

# 1

## サイエンスグリッドの動向

■ 三浦 謙一 国立情報学研究所

### サイエンスグリッドとは

ここ10年ほど、「グリッドコンピューティング」とか「グリッド技術」という言葉がよく聞かれるようになった。さらに最近はe-サイエンスという言葉も聞かれるようになった。グリッドコンピューティングは広い範囲をカバーする概念であるが、本稿では科学技術系のグリッドを指すサイエンスグリッドに話題を絞って解説を行う。

グリッドコンピューティング(以下グリッドと省略)の語源は今日ではよく知られているように、電力供給ネットワーク(Electrical Power Grid)のアナロジーからきている(図-1)。すなわち、あたかも壁のコンセントに電化製品のプラグを差し込めば電気がどこで発電されたか、どんな経路で送電されてきたかを気にすることなくサービスを享受できるように、グリッドによる計算環境とは利用者がネットワーク上に展開されているサーバ・ストレージ・データベース・アプリケーションといった広義のコンピュータ資源に対して、それらの所在を意識せず

とも必要な作業を行えるような環境をめざすものである。

ここで従来の分散並列処理との違いについて触れておくが、複数のコンピュータを利用して計算処理を高速化するという観点からは、グリッドは従来から言われている分散並列処理の延長にある技術といえよう。しかし従来の技術と異なる点はグリッドが「動的な仮想組織」を前提としていることである。「仮想組織」(Virtual Organization)とは利用者・計算機資源・実験装置等を動的に集めてあたかも1つのシステムとして見せる技術である。その実現のためには認証や認可などのセキュリティ機能や、動的で柔軟な資源の配分・データの共有連携といったさまざまなソフトウェアの機能が必要となる。

グリッドの例として世界中の数百万台の空いたパソコンをインターネットでつなぎ、宇宙から受信された電波を解析して宇宙人(ET)の存在を探索しようという、“SETI@HOME”というプロジェクトがよく引き合いに出されるが、これはグリッドの本来の姿をかならずしも伝えていない極端な例であることを注意したい。グリッドと区別する意味でこのような考え方を

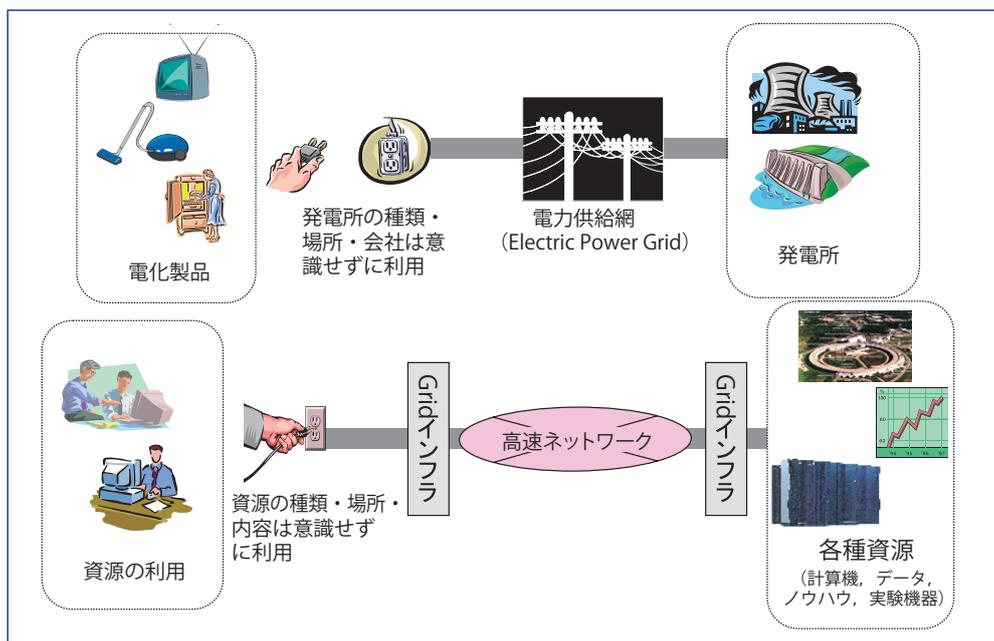


図-1 グリッドのコンセプト



出典: <http://www.teragrid.org/about/sites.html>

図-2 テラグリッド参加機関(米国 NSF)<sup>2)</sup>

“Megacomputing” と呼ぶ研究者もいる。

## サイエンスグリッドの現状

サイエンスグリッドは主に米国で研究機関や大学が中心となり、アプリケーション指向・エンドユーザ指向で計算資源を共有する研究としてスタートした。90年代後半になり、IEEE Computer Society と ACM 共催の Supercomputing Conference などにおいて CASA gigabit testbed<sup>1)</sup>、I-way<sup>1)</sup>、GUST<sup>1)</sup> といったプロジェクトのデモなどを通してさらに広まってきた。

一方では単に計算機の演算能力だけではなく、世界的に見ても数の少ない特殊で高価な実験装置(粒子加速器, 放射光設備, 超高電圧電子顕微鏡)・観測装置(巨大光学/電波望遠鏡)から創り出される膨大な量のデータへのアクセス, あるいは国際協力といった観点からデータの共有化を目的とした「データグリッド」に対する要請が近年になり高まってきている。データの規模は数ペタバイト(Peta Byte:10<sup>15</sup>バイト)にも及ぶ分野もあり, 最近では Data-intensive Computing といった用語も使われ始めているが, これらについてはさらに例を引いて解説する。

### ■ 米国のサイエンスグリッド

現在米国においては National Science Foundation (NSF) がグリッドの最も強力な推進機関であり, Teragrid が運用されている(図-2)。これは2001年から段階的に規模を拡大しており, 現時点では NSF 傘下のスーパーコンピュータセンターを中心に以下の11カ所のスーパーコンピュータセンターや大学で構成されている。その計算資源のトータルは1ペタフロップス(Petaflop/s:1秒間に10<sup>15</sup>回の浮動小数点演算)を超え, ストレージは30ペタバイトを超える。ネットワークイ

ンフラとしてはシカゴーロサンゼルス間の40 Gbpsの基幹ネットワークを中心として, 各拠点と10 Gbps以上のネットワークで接続されている。

- カリフォルニア州立大学サンディエゴ校(SDSC)
- イリノイ大学(NCSA)
- ピッツバーグスーパーコンピュータセンター(PSC:カーネギーメロン大学, ピッツバーグ大学)
- テキサス大学オースティン校(TACC)
- テネシー大学ノックスビル校(NICS)
- ルイジアナ州立大学(LONI)
- インディアナ大学(IU)
- パデュー大学(PU)
- オークリッジ国立研究所(ORNL)
- シカゴ大学(UC) / アルゴンヌ国立研究所(ANL)
- 国立大気研究センター(NCAR)

現在 NSF は2010年をめどに Teragrid の拡張である Extreme Digital (XD) プロジェクトを公募中であり, Teragrid は新しいフェーズを迎えようとしている。

### ■ ヨーロッパのサイエンスグリッド

一方ヨーロッパにおいては, これまでも EU 全体および各国がグリッドに力を入れてきている。代表的なものとして EGEE (EU), DEISA (EU), UK e-Science (英国), D-Grid (ドイツ), NorduGrid (スカンジナビア諸国)などが運用されている。ネットワークインフラとしては EU の予算による GEANT と各国の National Research and Educational Network (NREN) を併用している。以下に代表的なサイエンスグリッドについて述べる。

#### EGEE (European Grid for E-science)

EGEE は2004年以来 CERN (欧州原子核研究機構 スイス) を中心として構築されてきたグリッドで, 55カ

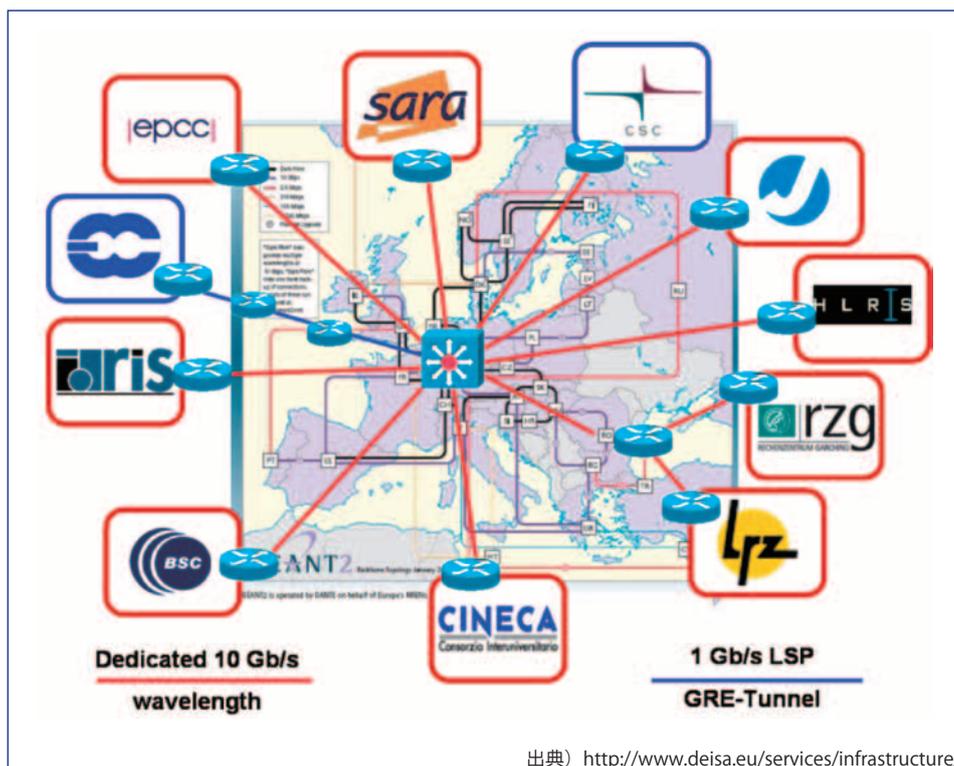


図-3 DEISA (EU) の参加機関<sup>3)</sup>

国, 260 拠点を結ぶ最大の規模のものである。計算資源はそのうちの約 140 拠点が 150,000CPU コア以上を提供しておりストレージの総容量は 28 ペタバイトであるという(2009 年 10 月現在)。グリッドミドルウェアは独自に開発した gLite と呼ばれるものである。なお EGEE は 2009 年より, EU が新たに設立した EGI (European Grid Initiative) と呼ばれるヨーロッパのグリッドインフラの運用機関に属している。

### DEISA (Distributed European Infrastructure for Supercomputing Applications)

DEISA は EU のいくつかの国が運用するスーパーコンピュータセンターからなるコンソーシアムで, 2002 年にスタートした。具体的には以下の 11 の機関が有する異機種のアーキテクチャからなる, 2 ペタフロップス以上の計算資源がグリッド接続されている(図-3)。

- マックスプランク研究所(ドイツ)
- LRZ(ライプニッツ・スーパーコンピュータセンター: ドイツ)
- バルセロナスーパーコンピュータセンター (スペイン)
- CINECA (イタリア)
- CSC 計算センター (フィンランド)
- ECMWF (欧州中期気象予報センター: イギリス)
- ユーリッヒ研究センター (ドイツ)
- IDRIS (フランス)

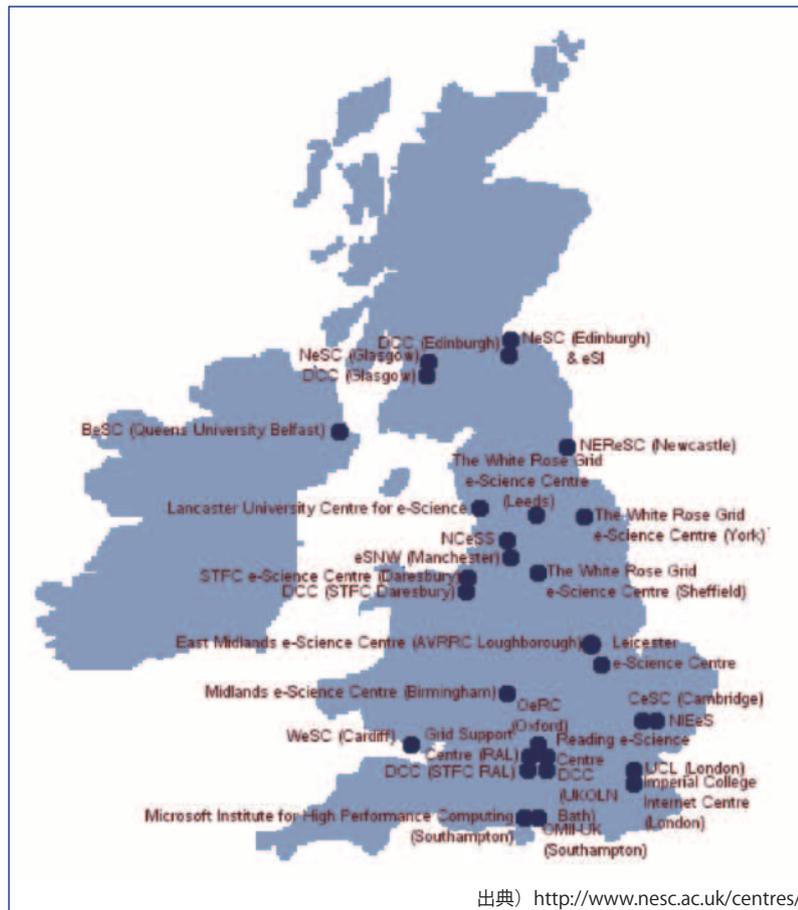
- SARA (オランダ)
- EPCC (エジンバラ並列計算センター: イギリス)
- HLRS (シュツットガルトスーパーコンピュータセンター (HLRS: ドイツ))

なお 2009 年に EU がペタフロップス級のスーパーコンピュータによる HPC 計算環境を提供する目的で, PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe) という計画をスタートしたため, 現在では DEISA はその一環として位置付けられている。

### UK e-Science Grid

イギリスでは 2001 年以来, 「e-Science」という言葉を標榜してグリッドによる計算研究環境を構築してきたが, 本稿でも触れるように今では e-サイエンスは一般化した用語として使われている。現在イギリスのほとんどの大学, 研究機関が e-Science Grid で接続されているが, その中で e-Science Center として主要な拠点としては以下があげられる(図-4)。

- National e-Science Centre (エジンバラ・グラスゴー)
- NGS (National Grid Service)
- OMII-UK (Open Middleware Infrastructure Institute)
- Oxford e-Research Centre (オックスフォード)
- Cambridge e-Science Centre (ケンブリッジ)
- Imperial College Internet Centre (ロンドン)
- UCL Research Computing (ロンドン)



出典) <http://www.nesc.ac.uk/centres/>

図-4 UK e-Science の参加機関<sup>4)</sup>

このうち NGS はグリッドのサポートセンターであり、OMII はグリッドミドルウェアの統合・配布機関である。

## ■ 日本のサイエンスグリッド関連プロジェクト

日本は欧米より後発ではあるが、2000 年代初頭より産・学・官連携によるいくつかのサイエンスグリッドのプロジェクトが文部科学省の下で実施されて、研究開発が促進されるようになってきた。具体的には ITBL 計画 (2001 ~ 2006)、NAREGI 計画 (2003 ~ 2008)、BioGrid 計画 (2001 ~ 2006)、VizGrid (2002 ~ 2007) 計画などがあげられる。また経済産業省では産業技術総合研究所 (AIST) において早い時期からグリッド研究が行われてきている。現在基盤グリッドとして最も大規模な NAREGI 計画については本特集の「グリッドを実現するグリッドミドルウェア基盤」において詳説する。

## サイエンスグリッドの利用形態

次にサイエンスグリッドとして、どのような利用形態が考えられるかについて述べる。

### ■ Distributed Supercomputing (Metacomputing)

サイエンスグリッド環境を利用して、単一の巨大なジ

ョブを実行する、あるいはマルチスケール・マルチフィジクスと呼ばれる、異なった物理モデルを結合してシミュレーションを行う連成計算 (Coupled Simulation) を実行することで、より高速にあるいはより大規模な問題が計算できるようになると考えられる。ただし、もとのプログラムがすでに分散メモリ型コンピュータシステム用に並列化がなされていても、グリッド環境においては最適な計算量とデータ転送量とのバランスがもとのシステムとは大きく異なるため (CPU の処理能力、メモリのサイズ、ネットワークの遅延 (Latency) とデータ転送容量等の差異による)、高性能を達成するためにはチューニングやコードの再構成が必要となることが多く、アプリケーションプログラムによってはグリッド環境においては性能が出ない可能性もあると考えられている。一方、連成計算においては個々の計算モジュールがすでにコンピュータのアーキテクチャに適合性よく開発されているものを結合させて解く場合には、異機種間の接続をしたサイエンスグリッド環境における分散・並列計算が効率よく実行できるものと期待される。またワークフロー処理と呼ばれる、前処理・本計算・後処理・可視化などの一連の処理をサイエンスグリッドで接続された分散リソース上で順次実行する手法もこの分類に入ると考えられる。

### ■ High-throughput Computing

パラメータサーベイ、モンテカルロ計算のように、個々のジョブは1台あるいは少数台のCPUで処理できるが、初期条件や入力データを変えた独立したジョブとして数百ケースないし数千ケース実行してそれらの結果の統計的な平均を取りたい、あるいはそれらの結果の中から最適解を探索したいという需要はサイエンスやエンジニアリング分野で非常に多く見受けられる。このような場合にはグリッド上に接続された複数の計算資源にジョブを一斉に投入して結果を集約する手法が計算時間(Wall Clock Time)の短縮に非常に効果的となる。このような目的で作られたミドルウェアの例としてはWisconsin大学で開発されたCondor-Gがある。

### ■ Data-Intensive Computing (データグリッド)

冒頭でも触れたように、単に計算機の演算能力だけではなく、世界的に見ても数の少ない特殊で高価な実験装置(粒子加速器、放射光設備、超高電圧電子顕微鏡等)から得られる実験データ、あるいは巨大光学/電波望遠鏡や地震観測装置から得られる観測データに代表される、分散した膨大な量のデータへの一元的アクセスといった観点から、データの共有化を目的としたグリッド技術に対する要請が近年になり非常に高まってきている。この場合計算よりもデータそのものが主体となるため「データグリッド」と呼ばれることが多い。高エネルギー物理学、天文学、地震工学などの分野が先行している。特に国際協力プロジェクト等においては、大規模な実験装置あるいは観測装置から得られる巨大なデータを、国をまたがって研究者間で共有化するためのグリッド技術が非常に重要になってきている。たとえば高エネルギー物理学の場合、スイス国ジュネーブ市にあるCERNで2010年運用を目指しているLarge Hadron Collider (LHC)計画では、年間数ペタバイト以上の実験データの処理と欧州・日本・米国等の共同研究機関への配信が必要であるとされている。また天文学の分野では、世界中に分散した(それもハワイ島、チリ、カナリー諸島など地理的に不便な場所に設置されている)天文台に蓄積される総データ量は年間数百テラバイトないしペタバイト級のサイズに達すると考えられている。可視光、赤外、電波など異なった波長領域での観測データを組み合わせることにより初めて解明される現象もあるため、観測データベースをグリッド技術を用いて研究者間で共有することへの関心が世界的に非常に高まってきている。この分野はデータベース天文学とか仮想天文台(Virtual observatory)と呼ばれ、米国のNVO(National Virtual Observatory)、英国のAstroGrid、日本のJVO(Japan Virtual Observatory)などが代表的である。

### ■ Collaborative Computing

サイエンスグリッドという仮想組織の中では研究者そのものもコンポーネントとなり得る。実行中の大規模シミュレーションの遠隔モニタリング・遠隔ステアリング、遠隔可視化などのように、地理的に分散した研究者間の協調・連携をはかりながら実験あるいは計算を進める場合がこれに当たる。たとえば、大阪大学に設置されている世界一の超高電圧電子顕微鏡を、米国カリフォルニア大学サンディエゴ校にあるNational Center for Microscopy and Imaging Research (NCMIR)の計算機からグリッドを介してアクセスし、遠隔でサンプルの操作を行い、得られた画像データをグリッドを用いて転送して解析した例がある。

## 最近の動向

これまでのサイエンスグリッド技術の発展をみると、研究開発フェーズから運用フェーズへと移行するにつれて、3つの方向性が顕著となっている。

#### (1) 国際標準・国際互換

これまで個別あるいは国別に進められてきたグリッドに対して国際互換性(Interoperability)の重要性が認識されてきた。Open Grid Forum (OGF)などを通じて標準化が進められてきた成果が、運用グリッドに反映されるようになったということである。これは各応用分野における研究活動の国際化に伴い必然的な動きであると考えられる。最近では、NAREGIに対しても先に触れた国際的なサイエンスグリッドプロジェクトから連携の提案が来ている状況である。たとえば昨年12月に英国オックスフォードで開催されたIEEE International Conference on e-Scienceにおいて、標準化に準拠したモジュールを用いてUK e-ScienceからDEISA, Teragrid, NAREGIへとジョブをサブミットする実証実験が成功裡に行われた。

#### (2) サイエンスグリッドのインフラ化・基盤化

グリッド技術は本来計算研究環境を提供するインフラという性格を持っているものであり、運用フェーズに入ってからインフラとしてのグリッドの有用性がますます認知されるようになってきた。欧米では、すでにグリッドによる次世代情報基盤のインフラ整備が進行している。米国においてはNSFが2004年以来Cyber Infrastructureと称して、TeragridをベースとしたITインフラの実現を推進してきている。欧州においてもEUが中心となりe-Infrastructuresと称するITインフラを重要視してきており、GEANT, EGI (EGEEを含む), PRACE (DEISAを含む)などはその重要な要素である。日本においては2005年以来、国立情報学研究所と大学等研究機関が密接に連携協力して、最先端学術情報基盤(CSI: Cyber-Science

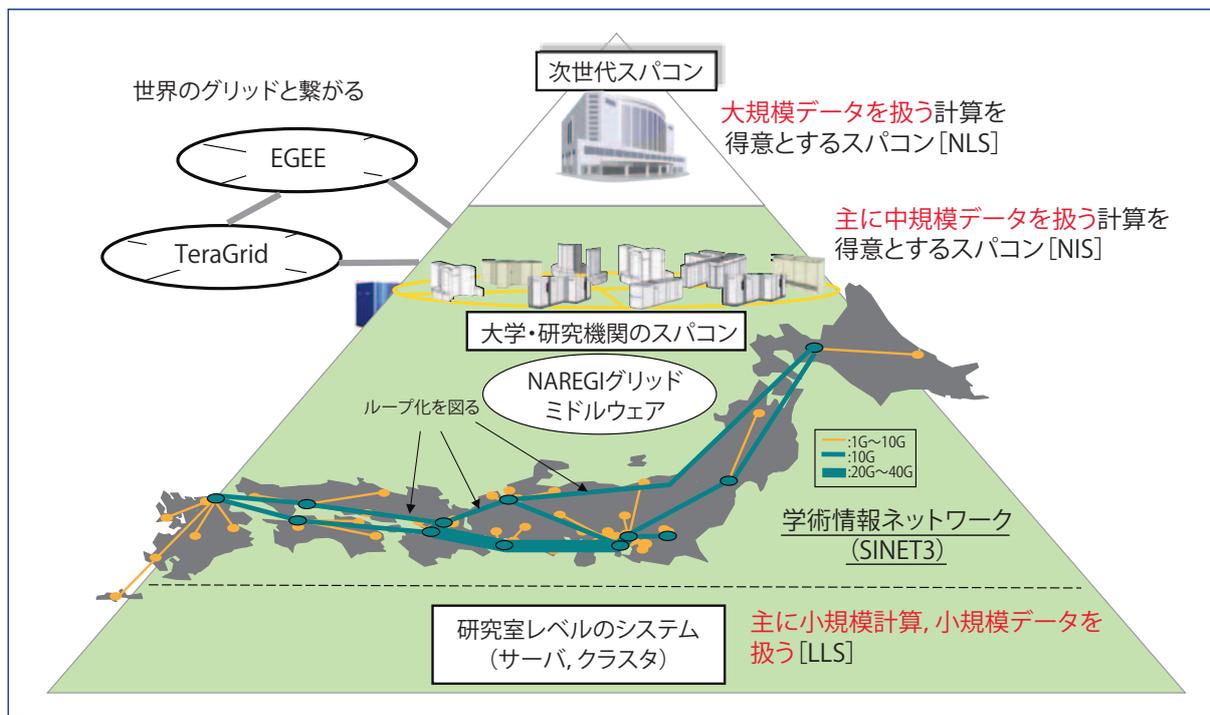


図-5 階層的かつシームレスな計算研究環境(CSI 構想の一環)<sup>5)</sup>

Infrastructure) の整備を推進してきている。CSI は学術情報ネットワーク (スーパー SINET, SINET3) を中核とし、認証・連携ソフトウェア・次世代学術コンテンツ等の上位層を統合したサービスを、学術コミュニティに対して提供しようという構想である。その中において NAREGI で開発されたグリッドミドルウェアも重要な要素となっている。

### (3) 階層的かつシームレスな計算研究環境

これは (2) とも関連する事項であるが、サイエンスグリッドが IT インフラとして地理的に分散した数多くの研究者に利用してもらうためには、計算の規模、データの規模、アプリケーションソフトウェアの成熟度に従ってローカルな計算資源から計算センターレベルの計算資源へ、そして国で最高速な計算資源へという風に段階を追って研究を進めることが可能な計算環境であるべきで、必然的に階層的な構造を持ちその間の移行がスムーズであることが必須である。図-5 は日本の場合についてその構想を示したものであるが、上位層 (NLS: National Leadership System)、中位層 (NIS: National Infrastructure Systems)、下位層 (LLS: Laboratory-Level Systems) の3階層が示されている。ここで下位層 LLS (ローカルレベル) が e-サイエンスとして研究者に一番近い環境となるので、使い勝手の良さ、柔軟さが求められることになる。この点については本特集の「e-サイエンス基盤構築のためのミドルウェア技術」において詳説する。

なお、米国の場合は TeraGrid の計算資源と下位層との連携のために Science Gateway と呼ばれるインタフェ

ースを設けている。また欧州の場合はインフラを EU レベル、国レベル、ローカルレベル(キャンパスレベル)としての3段階に位置付けているのが特徴的であり、ローカルレベル向けに種々の軽量級のグリッドミドルウェアが開発されている (たとえば Application Hosting Environment<sup>6)</sup>)。

以上サイエンスグリッドの成り立ち、現状、将来の方向性について概観したが、本章に述べたように日本としても世界的なトレンドに取り残されないように、鋭意計算研究環境を整備していくことが急務である。

#### 参考文献

- 1) Foster, I. (ed.) and Kesselman, C.: The Grid, Second Edition: Blueprint for a New Computing Infrastructure, Morgan Kaufman (2004).
- 2) TeraGrid Web Page: <http://www.teragrid.org>
- 3) DEISA Project Web Page: <http://www.deisa.eu>
- 4) UK e-Science Web Page: <http://www.e-science.clrc.ac.uk>
- 5) CSI Web Page: [http://www.nii.ac.jp/index.php?action=pages\\_view\\_main&page\\_id=570&lang=japanese](http://www.nii.ac.jp/index.php?action=pages_view_main&page_id=570&lang=japanese) (国立情報学研究所)
- 6) Coveney P. et al.: The Application Hosting Environment: Lightweight Middleware for Grid-based Computational Science, Computer Physics Communications, Vol.176, No.6 pp.406-418 (2007).

(平成 22 年 1 月 7 日受付)

#### 三浦 謙一

kenmiura@grid.nii.ac.jp

1968 年東京大学理学部物理学科卒業。1973 年米国イリノイ大学計算機学科博士課程修了 (Ph.D)。同年富士通(株)入社。2002 年より(株)富士通研究所フェロー。2003 年より国立情報学研究所教授。2008 年より国立天文台客員教授。日本工学会アカデミー会員。