

ITBL 基盤システムとネットワーク・コンピューティング

平山俊雄、鈴木喜雄

ITBL Infrastructure and Network Computing

by

Toshio Hirayama, Yoshio Suzuki

ABSTRACT

The ITBL project is aimed at providing hardware and software infrastructures which facilitate joint researches among (distantly) remotely located institutions by efficiently and effectively inter-connecting valuable supercomputers, large-scale research and experimental facilities, and large-scale databases through the internet. Under the ITBL project, shared use of the supercomputers in all research institutions in Japan is to be made possible by year 2005. JAERI, in cooperation with RIKEN, are handling the development of a common basic technology required for implementing the ITBL project. In the first year, CCSE carried out the detailed design and prototype development of the ITBL infrastructure software. The global structure and main functions of this infrastructure software are described.

1. はじめに

ITBL 計画では、離れた場所に設置されたスーパーコンピュータ、データベースを高速な広域ネットワークで接続し、複数のスーパーコンピュータの協調利用、データベースを共有した協調的研究環境を実現することにより、計算科学技術の飛躍的發展を目指している。実現するためには、1) 分散配置された計算機の中から低負荷の計算機を検索し、一連のタスクを自動的に実行する、2) 複数のスーパーコンピュータの連携による大規模、複雑なシミュレーションの実行、3) 遠隔地にある複数の研究者による共同研究の支援等、を行うソフトウェア環境が必要となる。このような環境の提供を目的として開発を進めているのが ITBL 基盤システムである。第2章では、ITBL 計画について記述し、第3章と第4章でそれぞれ、ITBL 基盤システムの概要とこの基盤システムを利用する環境について記述する。また、第5章において、ITBL 基盤システムにおける可視化システムについての簡単な紹介を行い、第6章と第7章でそれぞれ PATRAS と AVS について記述を行いながら実現しているネットワーク・コンピューティングの試験例について示している。最後に第8章でまとめを記述する。

2. ITBL 計画

日本原子力研究所計算科学技術推進センターでは、高速ネットワークの整備と併せて注目されるようになったグリッドコンピューティング要素技術¹⁾など最新の情報処理技術の活用により、旧科学技術庁傘下機関の協力のもと、ITBL (Information Technology-Based Laboratory)

プロジェクトを推進している。本プロジェクトは、平成13年に発表された e-Japan 重点計画「高度情報通信ネットワーク社会の形成に関する重点計画」において、国の重要施策として位置付けられている。ここで、「世界最高レベルの研究環境を整備・維持し、研究推進の一層の向上を図るとともに、産学官の研究への迅速かつ的確な情報提供を進めるため、科学技術・学術情報基盤の整備を推進する」ことを目標に、「研究開発の IT 化を進めることにより、先端的な科学技術の各分野において技術革新を実現するため、平成17年までに、国内すべての研究機関のスーパーコンピュータを大容量ネットワーク上に共有化し、高度なシミュレーションなどを行う仮想研究環境 ITBL を構築する」とされている²⁾。

当初からの参加機関は、独立行政法人物質・材料研究機構、独立行政法人防災科学技術研究所、独立行政法人航空宇宙技術研究所、理化学研究所、日本原子力研究所、科学技術振興事業団の6機関であり、平成15年には各大学での適用、展開が行われるよう計画されている。日本原子力研究所は、理化学研究所と共同で ITBL に必要な共通基盤技術の開発にあたっている³⁾。

3. ITBL 基盤システムの概要

他機関のスーパーコンピュータを接続することを前提とし、安全且つ容易なアクセスを実現するために、https, SSL, VPN (理研開発) 技術等を採用し、公開鍵を用いた X.509 認証機構に基づくシングル・サインオンを実現している。通信基盤では、処理に適した通信手法を選択できるため、状況に応じて通信性能とセキュリティを制御できる。また、通信プロトコルの違いは共通の API により吸収できるため、ツールの開発段階では、通信手法の

違いを意識する必要はない。

高性能なミドルウェアとして並列分散アプリケーション構築ツール TME (Task Mapping Editor) がある。TME はコンポーネントプログラミングの支援ツールであり、各サイトの計算機資源にプログラムを割り付け、プログラムの自動実行制御を行う。

他機関に所属する研究者間の情報共有機構として、大域的データ空間を提供し、分散されたデータベースの協調利用を可能としている。また、共同作業の支援サービスとして、協調可視化機能、会議室サービスがある。平成 13 年度は ITBL 基盤システムの α 版の詳細設計とプロトタイプの開発が行われた。

4. ITBL 基盤システムの動作環境

図 1 に ITBL 基盤システムを動作させるための環境について、その構成を示す。ITBL は複数の計算機から構成されると考え、運用上独立とみなせる単位をサイトと呼ぶ。ITBL に参加するサイトのうちいずれか一つのサイトに利用者への証明書発行を承認するための RAO 端末を設置する。各サイトにおいては、1 セットの ITBL サーバを設置する。ITBL サーバは、利用者端末とサイトを構成する実行計算機群の仲介的役割を果たす。ITBL 運用に関わる必要な諸情報は可能な限り ITBL サーバに吸収し、計算サイトの他の計算機への負荷・影響をできるだけ最小化するように考慮している。ここで、ITBL の安全性を高めるため、ITBL サーバの機能を物理的に異なる 3 つの計算機

「ITBL フロントサーバ」「ITBL 中継サーバ」「ITBL データサーバ」で稼働させている。各計算機の役割を以下に記述する。

- ITBL フロントサーバ
利用者端末と ITBL との仲介の役割をする。また、他サイトとの通信は ITBL フロントサーバを経由する。利用者認証やグローバル ID によるアクセス制御を行う。ITBL データサーバ上のデータにアクセスする。
- ITBL データサーバ
ITBL 基盤ソフトの運用に必要な管理データを格納する。また、研究コミュニティの持つ共有データも格納する。ITBL フロントサーバとの間で所定のプロトコルによって通信する。
- ITBL 中継サーバ
実行計算機で動作するユーザプロセスとの通信を中継する。ITBL フロントサーバおよび実行計算機との間で所定のプロトコルによって通信する。

ITBL サイトを構成する計算機群のうち、ITBL サーバ以外の計算機を、計算ジョブ実行計算機（以下、単に実行計算機）と呼ぶ。利用者のアプリケーションプログラムは、実行計算機上で実行される。また、ITBL 基盤ソフトを構成するソフトウェアも、実行計算機上で動作することがある。利用者端末は、Web ブラウザが動作可能な PC あるいはワークステーションである。Web ブラウザは Java applet を動作させる機能を持つ必要がある。利用者端末には、ブラウザ以外の特別なソフトウェアのインストールは不要であるが、利用者認証のために証明書のインストールが必要である。また、Java applet 動作のために

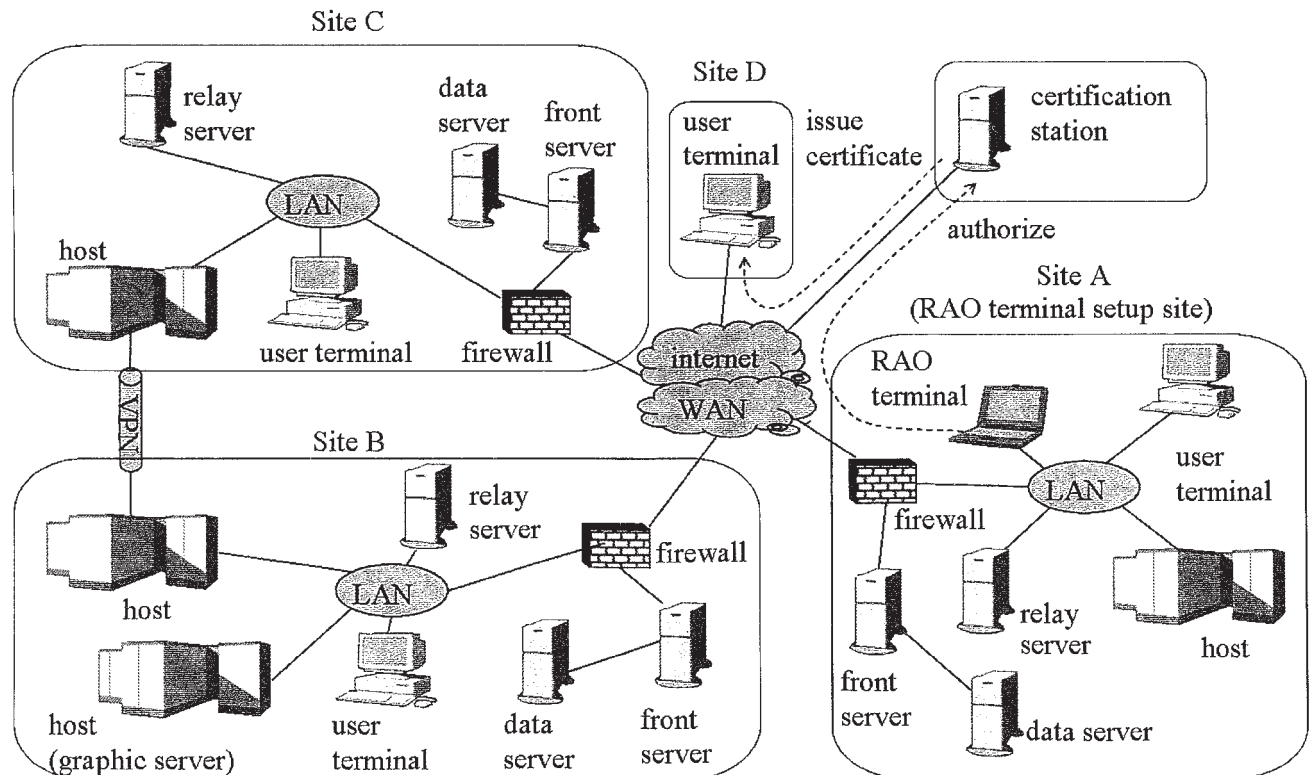


図 1 ITBL システム構成図

Web ブラウザのプラグインのインストールが必要になることがある。なお、後述の通り、「AVS 可視化システム」の利用の際には、実行計算機の一つである可視化サーバも利用者端末として位置付ける。VPN (Virtual Private Network) は、複数サイトの実行計算機を使って、サイト間をまたがる並列処理を実現するために用いられる。並列処理を行う実行計算機は、VPN により IP アドレスによる直接通信ができる。ファイアウォールは、一般的に、各サイトのセキュリティ向上のため、サイト内外をつなぐネットワーク上のデータの流れを制限/監視するために設置されているが、ファイアウォールが設置されている状況下においても、サイトをまたがった計算機の利用が可能であることが ITBL の大きな特徴の一つとなっている。

次に利用形態について説明する。ITBL の利用者は、必ず一つのグローバル ID を持つ。グローバル ID は、利用者に一通ずつ発行される利用者証明書と一対一に対応する。また、利用者は、必ず一つの拠点サイトを持つ。利用者が ITBL を利用するときは、必ず拠点サイトを經由して利用する。利用者は、ITBL 計算機上において、計算プログラム、データベースの利用に関わる情報の交換を行い、効果的かつ効率的に研究を遂行するための研究コミュニティへの参加が可能である。

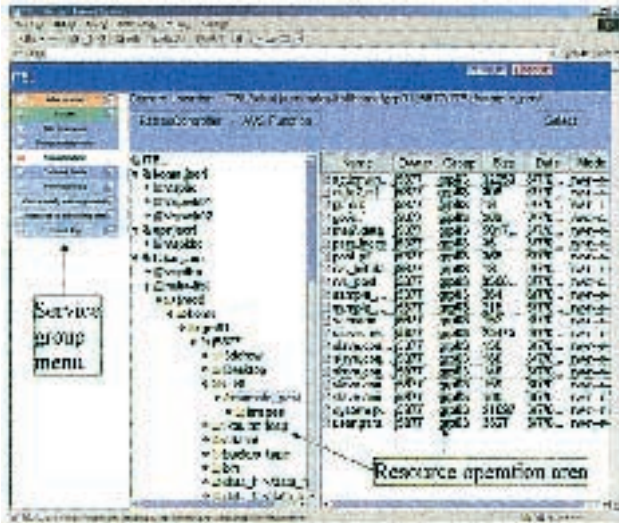


図2 ITBL ポータル画面

グローバル ID を用いると、Web ブラウザに ITBL ポータル画面を表示することが可能となる。図2に ITBL のポータル画面を示す。左側にはメニューが、中央には利用可能な実行計算機の一覧がサイトを問わず表示されている。ここで、各実行計算機を選択することにより配下のディレクトリがツリー構造で表示される。また、右側には各ディレクトリに置かれているファイル一覧が表示される。図2ではメニューから visualization が選択されており、ITBL の可視化システムとして開発が行われてい

る PATRAS と AVS が選択できる状態になっている。

5. ITBL 基盤システムの可視化ツール

ITBL 実行計算機上で実行される数値シミュレーションの結果を可視化するソフトとして、ITBL 環境適合型可視化ソフト PATRAS/ITBL 及び AVS/ITBL の実装及び開発が進行中である。

PATRAS/ITBL は、ITBL で実行されるシミュレーションにおいて実時間可視化が行えるよう、日本原子力研究所が NEC 社と共同で開発を行っている可視化ソフトである。第1章に記述されているように、ITBL では、数値シミュレーションは地理的に離れた場所に設置された複数台のスーパーコンピュータを有効に利用して行うことが念頭に置かれているため、実時間可視化ソフトは、このような状況で行われるシミュレーションに対応している必要がある。さらには、このような地理的に離れた場所にいる複数の研究者間でシミュレーション結果の議論を行えるよう、協調的に可視化が行える機能の開発が行われている。

AVS/ITBL は、市販ソフトである AVS/Express をベースに開発されている。AVS/Express は科学計算結果のポスト可視化に広く用いられているが、ITBL ではデータ読み込みモジュールを拡張することにより、拠点サイトの可視化サーバから任意サイトの ITBL 実行計算機のディスクに置かれているデータを直接読みに行くことが可能となっている。また、AVS/Express によって可視化される画像に対して、ネットワークファイル(V ファイル)を指定するだけで、Web ブラウザ上で表示できるよう開発されている。従って、AVS/Express に精通していない利用者であっても、共同研究者等によって予め作成されたネットワークファイルの保存場所さえ知っておけば簡単に可視化が行える。

6. PATRAS/ITBL

6.1 全体構成

PATRAS/ITBL は、ITBL 実行計算機で実行されるシミュレーションの結果に対して、ネットワークで接続されたユーザ端末の Web ブラウザ上で解析と同時に可視化が行える(トラッキング)、また、Web ブラウザ上で解析の途中に可視化パラメータを制御できる(ステアリング)、実時間可視化ソフトとして開発された^{4,5,6)}。PATRAS/ITBL を利用するためには、必要な組み込み用サブルーチンをシミュレーションプログラムから呼び出し、必要に応じてユーザ関数のコーディングを行わなければならない。PATRAS/ITBL サーバの組み込み用サブルーチンやユーザ関数の仕様については「ITBL 環境適合型可視化システムの開発におけるライブラリ・インタフェースの機能拡張リファレンスマニュアル」⁷⁾に記載されている。可視化の図種としては、オブジェクト、等高線、流線、ベクト

ル矢印、等値面などが採用されている。可視化処理はシミュレーションが実行される実行計算機の各プロセッサで実行され、最終的に時刻ステップごとに1枚の可視化画像が生成される。各プロセッサ上では、当該プロセッサが担当する部分領域についての可視化処理を実行する。部分領域境界における可視化処理のため、隣接するプロセッサ間で必要なデータをやり取りする。各プロセッサ上で生成された画像はLバッファ値配列データを持っており、これを参照し陰面処理することにより、最終的に特定の1つのプロセッサ上で1枚の画像に合成される。ここで並列可視化処理のためMPIが利用されている。生成された可視化画像はITBLサーバを経由して利用者端末に転送されるが、画像圧縮技術を用いることにより、転送されるデータ量が削減されている。利用者端末では、PATRASのクライアントをITBLサーバから利用者端末にロードすることにより利用される。ここで、ユーザ端末とITBLサーバ間はhttpsで通信が行われ、ITBLサーバと並列計算機間では遠隔関数呼び出し型ツール間通信ラ

イブラリ Starpc⁸⁾ による通信が行われている。

6.2 異機種間連携可視化

異機種並列計算機間通信ライブラリ Stampi^{9,10)} の使用により、同一サイト内および複数サイト間で異機種間連携可視化を行うことができる。異機種間連携可視化の表示方法には、異なったマシンごとの画像を1つの図にまとめる連成シミュレーションに対する可視化と、単一シミュレーションを異なった解析パラメータセットで、異なったマシンごとに計算して画像を並べて表示する可視化がある。

ネットワーク・コンピューティングの試験例として、圧縮性流体解析と熱伝導解析の連成シミュレーションの可視化結果を図3に示す。圧縮性流体解析プログラムと熱伝導解析プログラムはそれぞれ日本原子力研究所那珂研究所のOrigin3800と東海研究所のSR8000上の1CPUずつを用いて実行されている。那珂研究所と東海研究所は地理的に約10km離れており、コンピュータはGigabitイーサネットで接続されている。

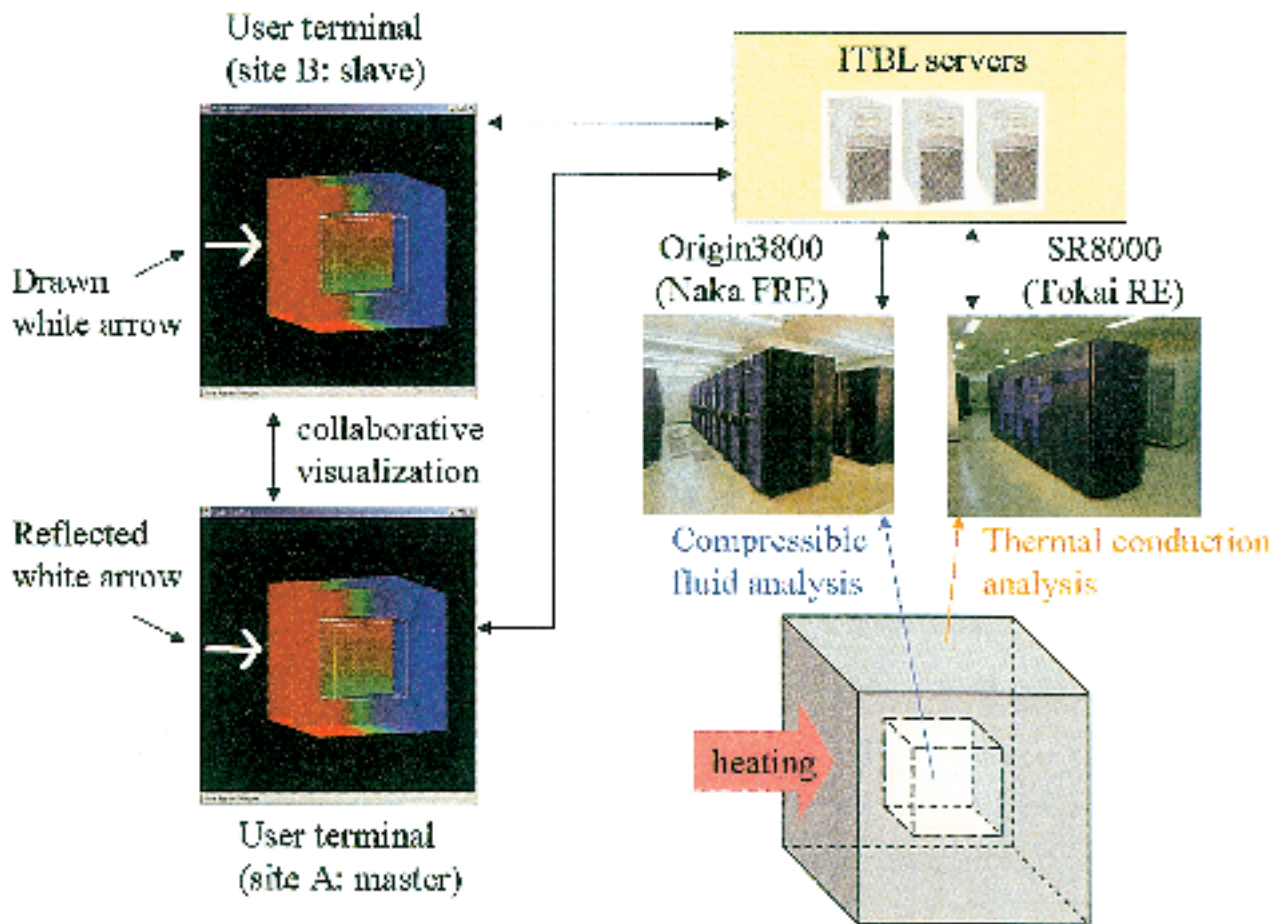


図3 連成シミュレーションの実時間可視化、コラボレーション機能、およびホワイトボード機能。

1×1×1[m]の銅製立方体容器中の0.6×0.6×0.6[m]閉領域に閉じ込められた圧縮性流体の自然対流について、3次元シミュレーションを行っている。初期条件としては、容器は300[K]の一様分布、流体は300[K]の一様分布および静止状態としている。境界条件としては、容器の一外壁側面から5[kW/m²]で熱を加えている。

6.3 コラボレーション機能

ここで記述するコラボレーション機能とは、遠隔地間の複数の研究者が、Web ブラウザを通して、同時にこの実時間可視化を行える機能を意味している。また、彼らを、パラメータ等の変更権限を有するオーナー（マスタークライアント）と有さない一般参加者（スレーブクライアント）に分類することにより、一般参加者は常にオーナーが見ている画像と同じ画像を見ることができるよう開発されている（ただしオーナーは一人）。オーナー権限を、研究者間で移動することも可能である。

6.4 ホワイトボード機能

ホワイトボード機能として、オーナーが表示画像に対してマウスを用いて自由に書き込みを行える機能、さらに、書き込まれた情報を一般参加者が見ている画像に反映させる機能の開発が行われている。これにより、単に同じ画像を見ているだけではなく、画像の一部分を指し示したり、対流等ダイナミックな現象の方向を書き記したり、といったことを行うことが可能となり、研究者間の議論のサポートを行うことができる。図3にホワイトボード機能の一例が示されている。この例ではサイトAにおいてオーナーが白の矢印を記入した場合に、サイトBにいる一般参加者の画像に白の矢印が反映されている様子が示されている。

6.5 可視化形態と処理モード

これまで、ITBL/PATRAS における可視化形態として、実時間可視化のみに注目して記述を行ってきたが、PATRAS/ITBL の仕様から分かる通り、シミュレーションプログラムとは独立したプログラムを作成することにより、ポスト可視化にも利用することが可能である。また GUI を用いたインタラクティブ処理モードのみではなく、バッチ処理モードの利用も可能である。バッチ処理モードではユニバーサルシナリオファイルとよばれる可視化のシナリオを記述したファイルを用意しておくことにより、シナリオに沿った画像ファイルの出力を行うことが可能である。これら可視化形態と処理モードの組み合わせによって、モニタリングやアニメーション作成など柔軟な利用が行える。

7. AVS/ITBL

7.1 AVS クライアントによる可視化機能

AVS/ITBL は、業界標準の汎用可視化アプリケーション AVS/Express をベースに開発されている。AVS/Express は以下の特長を有しておりポスト可視化に適している。

- ・ 可視化サーバ上（クライアントサイド）で可視化モジュールを組み合わせる自由度の高い可視化処理を行える。
- ・ X のインターフェースでインタラクティブな可視化操作を行える。

但し、AVS/Express の標準機能では、可視化対象となる

データは、拠点サイトにある実行計算機（可視化サーバ）上に存在していなければならない。他サイトにある実行計算機上のデータは対象となっていない。そこで、AVS/Express に ITBL 環境の実行計算機との通信機能を持たせ、AVS/Express からの操作によって、シームレスに全サイトの実行計算機上のデータを可視化できる機能として「AVS クライアントによる可視化機能」の開発が行われた。AVS クライアントによる可視化機能では、以下のデータの読み込みをサポートしている。

- ・ 可視化標準データ

可視化標準データ format で記述されたデータを AVS/Express で処理可能な形式に変換し読み込む機能。現在、AVS FIELD データ、AVS UCD データ、PDB (Protein Data Bank) データが対象となっている。

- ・ 階層化データ

階層化データのランタイムデータアクセスモジュールを使用したりリモートファイル読み込み機能。実行計算機上に存在する大規模データを、可視化に必要な最小限なサイズに downsize することにより、効率的なデータ転送と可視化を実現している。

7.2 Web クライアントによる可視化機能

可視化サーバを所有しない利用者也、実行計算機上の計算結果を利用者端末上で容易に可視化することができるよう、Web クライアントによる可視化機能の開発が行われた。これにより、可視化サーバを持つ従来からの AVS/Express の利用者だけでなく、ITBL 環境を利用する全ての利用者が可視化資産を共用でき、可視化を利用した共同研究の促進を図ることができる。図4に Web ブラウザでの可視化例を示す。2次元 (GIF) 表示、3次元 (GFA) 表示の選択が可能となっている。



図4 Web ブラウザでの可視化例。

結果の可視化に AVS/ITBL が用いられているネットワーク・コンピューティングの試験例として、メタンの混合比を変えた乱流燃焼解析を示す。ここで、4 台のスーパーコンピュータを使ってパラメータランを行っている。各計算機の途中結果を中目黒サイト(現在は、センター移

転に伴い上野サイトとなっている)に集め、可視化表示を行い、その中から最適なパラメータの結果を選択し、最も計算パワーのある東海サイトに途中結果を送り、計算を継続するという一連の作業を、100km 離れたサイト間をつなぎ行うことができた。この結果を図 5 に示す。

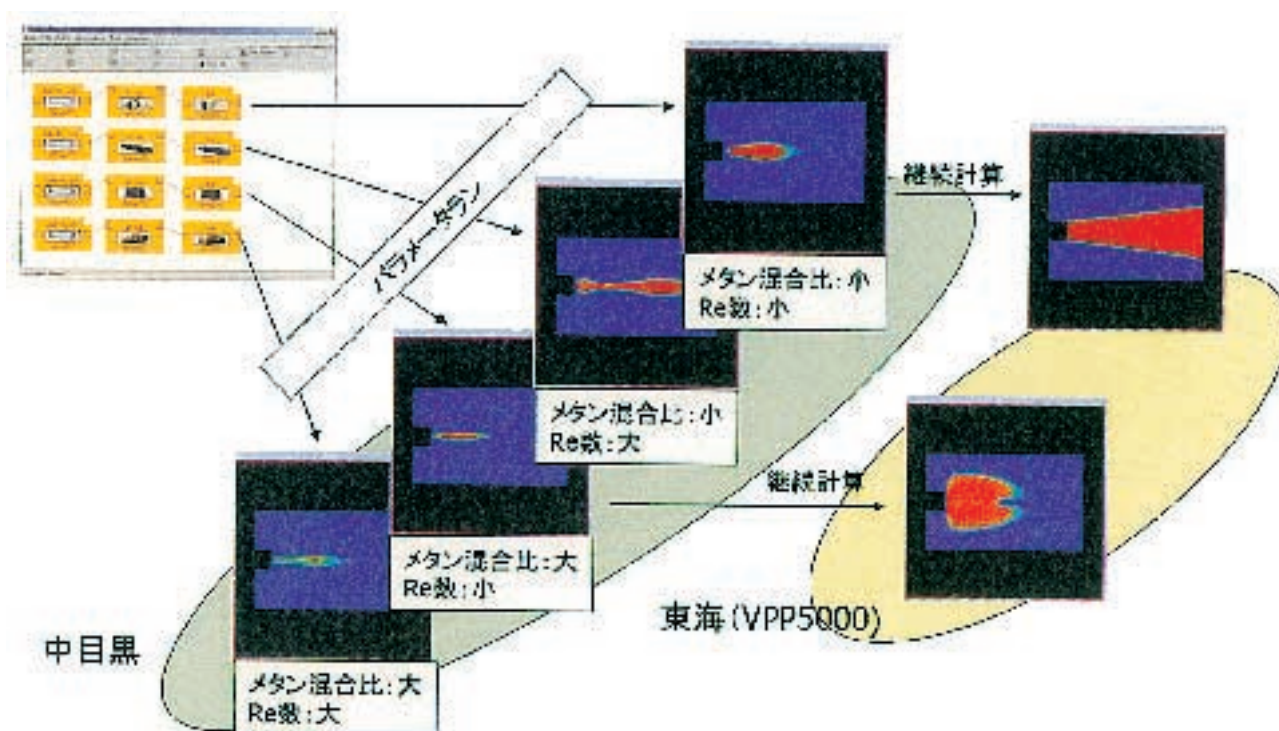


図 5 メタンの混合比を変えた乱流燃焼解析。左上に示されているのが TME の画面である。

8. まとめ

ITBL 基盤システムの開発はその α 版プロトタイプができたところであり、現在、原研のテストベッド上で精力的に試験・改良を進めている。 α 版の公開は今秋を予定している。今後の計画としては、グリッド技術の標準化と国際的協力関係の下で、ITBL 基盤システムに Globus 技術を採用し、多方面のグリッド研究成果との互換性を確保する予定である。

参考文献

- 1) Foster, I. And C. Kesselman, Ed.: The GRID, Blue Print for a New Computing Infrastructure. Morgan Kaufmann (1998).
- 2) 山口勇吉, 武宮博: 仮想研究環境 ITBL 基盤ソフトウェアの開発, 日本数値流体学会誌, Vol. 9, No. 3 (2001) pp. 83-88.
- 3) <http://www.itbl.jp>
- 4) 村松一弘, 大谷孝之, 松本秀樹, 武井利文, 土肥俊: 並列計算機上での流体解析のための実時間可視化システムの開発, JAERI-Data/Code 1998-014 (1998).
- 5) Chen, J. X. et al.: Advancing Interactive Visualization and Computational Steering, Computational Science & Engineering, Vol. 3, No. 4 (1996) pp. 13-17.
- 6) Mulder, J. D. and van Wijk, J. J.: 3D Computational Steering with Parameterized Geometric Objects, Proc. Visualization' 95, IEEE Computer Soc. Press (1995) pp. 304-311.
- 7) ITBL 環境適合型可視化システムの開発におけるライブラリ・インタフェースの機能拡張リファレンスマニュアル (2002).
- 8) 武宮博, 山岸信寛: 並列計算機クラスタ上のツール間通信を支援するライブラリ: Starpc - Starpc 利用及び開発手引書, JAERI-Data/Code 2000-006 (2000).
- 9) 今村俊幸, 小出洋, 武宮博: 異機種並列計算機間通信ライブラリ: Stampi 利用手引書第二版, JAERI-Data/Code 2000-002 (2000).
- 10) Imamura, T. et al.: An Architecture of Stampi: MPI Library on a Cluster of Parallel Computers. In Recent Advances in Parallel Virtual Machine and Message Passing Interface, LNCS 1908 Springer (2000) pp. 200-207.