

グリッドコンピューティングシステムの導入

水谷文保

分子科学研究所 技術課

概要

平成 15 年度より 5 年計画で開始された超高速コンピュータ網形成プロジェクト (NAREGI: National Research Grid Initiative) において、2 つある拠点の 1 つを分子科学研究所が担うことになった。このプロジェクトを推進するため、そしてナノサイエンス分野の構築とアプリケーション開発研究を目的として、10TFLOPS の演算性能を有するグリッドコンピューティングシステムの導入を行った。プロジェクトの概要とシステム導入について報告する。

1 はじめに

超高速コンピュータ網形成プロジェクト (NAREGI) は、平成 15 年度より 5 年計画で開始している。このプロジェクトは、文部科学省の産学官連携研究プロジェクトに位置づけられている。NAREGI は、2 つの拠点から構成されている (図 1)。1 つは、情報学研究所を中心としたグリッド研究開発推進拠点[1]であり、グリッド用基盤ソフトウェアやネットワーク技術の研究・開発を目指している。もう 1 つは分子学研究所を中心としたアプリケーション開発拠点[2]であり、ナノサイエンスをテーマとして掲げ、新素材や次世代超微細デバイス等の研究開発に不可欠な応用ソフトウェアやシミュレーションの研究を目指している。

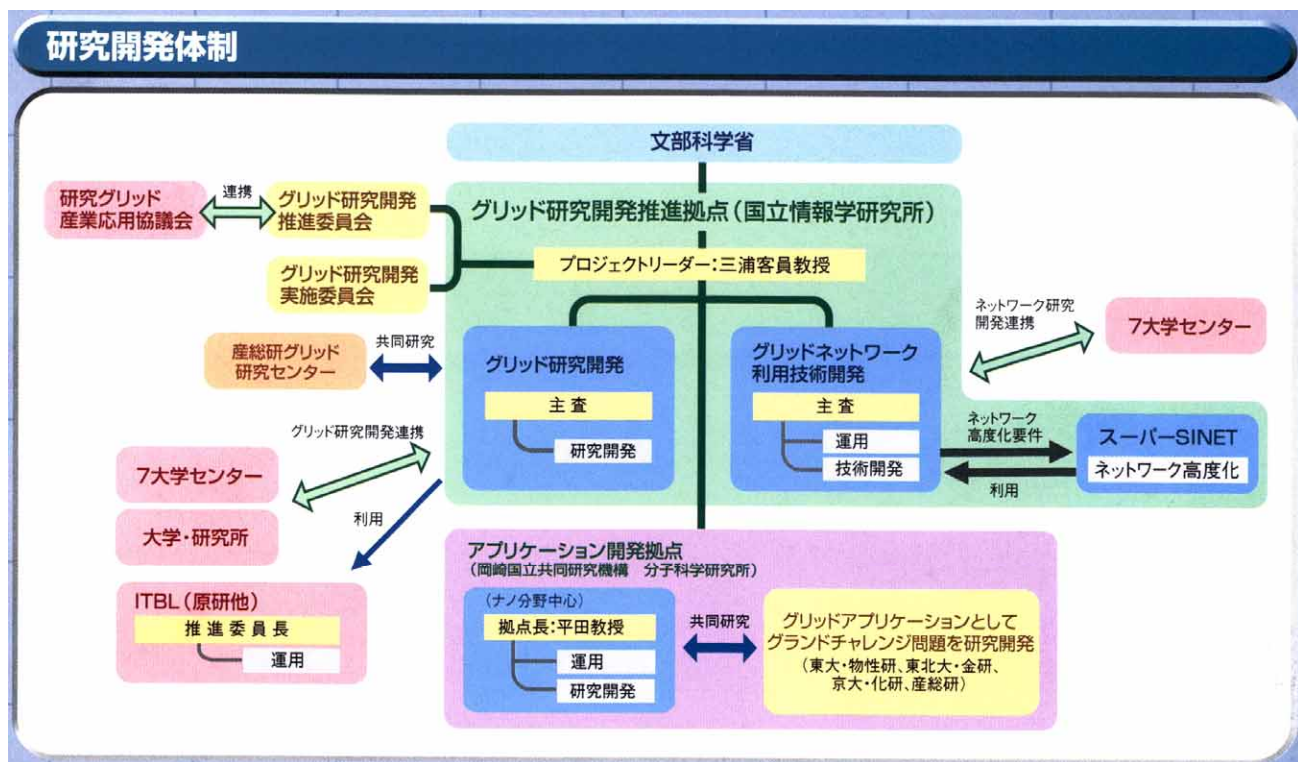


図 1 プロジェクト体制

アプリケーション開発拠点である分子科学研究所では、ナノシミュレーションの研究を行うための計算機整備として、平成 15 年度にグリッドコンピューティングシステムを導入した。アプリケーション開発拠点における体制では、研究開発班と並列にグリッド運用班として技術組織が設置されており、システムの導入にはグリッド運用班が中心的な役割を果たしている。システムの導入経緯と経過について報告する。

2 システム構成

グリッドコンピューティングシステムの構成を図 2 に示す。このシステムは、総理論演算性能が 10TFLOPS であること、計算サーバがバイナリ互換性を持たずタイプの異なる 2 つのシステムから構成されることが大きな特徴である。これはグリッドコンピューティングに期待されている方向性が全く異なる 2 つの側面、大規模計算の実現、と、高スループット環境の実現、をヘテロな計算機環境下で検証することを前提としているため、この様な構成となっている。

2 つある計算サーバのうち 1 つは、共有メモリ型計算サーバとして日立製作所製 SR11000 を導入している。このコンピュータは CPU に 1.7GHz のクロック周波数性能を持つ IBM 製 POWER4+ を用いており OS は Linux と親和性が高い AIX である。1 台のノードは 16 個の CPU が 64GB または 32GB のメモリを共有した構成になっており、50 ノードが 4Gbps の転送性能を有するクロスバー形式の内部ネットワークで密に接続されている。1 ノードの理論演算性能は 108.8GFLOPS を有している。

もう 1 つの計算サーバは、分散メモリ型計算サーバとして日立製作所製 HA8000/110H9 による PC クラスタを導入している。このコンピュータは CPU に 3.06GHz のクロック周波数性能を持つ Intel 製 Xeon を用いており、OS は Red Hat Linux である。1 台のノードは 2 個の CPU が 4GB のメモリを共有した構成になっており、128 ノードが 2Gbps の転送性能を有する Myrinet2000 で接続されたユニットを形成している。

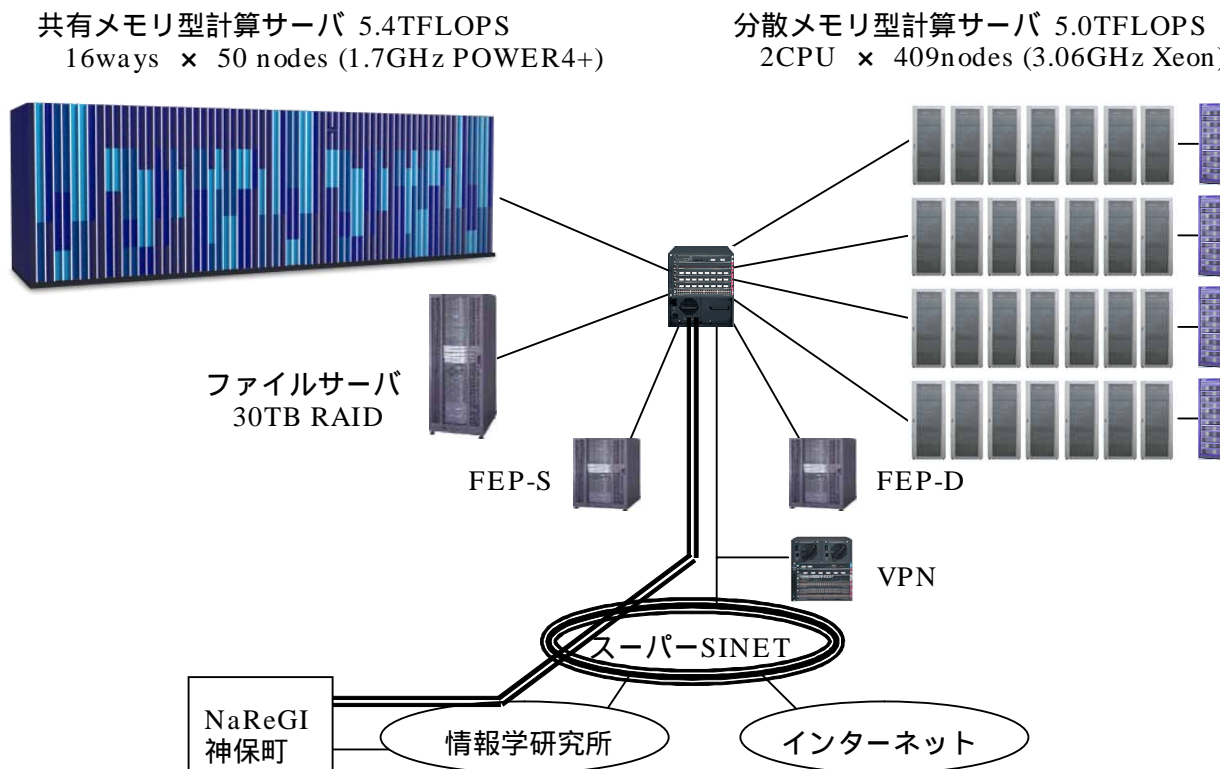


図 2 システム構成

その他に、30TB のディスクを装備したファイルサーバ、それぞれの計算サーバとバイナリ互換性を有したフロントエンドサーバ、管理運用のためのワークステーションとネットワークスイッチから構成される。さらに独自にファイアーウォールと VPN 装置も装備している。

本システムは、岡崎国立共同研究機構ネットワークを通じてスーパー-SINET 網に接続している。さらにグリッド研究開発推進拠点と一体運用を行うために MPLS による 1Gbps の専用回線で接続する予定である。

3 システム運用

グリッドコンピューティングシステムと言っても、ハードウェア的には従来から存在しているコンピュータシステムと何ら変わることは無い。このシステムでは、グリッド技術を使って、グリッドミドルウェアと呼ぶソフトウェア上でアプリケーションプログラムを稼働させて利用する形態を明確に示しているに過ぎない。従ってグリッドを前提とした運用形態を構築することが要求されるが、システムに特化したアプリケーション開発という利用形態ではグリッド環境を特に必要としないことや、グリッド環境構築自身が 5 年間のプロジェクト課題でもあることから、運用当初からグリッド環境下でのみ利用するのではなく、従来の利用形態である会話処理やバッチキュー利用も平行して整備していく。ただしアプリケーション利用の場合においては、グリッド環境下の利用を推進することにしている。

4 研究体制

産学官連携研究プロジェクトという位置づけから、アプリケーション開発拠点では、大学および政府機関による研究開発班から構成されると同時に、産業応用協議会を通じて公募した民間の研究テーマを実施する。特に民間利用という点から、セキュリティについては強い要望が出されている。この点については、運用を行っている中で、可能な限りの整備を行うと共に妥協点を探っていくことになると思われる。

5 技術支援

アプリケーション開発拠点では、技官をグループ長として研究グループと対等に位置づけたグリッド運用班を設置しており、グリッドコンピューティングシステムの導入・運用の責任を担っている。またグリッド研究開発推進拠点とのネットワーク調整・連絡なども行っている。初年度は、システムの導入が支援の大半を占めていたが、今後はシステムの運用の具体的なプランニングなどへ移行していくと思われる。

期間が限られたプロジェクトという意味で、技官の増員を得ることなく従来の組織内で支援を行うことはかなり過酷な状況であると言える。このため専用に業務委託 1 名と事務補佐員 1 名の増員を得ている。

6 さいごに

本プロジェクトにおいて、技術支援は重要な位置づけの元に責任の重い役割を果たしている。今後もプロジェクトが円滑に進行していくよう最大限の支援を行っていきたい。グリッドコンピューティングシステムの導入にあたって、岡崎国立共同研究機構管理局経理部設備課には、設備整備にあたって主導的な役割を果たして頂いていることを申し添えておくと共に感謝の意を表しておく。

参考文献

- [1] グリッド研究開発推進拠点ホームページ, URL <http://www.naregi.org/index.html>
- [2] ナノグリッド実証研究ホームページ, URL <http://ccinfo.ims.ac.jp/nanogrid/>