

## 計算素粒子物理学分野の国際データグリッド ILDG と国内グリッド JLDG

佐藤三久 † 建部修見 † 吉江友照 †  
石井理修 † 朴泰祐 † 宇川彰 †

ILDG (International Lattice Data Grid) は、計算素粒子物理学分野の Lattice QCD 計算の計算結果である配位データを国際的に共有するためのグリッドである。共有のための活動として、XML ベースの QCDml を設計し、メタデータを共通に記述して、データを相互に利用できるようにした。ILDG は、地域のデータグリッドを連携させるグリッドであり、Web Service の技術を用いて共通のインタフェースを定義することにより、個々の地域のデータグリッドを連携できるようにした。それぞれの地域のグリッドの相互接続テストは終了し、いくつかの重要なデータがアーカイブされている。筑波大学の計算科学研究センターは日本の拠点として ILDG の開発に参加するとともに、QCD の配位データのデータベース LQA を提供/保守している。LQA は ILDG を利用するサーバーサイドクライアントとして実装されている。また、国内の Lattice QCD コミュニティのデータ共有基盤として、グローバルファイルシステム G-farm を用いて離れたサイト間で配置データやその他のデータを共有できるようにするデータグリッド JLDG を構築した。

### International Lattice Data Grid for computational particle physics and national Data Grid JLDG

MITSUHI SA TO †, OSAMU TATEBE †, TOMOTERU YOSHIE †,  
NORIYOSHI ISHII †, TAISUKE BOKU † and AKIRA UKAWA †

ILDG is an international project to develop a grid of datagrids for sharing lattice QCD configurations world-wide. To share data, an XML-based markup language, QCDml, has been designed to describe metadata for QCD data. To integrate each datagrid into a global grid, we defined the middleware interface among collaborating grids with Web Service technology. Interoperability of the regional grids has been achieved for download operations and valuable configurations have already been archived in the grid. LQA (Lattice QCD Archive) is a database of QCD configurations provided and maintained by the center for Computational Sciences (CCS) of University of Tsukuba. We have implemented LQA as a server-side client using ILDG. And we have also developed JLDG, a data-grid infrastructure for Lattice QCD (LQCD) community in Japan, which enables JLDG enables the community to share configurations and other data distributed over distant sites by using GFarm global file system.

#### 1. はじめに

ILDG(International Lattice Data Grid)<sup>2)</sup> は、計算素粒子物理学分野での Lattice QCD(Quantum Chromo-Dynamics) 計算の計算結果(配位データ)を国際的に共有するためのデータグリッドである。ILDG の目的は、計算素粒子物理学分野の研究者が過去の計算された配位データを検索し、それを取得できるようにすることである。また、複数の研究グループ間でデータを共有するためにも利用する。

その活動は 2003 年から開始されて、これまでメーリングリストによる議論の他に、年に 2 回のビデオ会議で議論されてきた。昨年の 7 月に計算素粒子物理学分野の会議 Lattice06 で、デモが行われて、データグリッドはようやく運用段階に入りつつある。ILDG は各国のローカルなデータグリッドを結び付ける枠組で、grid-of-grids を基本コンセプトとする。ILDG は、インタフェースを規定しそれぞれのローカルなグリッドを連携させる。

筑波大学計算科学研究センターでは、これまで日本の拠点として仕様の検討、開発を担当してきた。開発の一部として、この ILDG のアーキテクチャを基本に、日本国内の QCD のデータの検索サービスを行うサイト LQA (Lattice Data Archive) を開発した。

† 筑波大学 計算科学研究センター  
Center for Computational Sciences, University of Tsukuba

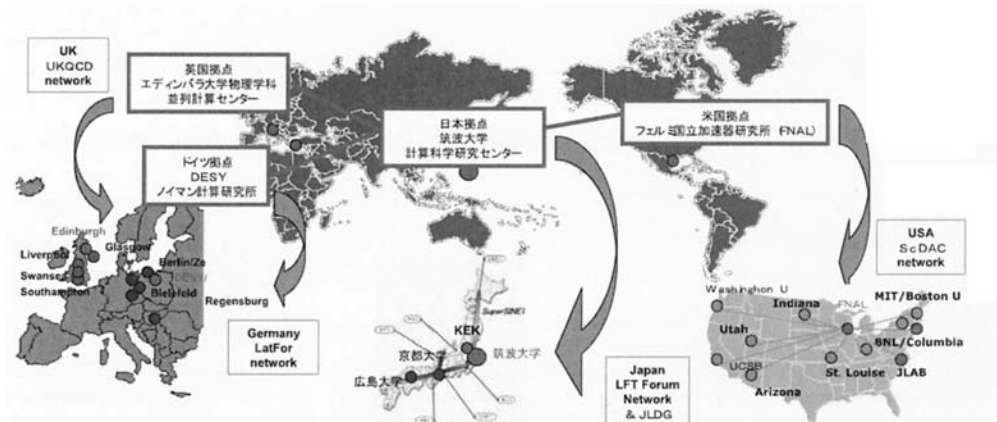


図 1 ILDG の主要拠点

また、国内のデータグリッドとして、グリッド上の共有ファイルシステム G-farm を利用したシステム JLDG (Japan Lattice Data Grid)<sup>7)</sup> を構築した。ILDG は主にデータを国際的に公開するのを主目的とするのに対して、国内では研究グループのメンバーが密にデータを共有することが目的である。PKI (public key infrastructure) X509 証明書ベースの GSI (Grid Security Infrastructure) を認証基盤とし、VOMS (Virtual Organization Membership Service) を運用し、計算素粒子物理学分野コミュニティの仮想組織をサポートしている。

ILDG/JLDG は、計算素粒子物理学分野のデータ共有のための基盤であるが、ある研究分野のコミュニティがどのようにしてデータを共有するのか、それをグリッド技術はどうサポートするのかなど、多くの示唆を含んでおり、本稿ではこの紹介を通して、データグリッドの構築のあり方について考えてみたい。

2 章では、ILDG について述べ、3 章では JLDG について述べる。4 章で他の分野への示唆、適用可能性について考察し、5 章でまとめる。

## 2. 計算素粒子物理学分野のデータグリッド ILDG

ILDG の議論は 2003 年から始まり、日本国内では、2004 年から JSPS による計算素粒子物理学分野での国際連携プロジェクト ILFTNet (International Lattice Field Theory Network) の連携基盤として開発進められてきた。その後、2006 年からは国立情報学研究所の CSI (Cyber Science Infrastructure) 構築事業の一貫として支援を受け活動している。

### 2.1 ILDG の基本的なコンセプト

ILDG の基本的なコンセプトは以下の 2 つである。

- 共有する配位データを共通にアクセスできる仕組み

みの設計/合意すること。

- それぞれの国内 (地域) のデータグリッドを連携させる仕組み (Grid-of-Grids) を設計/合意すること。

共通にアクセスする仕組みについてはアクセスする機構だけでなく、データフォーマットの統一化も含まれる。また、それぞれの地域で行われているデータグリッドを緩やかに連携できるように、ILDG では Web Service 技術を用いてそれぞれの構成要素のインタフェースのみを規定することにした。

活動を始めるにあたって、データの形式や記述を検討するメタデータ WG とデータグリッドのシステムの設計を行うミドルウェア WG が組織され、検討が進められた。日米欧の各主要な拠点が中心となり、WG が運営されている。図 1 にその主要拠点を示す。

### 2.2 メタデータの設計

メタデータ WG では、まず、共有する配位データのバイナリフォーマットの標準化から始めた。さらに、検索、共有するためには、そのデータがどのような内容であるかについての、なんらかの情報が必要である。これを記述するために XML (eXtensible Markup Language) を用いて、データの記述方法を定めることになり、QCDml という仕様としてまとめられている。QCDml には、どのような物理シミュレーションなのかを記述する ensembleXML とどのようなパラメータ (系列) のデータなのかを記述する configurationXML の 2 つがある。

データは、バイナリデータとそれに対する QCDml の記述がセットになって公開されることになる。配位データのバイナリファイルにはユニークな名前 LFN (Logical File Name) が付けられ、これが ILDG のミドルウェアにより実際のファイルにマッピングされることになる。バイナリファイルのフォーマットは、LIME 形式で統一されている。図 2 にその概略を示す。

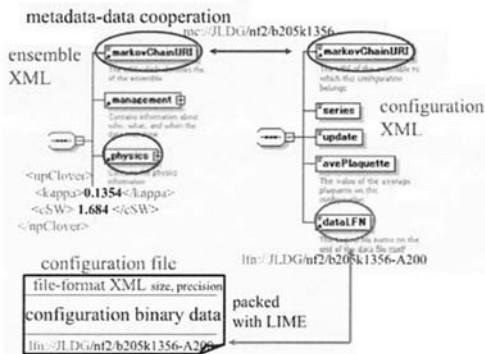


図2 QCDmlの概略

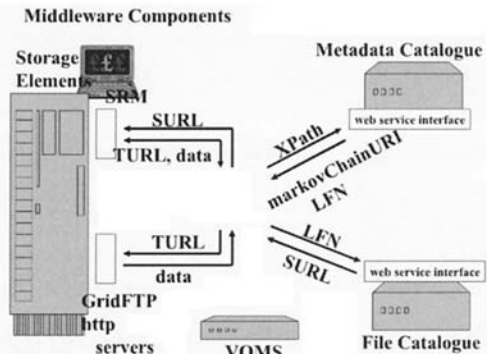


図3 ILDGのコンポーネント

このように、マシン可読な形式的な情報を記述する枠組みとしてXMLは非常に便利な要素となる。これは一つの標準化活動であり、研究コミュニティでの合意が重要となる。

### 2.3 ILDGのアーキテクチャ

ILDGのミドルウェアの開発に際して、最初に議論になったのは基本的な構成と必要なコンポーネント、それとどのように開発を進めていくかということであった。ILDGのコンポーネントは、以下のもので構成される。

- **メタデータカタログ (MDC):** データの内容をQCDmlで記述してあるメタデータを格納しているデータベース。ユーザは、このデータベースをXMLの条件式を記述するための記法であるXPathを使って検索することができる。結果として、任意のメタデータを取得することができるが、最終的には記述対象であるバイナリデータに対するLFN(logical file name)を得る。
- **リプリカカタログ (RC):** MDCで取得できるLFNはデータに対するユニークな識別名であり、実際のファイルの複製はいろいろな場所に存在してよい。これをリプリカ(複製)という。このコンポーネントにより、LFNに対するリプリカを得ることができる。リプリカは、なんらかのURL(universal resource locator)で表される。これをSURL(Site URL)と呼ぶ。例えば、httpによるURLでもよい。
- **ストレージリソースマネージャ (SRM):** サイトによっては、実際のデータはテープ上にあたり、いくつかの複数ftpホストでダウンロードできるようになっていることがある。SRMはいろいろなデバイス、複数のftpホストの管理に統一的なアクセス方法を与えるコンポーネントである。このコンポーネントはオプションであり、なくてもよい。
- **データ転送レイヤ:** 最後に転送をするためのURL、すなわちTURL(transfer URL)を得る。例えば、

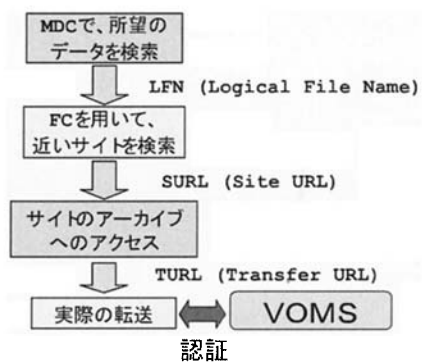


図4 ILDGの処理フロー

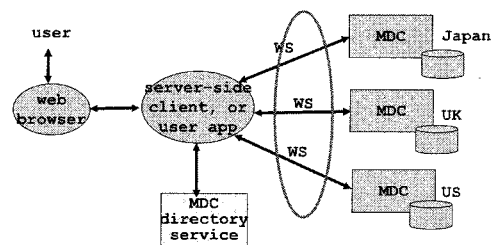


図5 MDCの連携

http, ftp, gftp などがある。このレイヤを用いて、ファイルを転送する。この時点で、認証が必要な場合にはVOMSにより管理された認証を受けることになる。

それぞれのコンポーネントの関係を図3に、処理フローを図4に示す。上記のコンポーネントに対するインタフェースは、httpプロトコルを用いてサービスを提供する仕組みであるWeb Serviceで提供されており、Web Serviceの記述仕様であるWSDLで定義されている。この仕様について、ミドルウェアWGの議論により決めた。

データグリッドに参加する拠点は、上記のコンポー

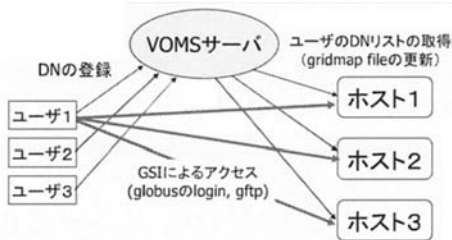


図6 VOMSの役割

ネットを自分のサイトに立ち上げ、それぞれのコンポーネントの Web Service の URL を、全体を管理している ILDG のサイトに登録する。ユーザは、まず、この ILDG サイトにアクセスし、どこにサイトがあるかを調べ (directory service)、それぞれのサイトに対して検索を行う。検索したいデータの LFN が取得できれば、後は手順に従ってファイルを得ることができる。図5に server-side client を利用した連携の構成例を示す。

開発はどこかで1箇所ですべてのものを配置するという形態をとることはやめ、ミドルウェア WG では基本的な設計と各コンポーネントのインタフェースの定義だけを行うことにした。これにより、仕様さえ満たしていれば各サイトで独自のソフトウェアを作り、参加できることになる。実際、我々が作ったコンポーネントと UK のサイトで作られたソフトはまったく独立である。このアプローチは無用な負担をそれぞれのサイトにかけることなく、公平な開発ができるようになった。ちなみに日本の地域拠点である JLDG では、tomcat 上の Web Service の実装である Axis<sup>13)</sup> と XML データベースとして、フリーの実装である eXist<sup>12)</sup> を用いて行った。

各サイトにそれぞれがアクセスする方法は、すべてのデータを登録して集中管理する方法に比べて不効率ではないかと思われるかもしれない。しかし、全世界でこのようなデータを管理する拠点は多くても十数か所であり、まずは単純な方法で始めることになった。ちなみに、現在稼動しているのは6サイトである。

#### 2.4 仮想組織 (VO) と VOMS の運用

グリッドにおいて、安全でセキュアな認証機構として一般的に用いられているのが、グリッドの基盤ソフトウェアとして最も一般的な Globus<sup>1)</sup> の GSI (Globus Security Infrastructure) である。これは、PKI (Public Key Infrastructure) 技術を用いた公開鍵ベースの X.509 準拠システムで、認証局から取得した証明書を用いて認証を行う。この機構を用いることにより、シングル・サインオンが可能になる。すなわち、システムに一度、ログインして、サインオンすれば、利用を認可されているマシン (つまり、アカウントがあるマシン) にはパスワードをいちいち入力しなくても利用できるようになる。



図7 ILDG の VOMS のページ

データグリッドを構築する場合、どの範囲のユーザにデータをアクセスを許すのかが問題になる。研究成果としてのデータの公開を行うのであれば、アクセス制限は基本的に必要がないが、共同研究者間でデータをやり取りするのであれば、データにアクセスできる範囲を制限しなくてはならない。

ILDG の場合は、Web Service で提供される MDC や RC については、原則公開とし、最終的にデータを取得するデータ転送レイヤのレベルでアクセスの制限をかけることができるようにすることにした。

アクセス制限をする場合には、ユーザが誰であるかを決める仕組み、すなわち認証と、そのユーザに対して、アクセス制限を行う仕組み、すなわち認可が必要である。ILDG においては、基本的な認証に関しては GSI を用いることにし、アクセス制限を行う転送レイヤとしては gftp を標準的に用いることになった。

さて、ここで問題なのは各サイトが ILDG のユーザを管理しなくてはならないことである。これを一元的に行う仕組みが、VOMS (virtual organization membership service)<sup>3)</sup> である。グリッドでは、ネットワーク上に作られるユーザの集まりを仮想組織 (Virtual Organization) と呼び、VOMS はこれを管理するためのデータベースである。ILDG では、VOMS のためのサーバを運用しており、ILDG に参加するユーザは自分のネットワーク上の識別情報である DN (distinct name) を登録する。GSI では各サイトにおいて、DN を用いてユーザを管理している。各サイトでは定期的に VOMS で登録されているユーザと同期して各サイトのユーザを更新する。これによって、ユーザは VOMS に登録しておけば、ILDG の各サイトにアクセスすることができるようになる。図6にその概略を示す。

VOMS にユーザ登録する場合には、ユーザが研究コミュニティのメンバーであることを確かめる必要がある。このために、ユーザは信用できる認証局の電

子証明書を提示しなくてはならないようになっている。ILDGでは、グリッドのコミュニティの信頼できる認証局連合であるIGTF (International Grid Trust Federation)<sup>5)</sup>に加入している認証局からの証明書を要請している。日本では、APGrid PMA(Asia Pacific Grid Policy Management Authority)<sup>6)</sup>で認可された認証局であるKEKとNAREGI<sup>11)</sup>のCAからの証明書を使っている。

現在、ILDGのVOはドイツのDESYで運用されているVOMSで管理されている。そのサイトのスナップショットを図7に示す。

### 2.5 ILDGを用いた検索サービスLQA

ILDGのアーキテクチャに基づいて、データ検索のためのクライアントを開発し、日本国内のデータをこれを用いたサイトLQA(Lattice QCD Archive)<sup>10)</sup>を通して提供している。

LQAはいわゆるサーバサイドクライアントであり、ユーザにとってはwebサーバ上のプログラムであるが、ILDGのWeb Serviceを用いるクライアントになっている。

機能としては、各XMLの項目選択項目について候補を示し、絞り込ながら検索できるようにしている。その検索画面を図8に示す。最終的に所望のデータ(ensemble)が見つかった場合には、配位のバイナリデータに対するダウンロードスクリプトを生成するようしており、ユーザはこれを実際にダウンロードするマシンで実行することによりデータを取得できる。このLQAは、2005年の8月から運用しており、平均して、月900データ程度となっている。

### 3. 国内のデータグリッドJLDG

ILDGは、データとそれを記述するメタデータを登録し、ユーザはそれを検索して利用することを想定したものであるが、共同研究というレベルではもっと密にファイル名を直接指定してデータを共有するための仕組みが望ましい場合がある。もちろん、ILDGの枠組みでもLFNを交換することによって、ファイルを共有することができるが、例えばファイルシステムを直接共有するようなことができれば便利である。

日本国内の計算素粒子物理学分野の研究コミュニティでは、ILDGとは別に、国内のデータグリッドJLDG(Japan Lattice Data Grid)<sup>7)</sup>を構築している。JLDGは、日本国内のILDGへの窓口であるとともに、国内のデータグリッド基盤として、産業技術総合研究所で開発された広域ネットワーク上でのファイルシステムであるGfarm<sup>8)</sup>を用いて、ファイルシステムのイメージでデータを共有するシステムの構築を行っている。そのイメージを図9に示す。

国内の計算素粒子物理学分野の研究コミュニティは、大学間のSuperSINET上にコミュニティ専用のネット



図8 LQAの検索画面の例

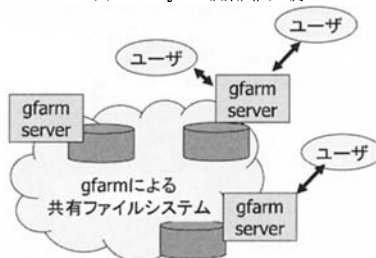


図9 JLDGの概略

ワークHEPnet/SCを持っており、このネットワーク上にGfarmにより共有ファイルシステムを構築した。認証に関しては、ILDGと同様にVOMSでユーザを管理し、定期的に各サイトのサーバのgrid mapfileを更新するようになっている。これにより、国内の各研究グループ単位でのファイルアクセス制限ができるようになっている。その構成を図10に示す。JLDGローカル認証局の運営にはNAREGIで開発されたCAツールを利用している。

現在、筑波大、KEK、京大、阪大、広島大の各サイトにサーバが置かれ、ユーザはサイト内のマシンからgftpを用いて、Gfarmで共有されたファイルシステムにアクセスできるようになっている。

### 4. 他の分野への展開・応用

ここで述べたILDGとJLDGは、計算素粒子物理学分野のデータグリッドのプロジェクトであるが、い

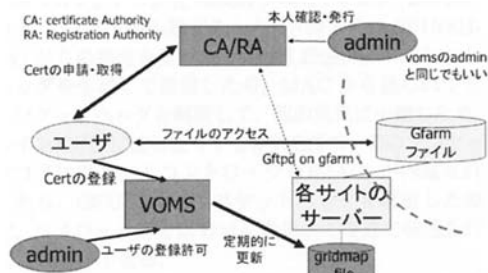


図 10 JLDG での VOMS の利用

いろいろな分野でも同じような仕組みを考えることができる。ここでは、データグリッドを構築するためのいくつかのポイントを考えてみようと思う。

まず、データを検索、あるいはアクセスするための標準化である。ILDG では、データフォーマットを統一するとともに、メタデータの XML 記述も決めた。これによって、XML の枠組みを使って検索することができるようになる。様々なフォーマットがあつて、統一できない場合には検索のクエリーレベルで統一する方法もある。例えば、天文分野のデータグリッドである International Virtual Observatory Alliance (IVOA)<sup>9)</sup> では、クエリの形式を標準化している。

次にどのような形でデータを共有したいかである。JLDG では、ILDG の別にファイルシステムレベルの共有を提供した。これは国内のユーザは共同研究を密に行う必要があり、未知のデータを検索して利用するというよりも、グループでデータをしておく場所を提供することが目的であるからである。

データのアクセスに制限する場合にはユーザ管理をする必要がある。その場合にはユーザ管理するために、研究コミュニティの仮想組織を運営しなくてはならない。

最後に、もっとも重要なことはそのデータグリッドを運営する研究コミュニティのコミットメントである。例えば、データを記述するためのメタデータの設計に関しても研究分野固有の要請があり、コミュニティの合意なくては役に立たないものになる。また、どのような形の共有が必要になるかというのも研究分野によって異なる。そして、仮想組織を組織する場合、どのようなユーザをどのように組織し、運営していくかはまさに研究コミュニティの問題になる。

## 5. おわりに

実際のグリッドの構築・運用では、単なる技術だけではなく、運用ポリシーなどの運営面の様々な課題を解決して合意していくことが重要となる。本稿では、データグリッドについて述べてきたが、いわゆる計算資源を相互に利用する計算グリッドがなかなか現実的なものになりにくいのも、技術的な問題がまだあるに

しても、計算機の相互利用に関しての運用ポリシーで問題になっていることが多いからである。データグリッドにおいても、上に述べた仮想組織を運営するのに、どのようなユーザをどう組織するのか、あるいは仮想組織の運営に使う証明書をどのようにして取得するのかなど、様々な問題がある。これまで、ILDG/JLDG の構築に当たっては長期間にわたる研究コミュニティの活動により問題を一つ一つ解決してきた。グリッドは基盤技術という点からは一段落し、実用段階にはいっているといえるのではないだろうか。

科学技術の各分野において、これからの科学技術の発展のために、国際的あるいは組織間の連携・協力、研究資源・知識の集約化・効率化が求められている。グリッドはそのためにインターネットや高速の広域ネットワークを活用するためのこれからの重要なインフラであり、それを構築するのはその分野の研究コミュニティの重要な課題となるであろう。

## 謝 辞

本研究を遂行するにあたり、ILDG および JLDG のメンバー諸氏に感謝いたします。CSI (Cyber Science Infrastructure) の構築に関し御支援頂く国立情報学研究所に感謝いたします。この研究の一部は、国立情報学研究所 CSI 委託事業「グリッド・認証技術による大規模データ計算資源の連携基盤の構築」および「e-science 研究分野の振興を支援する CSI 委託事業」の研究課題「計算素粒子物理学の高度データ共有基盤 JLDG の構築」による。

## 参考文献

- 1) globus alliance, <http://www.globus.org/>
- 2) ILDG project, <http://www.lqcd.org/ildg/>
- 3) Virtual Organization Membership Service (VOMS), <http://edg-wp2.web.cern.ch/edg-wp2/security/voms/voms.html>
- 4) International Lattice Field Theory Network Project, <http://www.ccs.tsukuba.ac.jp/projects/ILFTNet/>
- 5) International Grid Trust Federation (IGTF) <http://www.gridpma.org/>
- 6) APGrid PMA <http://www.apgridpma.org/>
- 7) JLDG project, <http://www.jldg.org/>
- 8) Gfarm File system, <http://datafarm.apgrid.org/>
- 9) International Virtual Observatory Alliance (IVOA) <http://www.ivoa.net/>
- 10) Lattice QCD Archive, <http://www.jldg.org/lqa/>
- 11) National Research Grid Initiative, <http://www.naregi.org/>
- 12) eXist Project, Open Source Native XML Database, <http://exist.sourceforge.net/>
- 13) Axis Project, <http://ws.apache.org/axis/>