

グリッド環境下における並列分子動力学ポータルサイトの構築

山本直孝^{†1} 清水大志^{†2} 横川三津夫^{†1}
関口智嗣^{†1} 蕪木英雄^{†2} 姫野龍太郎^{†3}
黒川原佳^{†3} 武井利文^{†4} 松本秀樹^{†5}

大規模な科学技術計算を行う場合には、普段使い慣れない大型計算機環境を利用することはしばしばある。しかし、ジョブを実際に投入するためにはローカルなルールにしたがってコンパイルや実行を行わなければならない。グリッド技術を用いればこれらの手順を一部簡略化することが可能である。さらに、グリッドにおける汎用 PSE 構築キットである Grid PSE Builder を用いることによりユーザはウェブブラウザのみを介してジョブの実行を行うことが可能となる。さらに、ジョブの途中経過をグラフィカルに表示することで、キャンセルや再投入の判断材料にすることが出来る。そこで、本研究では Grid PSE Builder を用いて、並列分子動力学計算ポータルサイトをウェブアプリケーションとして実装し、銅結晶中の転位ループの拡張による構造化過程シミュレーション計算を行なって、その有用性を確認した。

Construction of a Portal Site for MD Stencil on the Grid

NAOTAKA YAMAMOTO,^{†1} FUTOSHI SHIMIZU,^{†2}
MITSUO YOKOKAWA,^{†1} SATOSHI SEKIGUCHI,^{†1}
HIDEO KABURAKI,^{†2} RYUTARO HIMENO,^{†3}
MOTOYOSHI KUROKAWA,^{†3} TOSHIFUMI TAKEI,^{†4}
and HIDEKI MATSUMOTO^{†5}

We have to access a computer center which has supercomputers or large-scale cluster systems to carry out large-scale scientific computations. However, these are not familiar for us to execute the job at the center and therefore a delay of research might be occurred. We can build a portal site for scientific researchers to provide friendly computational environments. In this study, we have constructed a portal site for molecular dynamics (MD) simulations with two application components by using the Grid PSE Builder, which is a developing framework for grid-enabled problem solving environment (Grid PSE). Two components are a MD simulation component by using the parallel MD Stencil and an image generator for snapshots by MD simulations. PSE users can choose one of the components, and then jump to job submission page, job status page, and results download page in this portal site. An image generator provides a monitoring feature of a simulation as an animation on the web browser. We have confirmed the effect of the portal by applying it to a simulation of intrinsic transformation of vacancy dislocation loop in copper crystal.

1. はじめに

科学技術計算において、遠隔にある普段使い慣れない計算機を用いて大規模なシミュレーションを行う場合は少なくない。そのためには、実行計算機へのログイン、システムに依存した実行手順、データのアップロードおよびダウンロードを行わなければならない。様々な実行条件下での繰返し実行、結果の管理など多数の手間を考えるとそれらの作業を代行し、管理することが出来るいわゆるウェブアプリケーションとして実行環境を構築することは研究者が自らの研究分野に専念する上で大きな意味を持つ。本研究では

†1 産業技術総合研究所グリッド研究センター

Grid Technology Research Center, AIST

†2 日本原子力研究所計算科学技術推進センター

Center for promotion of Computational Science and Engineering, JAERI

†3 理化学研究所情報基盤センター

Advanced Center for Computing and Communication, RIKEN

†4 日本電気株式会社

NEC Corporation

†5 株式会社 NEC 情報システムズ

NEC Informatec Systems, Ltd.

PSE (Problem Solving Environment) に注目し、短距離相互作用分子動力学シミュレーションを簡便に実行することが出来る環境の構築を目指す。PSE とは、利用する計算機など計算機環境に対して特に知識を持たない専門家が問題を解決することに専念することができるようにするものである。ただし、最先端の研究を行うものにとってデータの流出は致命的である。したがって、簡便であることと同時にデータ通信などのセキュリティに十分配慮したシステムの構築が必要である。

産業技術総合研究所グリッド研究センターでは、グリッド環境下における汎用 PSE 構築ツールとして Grid PSE Builder の開発を行っている¹⁾。Grid PSE Builder を用いて構築されるウェブ・ポータルではアプリケーション・コンポーネント (以下、単にコンポーネントとする) の選択、ジョブの投入、管理、結果のダウンロードをユーザの PC 上にあるウェブブラウザを用いて行うことができる。ポータルサイトには、計算そのものを実行するためのコンポーネント (計算実行用コンポーネント) とジョブの途中経過を監視するためのコンポーネント (途中経過監視用コンポーネント) の二つを作成した。計算実行用コンポーネントでは、元々のアプリケーションが想定する全てのパラメータセットに対して入力可能な要素を提供できる。途中経過監視用コンポーネントでは、時間遷移のスナップショットデータから画像を生成し、動画として表示する。また、実行中もしくは実行が終了しているジョブを選択することで、画像を生成しウェブブラウザ上で動画として表示される。このツールを用いて、首藤らの S-model による長期気象予報を行うための気象予報グリッドポータル²⁾ や、市販の熱流体解析ツールである PHOENICS をコンポーネントとするウェブポータルサイト³⁾ が構築されている。

本研究では分子動力学法による数値シミュレーションに対してグリッド環境下でのウェブポータルサイトを構築した。第 2 章ではシステムの全体および構成要素の概要を述べ、それらをどのようにポータルサイトとして構築したかを第 3 章で述べる。第 4 章ではポータルサイトを利用した実行例を述べ第 5 章で考察する。第 6 章ではまとめと今後の課題を述べる。

2. システム構成

2.1 並列分子動力学ステンシル概要

並列分子動力学ステンシル⁴⁾ (以下 MD ステンシル) は短距離相互作用分子動力学シミュレーションの並列計算のためのライブラリであり、並列化のための処理が組み込まれた関数群を提供する。分子動力学シミュレーションプログラムを並列化するには、原子間相互作用の計算や原子の位置、速度などの時間積分の手続きを複数のプロセッサで分担することが必要である。

代表的な並列化手法としては、全原子に通し番号をふり、その番号によって原子を各プロセッサに割り当てる粒子分割法と、シミュレーションの空間領域を分割して各プロセッサに割り当て、各プロセッサがそれぞれの領域にある原子を担当する領域分割法の 2 つの方法が用いられる。これらはシミュレーションの対象となる系の相互作用や規模などによって使い分けると良く、一般的に、短距離相互作用の系で原子数が多い時には領域分割法が、原子の分布が様でない系には粒子分割が適している。MD ステンシルはこれら両方の並列化手法に対応している。ライブラリには MD シミュレーションの標準的な構成要素として、数値積分手法 (速度 Verlet 法, Beeman 法, 5 値 Gear 法), 温度および圧力を制御する手法 (能勢-Hoover 法, Parrinello-Rahman 法) や、原子間相互作用を効率良く計算するための近接粒子リストを作成する関数などが用意されている。各関数の並列化には MPI を用いており、多種の並列計算機上での動作実績がある。

MD ステンシルを利用すると、対象となる系に応じた原子間相互作用の計算を行うプログラムを記述するだけで MD シミュレーションの並列プログラムを完成させることが出来る。この相互作用計算のプログラミングでは MPI 関数の明示的な呼び出しを必要としないため、例えば、MPI がインストールされていない環境でも、並列版と同じソースプログラムを用い、逐次用にコンパイルされた並列 MD ステンシルのライブラリとリンクして実行形式を得ることが出来る。これにより、プログラムの開発やデバッグを身近な逐次計算機で行ない、大規模な系に対するプロダクション・ランを遠隔地の並列計算機で実行するというような使い方が可能である。

2.2 Image Generator

Image Generator は MD ステンシルによって出力されたスナップショットファイルを入力とし、視点や画角、原子を表す球の大きさ、色などを指定して、画像を生成する。この画像生成には NEC の流体解析用実時間可視化システム RVSLIB に、球表示のモジュールを追加、修正して用いた。この RVSLIB は大規模な解析の途中結果を可視化するために、解析するプログラムから直接呼び出すライブラリとして開発されたものである。しかし、ここではスナップショットファイルを読み込んで可視化画像を出力する単独のプログラムとして実装している。こうすることで、シミュレーション計算と可視化が分離でき、それぞれ別の計算機で実行が可能となり、ウェブポータルから独立に制御できるようになった。

3. ポータルサイトの構築

第 2 章で述べた二つのコンポーネントを Grid PSE Builder を用いて密接に連係させ、並列分子動力学ポ-

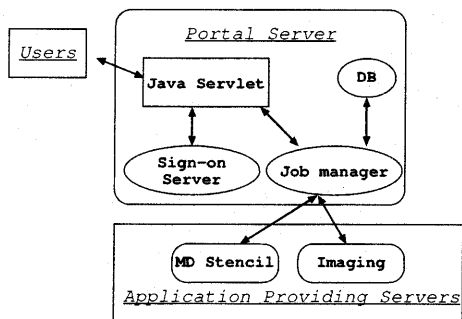


図 1 Grid PSE Builder を用いたポータルサイトの概要

ポータルサイトの構築を行った。Grid PSE Builder によって構築される Grid PSE は全ての操作をウェブを介して行うことが可能であり、PSE 利用者の利便性が確立されている。また、コンポーネントの登録が容易に行うことが出来るよう設計されており、PSE 提供者が高度なウェブ技術を駆使する必要がない。以下に、Grid PSE Builder によって提供されている機能、PSE 構築の方法並びに今回構築した並列分子動力学ポータルサイトの構成について述べる。

3.1 Grid PSE Builder

Grid PSE Builder¹⁾ は、グリッド環境における汎用 PSE 構築ツールである。その構築フレームワークは以下の要求仕様に基づいている。

- セキュリティに十分配慮する。
- PSE 使用者の操作にウェブインターフェースを用いることでユーザの利便性を高くする。
- PSE 構築者にウェブプログラミング等に関する高度な専門知識を要求しない。
- PSE コンポーネント間の入出力依存関係を記述するためのワークフロー記述メカニズムを提供する。

図 1 に Grid PSE Builder を用いたポータルサイトの構成図を示す。中心に位置する Portal Server は Grid PSE Builder が提供する機能を実現するためのモジュール群であり、ポータルサーバにアクセスする PSE 利用者であるユーザと、左右に PSE 使用者とアプリケーションプロバイダである CPU 資源が配置されている。コンポーネント提供者は、アプリケーションとウェブ画面を結合するインターフェース部を XML ベースの簡易言語 (以下、コンポーネント XML) により記述することができ、Grid PSE のコンポーネントの追加をすることが出来る。コンポーネント XML (図 2) ではアプリケーションプログラムへのパラメータ群をどのような形式でウェブページから入力させるかを指定するだけでウェブアクセス可能にすることが出来る。コンポーネント XML 中の argspec タグで実行されるコンポーネントのコマンドラインを記述する。% ではさまれた部分は args タグに連動

```
<application>
  <appname>date</appname>
  <appid>16</appid>
  <appcomment>
    Parallel Molecular Dynamics Stencil
  </appcomment>
  <argspec>/usr/users/naotaka/pmds/mdStencil.pl
    %options% %optionB% %optionE% %optionG%
    %option_m% %optionO% %optionP% %optionQ%
    ... other options here ....
</argspec>
```

```
<arglist>
  <args use="required">
    <title>Input Data</title>
    <file name="InputFile" max="1" />
  </args>
  <args use="option" option="-F">
    <title>Parameter File</title>
    <file name="optionF" max="1" />
  </args>
  <args use="required" option="-c">
    <title>Source File(main)</title>
    <file name="SourceFile" max="1" />
  </args>
  <args use="required" option="-n">
    <title>Number of Nodes</title>
    <text name="nprocs" size="3"
      maxlength="3" value="16">
    <constraint>
      <type value="integer" />
      <minInclusive value="2" />
      <maxInclusive value="160" />
    </constraint>
  </text>
</args>
  ... other options here ....
```

図 2 ジョブ投入用コンポーネント XML の一部。冒頭の引数リストの一部と引数処理の大部分を省略している。実際には、可能な引数全てをコンポーネント XML に記述している。

したコマンド引数である。また、アプリケーションの中でソースのコンパイルなど事前処理が必要な場合には、shell や perl スクリプトなどを用いてコンポーネント XML とは別に処理を記述する。コンポーネントのデータベースへの登録も登録用コマンドインターフェースが提供されておりそれらのコマンドを用いることでデータベースに直接アクセスする必要もない。

Grid PSE を用いた実行は、サインオンフェーズ、コンポーネント選択画面および、パラメータ入力フェーズ、ジョブサブミットの順に処理される。ジョブをサ

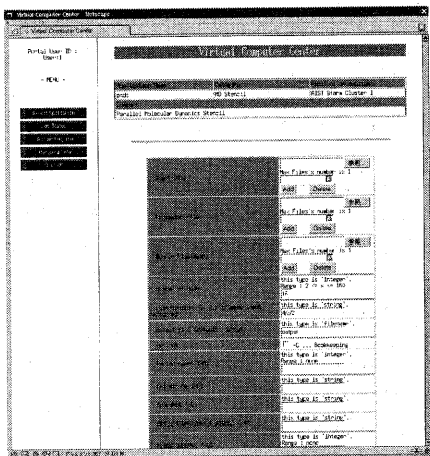


図 3 ポータルサーバのジョブ投入画面

ブミットした後はジョブステータス画面で実行状況を知ることが出来る。サインオンフェーズでは、ユーザのウェブブラウザにあらかじめ登録したクライアントデジタル ID 証明書の DN (Distinguished Name) を元にユーザ DB を検索しユーザが特定される。続いて、ユーザにパスワードを要求しパスワードが合致した場合は Single-sign-on / session manager に情報が送信されポータルサイトにログインする。Single-sign-on / session manager はセッションの制限時間管理なども行う。一般的なウェブアプリケーションでは cookie を用いてセッション管理を行う場合が多いが、Grid PSE Builder では cookie の脆弱性による情報の漏洩を防ぐためサーバ側でセッション管理を行っている。

ユーザはコンポーネント選択画面を経てパラメータ入力フェーズ (図 3) へと移行する。パラメータ入力フェーズではあらかじめ作成されているコンポーネント XML ファイルを元にパラメータ入力画面を PSE 使用者に提示する。パラメータは文字列や、数値のみならず、クライアントブラウザが動作するコンピュータ上のローカルディスクのファイルを指定することも可能である。入力ファイルを選択した場合、ウェブサーバへファイルが自動的に転送される。

必要なパラメータ入力が終了した後、PSE 使用者がサブミットボタンをクリックすることでジョブサブミットフェーズへ遷移する。ジョブのサブミットが正常に終了した場合、ユニークなジョブ ID が振られユーザに通知される。表示されたジョブ ID を元にユーザはジョブの結果の表示やダウンロード、もしくはジョブのキャンセルを行うことが出来る。コンポーネントの実行は job manager によって行われ、この時点でユーザの手から離れた状態 (バックグラウンドジョブ) となり、ユーザはポータルサイトからログアウトする

ことも出来る。投入したジョブはジョブステータス画面で閲覧可能となっており、

見ることが出来る。ユーザは当該ジョブのジョブ ID を選択することでジョブ結果画面が表示される。ジョブ結果画面では標準出力、標準エラー出力がテキストで表示され、各々の結果ファイルへのハイパーリンク及びダウンロードボタンが表示される。

3.2 MD ステンシルポータルサイト構成

並列分子動力学ポータルサイトは、MD ステンシルを用いた計算を実行するコンポーネントと、結果の可視化を行なうコンポーネントの二つで構成される。MD ステンシル計算用の計算資源は AIST Gfarm Cluster I を使用した。AIST Gfarm Cluster I は Grid Datafarm の参照実装である Gfarm のために構築されているクラスタであり MPI 準拠の実行ノード自動選択が可能である。一方、可視化を行なう計算資源は理化学研究所 ITBL サーバ群の一つを使用した。

MD ステンシル計算用コンポーネント XML は、MD ステンシルが従来持っているオプションのすべてをサポートする形で記述した (図 2)。20 個の引数すべてがブラウザのフォームとして提供される (図 3)。同時に、main 関数を含むソースファイルを引数として受け取り、コンパイルおよび実行を連続して行なう perl スクリプトを作成しユーザの作業が円滑に進むよう工夫した。

結果の画像化を行なうためのコンポーネントは MD ステンシル実行用コンポーネントとは全く独立に作成した。図 4 はジョブ実行画面であり、リストボックスから対象とするジョブ ID を選択し、スナップショットのファイル名を決定するルールを入力すればスナップショットデータから画像を作成する。ジョブの実行が終了していなかった場合、途中まで作成されているスナップショットデータのみを対象として画像の作成を行なう。単体のコンポーネントとして画像作成アプリケーションが実行されるため、実行終了後、結果表示ボタンをクリックすることで自動生成された HTML ファイルを閲覧することができる。この HTML ファイルではスナップショット画像を JavaScript を用いた動画化を行なうようにしており、ユーザは実行途中の状況を動画としてとらえることができる。コマンドラインで操作しているのとは異なりウェブブラウザからの操作が行なわれているため、画像表示は容易に行なうことができる。

図 5 は MD ステンシルポータルサイトの構成図である。中心に位置するポータルサーバが Grid PSE Builder によって構築された core module 群であり、ウェブサーバなどのサーバプログラムが稼働している。このサーバはつくば WAN⁵⁾上に配置した。また、ポータルサーバはつくば WAN のサービスの一つであるストレージ網に配置された 1TB の NAS 装置を NFS マウントしている。計算に使用する AIST Gfarm

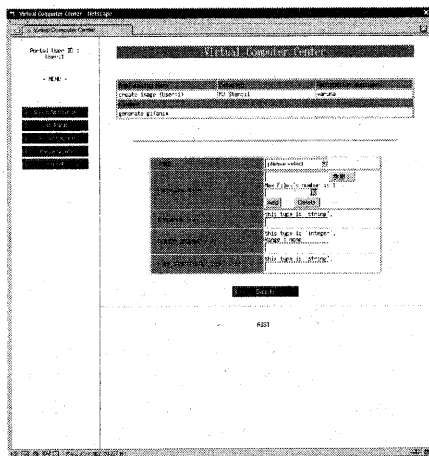


図 4 画像作成コンポーネントのジョブ投入画面

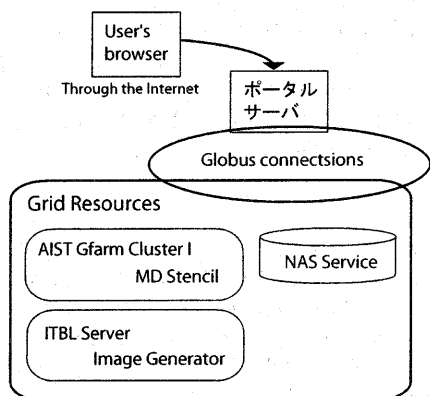


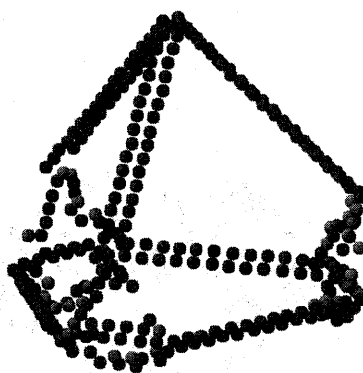
図 5 並列分子動力学ポータルサイトの構成

Cluster I もポータルサーバと同じくつくば WAN 上に配置されポータルサーバとの間はギガビットイーサネットにて接続されている。可視化サーバである ITBL サーバは理化学研究所和光本所に配置されている。これらのサーバ群はグリッド環境下に配置され、個々のリソースにアクセスすることができる。また、Grid PSE Builder によってこれらの構成を PSE 利用者から隠蔽するため、PSE 利用者はポータルサイトの内部構成を意識することなく計算および可視化コンポーネントを実行することができる。

4. ポータルサイト利用例

金属材料は中性子などの照射により硬化を引き起こすことが知られている。金属結晶の塑性変形は、線欠陥である転位の運動によって説明される。金属が照射を受けると、結晶中に原子空孔や格子間原子が生成され、これらが集合して六角形や三角形のクラスタを形成し、フランクループと呼ばれる動かない転位となる。動かない転位は運動をしている転位に対する障害物となり得ることから、金属における照射硬化現象のメカニズムの解明に向け、フランクループの拡張による構造化過程に関するシミュレーションを MD ステンシルポータルサイトを通じて実施した。

図 6 原子埋込み法 (EAM) ポテンシャルを用いた場合の可視化結果。



銅の完全な結晶 (面心立方格子) に六角形クラスタ状に原子空孔を初期配置し、原子間の相互作用を記述するポテンシャルとして原子埋込み法 (EAM) ポテンシャルを用いた分子動力学法により系の緩和過程を観察した。図 6 に緩和後の系の可視化画像を示す。ここでは、各原子について結合半径内の原子の数 (配位数) が完全結晶の値である 12 のものを不可視とすることにより結晶内の転位構造を可視化を行なった。積層欠陥四面体と呼ばれる構造に似た構造が見られている。

図 7 はレナード・ジョーンズ (LJ) ポテンシャルを用いた結果であり、フランクループの拡張による構造化過程が原子間ポテンシャルの違いに敏感であることが分った。

本ウェブアプリケーションでは、実行の引数として系のモデルを記述するプログラムを渡すため、様々なモデルの計算を行うことが出来る。加えて、結果の可視化をユーザの PC 上にあるウェブブラウザで容易に見ることができるため、2 つ以上の計算結果の比較を容易に行うことが出来る。

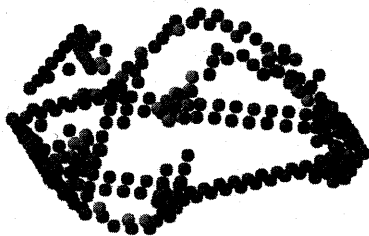


図 7 レナード・ジョーンズ (LJ) ポテンシャルを用いた場合の可視化結果。

5. 考 察

本研究では、グリッド環境における汎用 PSE 構築ツール Grid PSE Builder を用いて、MD ステンシルポータルサイトの構築を行なった。ジョブの投入には、すべてのオプションをサポートし、計算途中結果のスナップショットを画像化しポータルから途中経過を確認することができるようになった。Grid PSE Builder を用いてポータル化することによりいくつかのメリットが確認できた。(1) ソースのコンパイルから実行までを一つの単位として容易に実行することができる。(2) ジョブ単位で独立に結果が保存されるためファイルを分類しなくて良い。(3) 途中経過を画像化して確認することができる。(4) ウェブブラウザを用いてポータルサイトにアクセスするため場所によらずどこからでもジョブの投入、結果の閲覧ができる。これらはいずれも研究フェーズに於いて作業効率を向上させる大きな要因と成り得るものである。

一方で、本研究における MD ステンシルポータルサイトの構築に際して 2 点の問題点があった。ひとつは、Grid PSE Builder ではアプリケーションの途中経過モニタ用のプラグインが用意されていないことに起因するである。もう一つは、可視化コンポーネントによって生成された HTML ファイルを表示する方法である。途中経過モニタ用のプラグインが実装されていないため、今回の可視化コンポーネントの設計は、Grid PSE Builder により構築される core module の構成に強く依存した形で行わざるを得なかった。ジョブが実行されている一時ディレクトリへのアクセスや、実行が終了した結果スプールへのアクセスをコンポーネントの中で明示的に指定する以外の方法がなく、可

搬性に欠けたコンポーネントとなっている。可視化結果表示部分に関しては、HTML ファイル内の画像ファイルに対して認証を行うことが出来なかった点が問題である。今回の場合はポータルサーバへアクセスすることが出来るユーザは非常に限られているため問題は無いと言えるがユーザが多いサイトの場合、すべてのファイルアクセスは認証付で行われなければならない。

6. まとめと今後の課題

Grid PSE Builder を用いて MD ステンシルポータルサイトの構築を行った。これにより、ポータルを通じてジョブを実行することで作業効率向上し、研究効率向上の可能性が確認できた。しかしながら、途中経過監視用のプラグインの必要性や、HTML に埋め込まれた画像へのアクセス方法など、Grid PSE Builder に不足していると思われる機能も明らかとなった。これらは、改良点として今後検討したい。

今後は、ポータルサイトの影に隠れているグリッド環境を拡充し、より大規模な計算を実行することができる環境を構築することを考えている。並列実行に際しては今回は Gfarm の実装の一部であるノードスケジューラを用いたのみであるが分散 I/O を利用することにより実行効率の向上を計りたい。また、遠隔のクラスタ通信を考慮した Grid MPI を用いることで大規模計算環境の構築を行う予定である。

謝辞

ポータルサイト構築にあたり、常にアドバイスをいただいた Grid PSE Builder 開発チームの方々に感謝いたします。NAS 装置の利用に関して大変お世話になったつくば WAN NOC チームの江口尚氏に感謝いたします。なお、本研究は原子力クロスオーバー研究「高密度マルチスケール計算技術の研究」の一環として行われたものである。

参 考 文 献

- 1) 平野 基孝, 山本 直孝, 田中 良夫, 伊藤 智, 関口 智嗣: Grid PSE Builder: グリッドにおける汎用 PSE 構築ツールの開発, HPC, Vol. 95, pp. 77-82 (2003).
- 2) 首藤 一幸, 武宮博, 平野基孝, 田中良夫, 関口 智嗣: 気象予報グリッドポータルの開発, HPC, Vol. 93(-29), pp. 167-172 (2003)
- 3) <http://www.gtrc.aist.go.jp/jp/project/appli/ap006.html>
- 4) 清水 大志, 君塚 肇, 蕪木 英雄, 荒川忠一: 並列分子動力学ステンシルの開発, 計算工学会論文集, Vol. 4, pp. 225-230 (2002).
<http://stencil.koma.jaeri.go.jp/>
- 5) <http://tsukuba-wan.mexttci.go.jp/>