグリッド
構築環境）
随時個別提供
Grid Middleware Research
National Research Grid Initiative


24
まとめ
1）グリッドは、21世紀の研究開発基盤であり産業基盤です。
2）NAREGIプロジェクトでは、異種混合の計算資源をシームレスにつなぐミドルウェア技術を中心に開発いたします。
3）開発したグリッド環境を用いて、ナノサイエンスにグリッドを適用し、実用性を評価する実証研究までを行います。
4）開発したグリッド技術を広く産業界へ広め、産業界の国際競争力向上に寄与します。
5）国際的なグリッド技術標準化に寄与します。
National Research Grid Initiative


25
Grid Applications
Grid Middleware
Networking
NAREGI
National Research Grid Initiative