

富士通SS研 Grid Computing WG

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

平成17年7月5日
九州大学 青柳 睦

National Research Grid Initiative

Outline

NAREGIプロジェクトの概要

グリッド基盤ミドルウェアの紹介
- 特に上位層について -

ナノシミュレーションのグリッド化
- 疎結合コンポーネントによる連成 -
- 連成ミドルウェア -
- 応用事例 -

National Research Grid Initiative

NAREGIの目標

- ① 学術研究、産業界における研究開発を対象に計算機資源をグリッドで接続し、大規模なシミュレーション、ハイスループット処理、マルチスケール・マルチフィジクスの連成解析が可能な、100Tflops級のサイエンスグリッドを実現するグリッド基盤ソフトウェアを開発。
- ② 開発したグリッド基盤ソフトウェアが実用的に有効であることをナノサイエンス分野での実証研究で確認。

National Research Grid Initiative

研究開発の取り組み方と成果の利用

サイエンスグリッド構築環境

ナノアプリによるグリッドの実証研究

アプリケーション研究開発拠点 (分子科学研究所)

産業界からサイエンスグリッド産業応用への要請

産業界から ナノ設計実証テーマを公募

研究グリッド産業応用協議会

最先端グリッドITを駆使したナノサイエンスの計算科学

従来の方式では不可能な
巨大計算の実現
ハイスループットの実現
新しい計算科学方法論の開発

サイバーサイエンスインフラ

科学技術計算用汎用グリッドミドルウェアの製品化

センサー向けグリッドミドルウェアの提供

人材育成 (最先端IT技術者およびアプリケーション技術者)

国際的学術貢献 国際標準化貢献

産業活性化

最先端研究開発の推進 (ナノ、バイオ等)

産業界での利用 (新しい知の創り)

National Research Grid Initiative

研究開発体制図

文部科学省

共同研究開発 (富士通、日立、NEC)

グリッド研究開発推進拠点 (情報・システム研究機構 国立情報学研究所)

プロジェクトリーダー: 三浦教授

7大学セナ

7大学セナ (東大、九大)

ITBL (東研、東研、JKX等)

研究開発従事者 (平成16年度)

拠点	学	官	産
グリッド拠点	31	110	
アプリ拠点	162	5	
公募研究	-	-	45

National Research Grid Initiative

プロジェクト全体の進め方

年度	2003	2004	2005	2006	2007	2008~
フェーズ	研究開発	研究開発	評価	高度化・強化	実証	成果活用
グリッド研究開発 (国情研拠点)	・仕様決定 ・要素技術のプロトタイプ	統合α版 UNICORE/Globusベース ・グリッドRPC ・グリッドMPI ・早期提供	統合β版 ・データグリッド ・分子研への導入 ・中国研(超算)テーマ	統合1.0版に向けての高度化 ・β版の展開によるグリッド環境強化	統合1.0版	配布
システムの実証研究 (分子研拠点)	・ソフトウェア/方法論開発 ・産業界公募 ・α版統合ナノシミュレーションシステム開発	・アプリケーションソフトウェアの開発 ・グリッドRPC、グリッドMPIの導入 ・大規模実証の分子研システムで実証 ・産業界公募研究開始	・アプリのグリッド化 ・産業界公募研究 ・超算・超算向け開発	・β版環境での評価/実証準備	・V1.0版に向けた環境での詳細実証準備	実証計算 大学・国立研究開発機関の技術をスムーズに民間に移せる実用的な仕組み
インフラ		・両拠点でのシステム導入 ・両拠点のグリッド構築構築	・α版による両拠点間グリッド連携	・β版による両拠点間グリッド連携		・実証計算のための100Tflops級への環境構築 ・超算連携開始(7月)

National Research Grid Initiative

研究開発戦略

- 成果のオープンソース化と海外プロジェクトとの連携
 - 研究プロジェクトの国際化と互換性(Interoperability)の重要性
 - 運用ツール類などの相互活用(ポータビリティ)
 - 例: EGEE, UNICORE/Unigrids, Teragrid 等との技術交流
- 国際標準への準拠と貢献
 - UNICORE, Globus, OGSA準拠の開発方針
 - GGF(Global Grid Forum)への積極的参画 (Working Group への仕様提案, 先行実装など)
 - NAREGI成果のグリッド基盤としての将来性・持続性

National Research Grid Initiative

グリッド研究開発研究項目

- グリッド環境における資源管理 WP-1
松岡(東工大)、河野(電通大)、合田(東工大)
- グリッドプログラミング環境 WP-2
関口(産総研)、石川(産総研)
- グリッドアプリケーション環境 WP-3
宇佐見(国研研)、川田(宇都宮大)
- データグリッド環境 WP-4
松田(阪大)
- グリッド対応ネットワーク通信基盤 WP-5
下條(阪大)、尾家(九工大)、今瀬(阪大)
- ナノシミュレーションのグリッド化 WP-6
青柳(九大)

National Research Grid Initiative

グリッド基盤ソフトウェアと研究項目

National Research Grid Initiative

グリッド基盤ソフトウェアによる連成計算の実現

National Research Grid Initiative

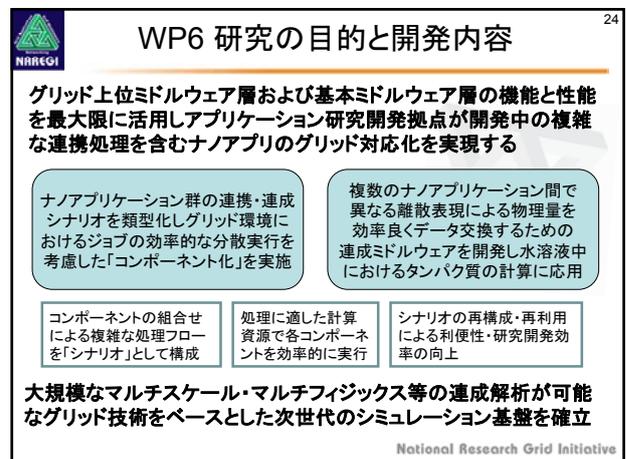
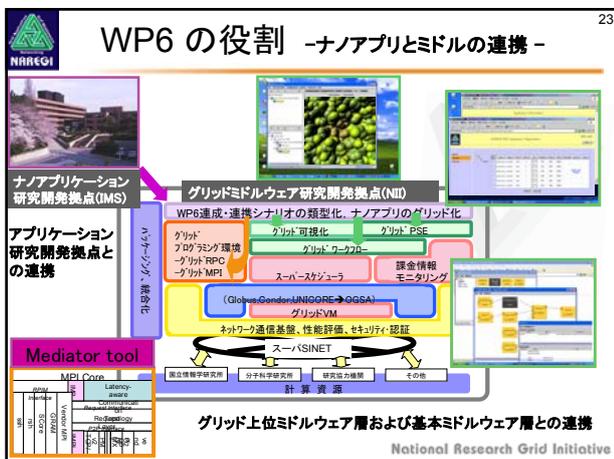
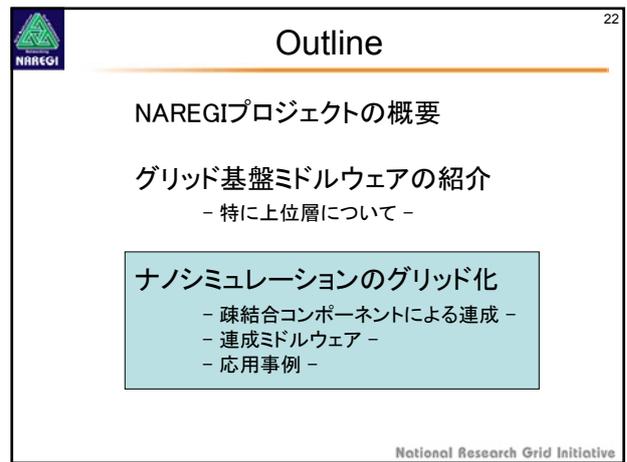
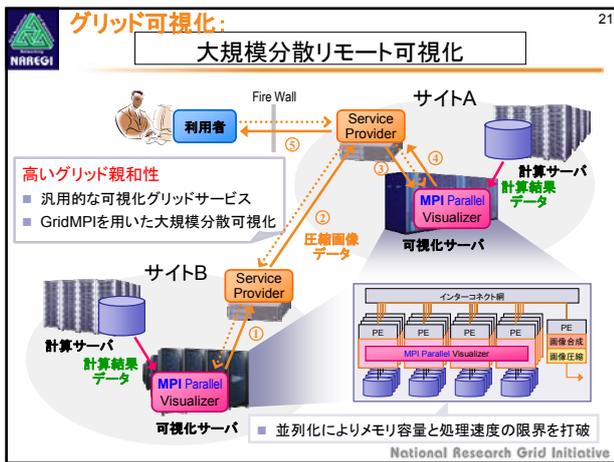
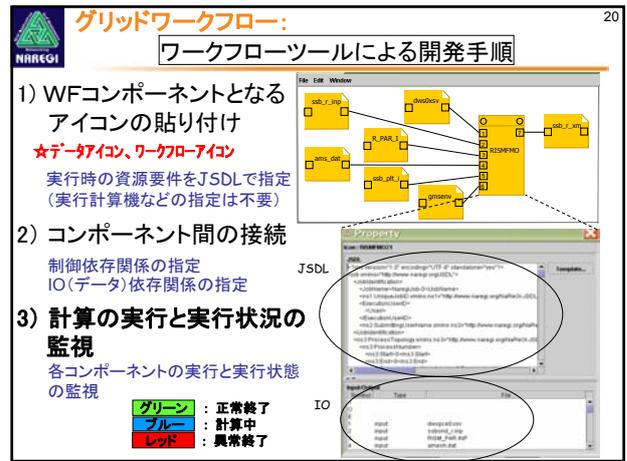
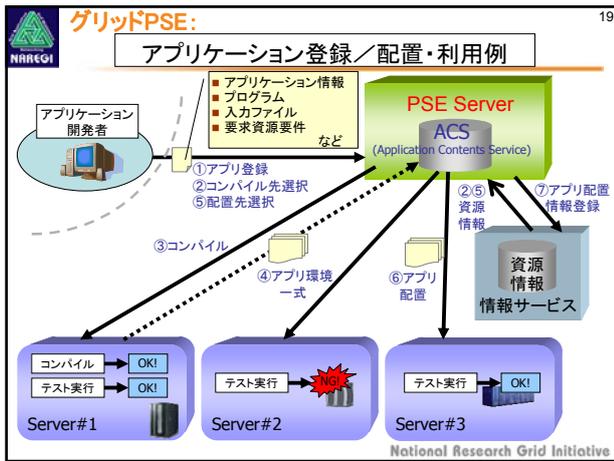
NAREGI拠点間での連成計算実行例

National Research Grid Initiative

NAREGI ミドルウェアの特長的機能

- 資源管理ミドルウェア(WP1)**
 - ジョブ要件に適合する資源の自動ブローカーリングとジョブ実行制御
 - グリッド上での連成計算のサポート(資源のコアローケーション)
 - 大規模ジョブの複数システムでの分割実行サポート
- プログラミング環境(WP2)**
 - 標準仕様(MPI-1, MPI-2)に準拠したMPI(通信)ライブラリ
 - GGF標準仕様に準拠したRPC(遠隔手続き呼出)ライブラリ
- アプリケーション環境(WP3)**
 - グリッドを意識せずに利用できるユーザサポート環境(PSE)
 - GUIによる容易なプログラミング連携機構(ワークフローツール)
 - グリッド上に分散した大規模データの可視化機能(グリッド可視化システム)
- セキュリティ(WP5)**
 - 運用のための認証局ソフトウェア(NAREGI-CA)
- ネットワーク環境(WP5)**
 - グリッド環境を考慮したネットワーク資源の管理・制御機能
- ナノシミュレーションのグリッド化(WP6)**
 - Mediatorと通信ライブラリによる連成計算用ミドルウェア
 - グリッド上で世界最大規模の溶媒中タンパク質の連成計算の実行

National Research Grid Initiative



25 ナノアプリケーションの連成シナリオの分析

演算粒度, コンポーネント間のデータ転送容量, 遅延許容度などを考慮したコンポーネント化

電子状態SCFループ

モノマー → 結合 → ダイマー

疎結合並列型の例

MD → PB

同期 非同期データ転送

逐次型の連成シナリオ例

Fragmentation → Calculation → Assembly

連成データ交換型の例

National Research Grid Initiative

26 研究開発成果(1) GAMESS FMO のグリッド化

ナノアプリケーションの分析とコンポーネント化

- ① 計算粒度と通信容量を考慮しコンポーネント化
- ② コンポーネント間のデータ通信を記述
- ③ nonグリッド環境でのテスト実行 standard shell + rsh/rcp etc..
- ④ グリッドミドル上位層により各コンポーネントを DEPLOYし, ワークフローを構成しSSIに投入・実行

National Research Grid Initiative

27 研究開発成果(1) GAMESS FMO のグリッド化

ワークフローと可視化(グラミシジン分子の例)

read fragment DB → monomer calculation → density exchange → dimer calculation → total energy

コンポーネント化

グリッドミドルウェアが各コンポーネントの最適な計算資源を選択配置

中間結果の可視化等, ジョブシナリオの柔軟な再構成が可能

IMS Resources

データ集約, データ分配, ツールの活用

National Research Grid Initiative

28 グリッドデータベースの利用

タンパク質最適化構造と初期電子密度(1)

To be used in the other FMO simulations

Retrieve

Register

Fragment Database

The Fragment density is stored in the Fragment Database system.

Register

Register

National Research Grid Initiative

29 グリッドデータベースの利用

タンパク質最適化構造と初期電子密度(2)

Search

Fragment Search Program

Fragment search result list

Register

Retrieve

more information...

Fragment Register Program

Fragment FMO103 is removed

National Research Grid Initiative

30 グリッド上における疎結合FMO計算の例

血清アルブミン分子(1897 2原子, 1122フラグメント)をNII GridとIMS Gridを使用しNAREGI上位層とフラグメントDB機能を用いて計算

7箇所のかぎ穴それぞれに脂肪酸を取り込む際の安定化エネルギーを算出

血液中の脂肪酸伝搬のミクロなメカニズムを解析中

National Research Grid Initiative

研究開発成果(2) 連成ミドルウェアの開発

グリッド連成ミドルウェア (Mediator) の概要

For Multi-Scale and Multi-Physics Simulations

アプリケーション・コンポーネントの独立性を保持しながら、幅広いナノアプリケーション群を簡単な操作で連成させることが可能なグリッド連成ミドルウェア (Mediator) を開発した

Mediator library calls:
 Call initialize, Call register (correlative specification, discrete type, number, coordinate)
 Mediator A, Mediator B, Mediator C, Mediator D, Mediator E
 Mediator System
 Call send(ByteA), Call receive(ByteB, Fun)

分散データ間相関関係の例

球内相関 第一近接相関

Mediatorは複数のアプリケーション間で相関関係にある離散点上の物理量を検索しデータ交換する機能と同意物理量に対する意味変換機能を持つ

National Research Grid Initiative

研究開発成果(2) 連成ミドルウェアの応用1

Molecular Dynamics と Poisson-Boltzmann法をMediatorで連成

MD simulationによる水和構造の計算 計算された比誘電率を離散点上の相関分布として変換 PB法による静電ポテンシャルの計算

Active site of Glu35
 Local dielectric model
 PB法による静電ポテンシャルの計算

同期/非同期データ転送
 逐次型の連成シナリオ例

水和リゾチームの活性中心 Glu35における水素解離エネルギーを算出

Shift of $\Delta C_{p,35}$ (kJ/mol) vs Time (ns)

Active site of Glu35
 Effect on H₂O dissociation

National Research Grid Initiative

研究開発成果(2) 連成ミドルウェアの応用2

RISM-FMO連成計算方法とグリッド化の利点

3D-RISM Mediator FMO

等間隔メッシュ 離散点間の相関関係を定義 アダプティブメッシュ

溶媒分布関数の計算 異なる離散化方式の間でデータを効率的に交換 モノマー-fragmentsの計算

溶媒分布 溶質の有効電荷 q_{α} ダイマー計算

RISMはSMP, FMOはPCクラスター等、アプリに適した計算資源上で各コンポーネントを効率的に実行

National Research Grid Initiative

連成シミュレーションモデルの比較

Coupled simulation	RISM-FMO	MD-PB
Discretization method	FDM / Irregular point	Particle / FDM
Physical quantities to be transformed	Solvent charge density to charge on solvent atoms	Dielectric distribution, Charge on atoms to charge density
Correlation specification	In-rectangular	In-sphere
Transformation function	Weighted function conserving charge	Weighted function equalizing electric field
Programming style	Sequential / Master-Worker	Master-Worker / Sequential
Communication paradigm	Two-way iterative communication	One-way, Variable communication
Interconnection	GridMPL, MPICH-G2, GridFTP, MPICH, Score	MPICH, MPI2, Stampi
Server machines	Hitachi SR8000, AIX, Linux, Alpha clusters	Hitachi SR8000, SR2201, DEC, Sun clusters

National Research Grid Initiative

研究開発成果(2) 連成ミドルウェアの応用2

RISM-FMO連成による水溶液中リゾチームの解析結果

Mediatorを利用したRISM-FMO連成計算により水溶液中リゾチームの電子構造解析を行い、糖の加水分解に溶媒和した水のプロトン移動が重要な役割を果たしていることを解明した。

プロトン移動がトリガーとなる糖の加水分解メカニズムを解明

Peptidoglycan
 NAM: N-Acetylmuramin
 NAG: N-Acetylglucosamin

Glu35 活性中心
 水和構造は前述のMD-PB連成計算(応用1)により決定

糖鎖の加水分解

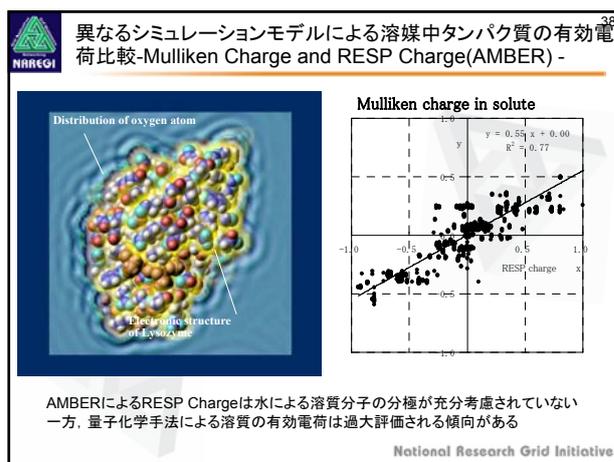
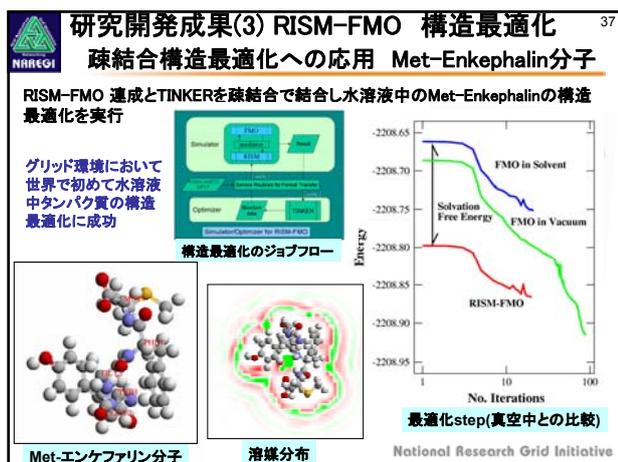
National Research Grid Initiative

溶媒中タンパク質の連成シミュレーション

水和リゾチームの電子状態とプロトン移動

水和リゾチームのGlu35活性部位の選定

National Research Grid Initiative



Concluding remarks 39

A solution based on Research Grid will have significant advantages for customizing interdisciplinary simulations,

and

Grid will make a big chance for the Collaboration between Computational Scientists and Computer/Information Scientists in HPC field.

National Research Grid Initiative