

OE3-1

身近なグリッド・コンピューティング Introduction to Grid Computing

松岡聰[†]松田裕幸[†]

MATSUOKA Satoshi

MATSUDA Yuko

1. グリッドコンピューティング

計算パワーを湯水のように使いわゆる E-Science の要求が高まっている。これらは、TeraFlops 級の大規模計算およびデータ解析用の数百 Tera～Peta バイト級のストレッジのニーズがあり、分野としては高エネルギー物理、原子力、量子コンピュータ設計、量子化学、分子レベル設計、オペレーションリサーチ、など、多岐にわたる。例えば、計算化学により抗がん剤の創薬には数 TeraFlops 以上の計算能力が必要とされており、高エネルギー物理学において新世代の加速器のデータ解析にはペタバイト級のオンライン(テープではなく、ハードディスクなどの高速二次記憶装置)ストレッジが必要とされる。一方、本 GSIC センターのスパコン群は、旧来型のアプリケーションの需要には対応できるものの、新世代の E-Science のアプリケーションをサポートするには 1/100 程度の能力しかなく、新たな先進的技術による E-Science の手法とそのインフラが必要である。

この解決のために、本研究ではグリッド技術を活用して、E-Science 用の計算資源を学内にくまなく、かつ安価に確保することを目的とする。グリッドは、「ネットワーク上の計算・センサー・ストレッジ・人間などの資源を仮想化し、必要に応じて統合して莫大な規模の仮想計算環境を形成する」という次世代のネットワークインフラおよびソフトウェア技術の総称である。つまり、複数の現実世界の組織(会社、研究所、開発センター、大学など)を跨る仮想的な組織(Virtual Organization, VO、例えば産学官連係の共同研究開発の組織)がネットワーク上に存在するときに、グリッドはネットワーク上で VO 内外の何らかの「計算」や「共同作業」にまつわる資源を動的に、オンデマンドで仮想化し、統一的なイメージで扱える仮想計算機(Virtual Computer)を形成する。特に米国ではこの 2-3 年間で急速にグリッドの研究開発が進み、ネットワーク、ハード、ソフト、ストレッジ、および人的なインフラの整備が進行し、各国立研の連携研究の NSF Alliance/NPACI/TeraGrid、DOE の e-Science Grid、NASA の IPG などの国家プロジェクトに莫大な研究資金がつぎ込まれ、TeraFlops 級のグリッドインフラが構築されている。欧州では、CERN を中心に EU DataGrid プロジェクトにおいて 10Peta バイト級の加速器のデータ処理を行うための Grid の研究開発を行うのをはじめ、E-Science 実現のために Grid 計算を最重要研究開発課題の一つと位置付けている。わが国のメーカ・大学・研究所でも、近年ようやくその重要性が諸方面で認識されつつある。

2. キャンパスグリッド

キャンパスグリッドは、グリッド技術を用いて、一箇所には集中しきれない計算ノードなどの仮想計算機の資源をキャンパス内に配置し、あるいは学内の各組織が資源を提供する枠組みを提供し、それらの組織間をまたがる大規模な仮想計算機環境を形成し、e-Science に供するものである。本センターでは、キャンパスグリッドをセンターに集中配置した高価なスパコン群に置き換わる可能性のある将来 e-Science 用の学内計算インフラの有望な候補と位置付けている。本プロジェクト TitechGrid の目的は、キャンパスグリッドの有用性・妥当性や技術的な問題点を、実際のキャンパス内での実 e-Science アプリケーションを用いたその実験運用を行うことにより明らかにするものであり、その結果や経験を今後のさらなる大規模なキャンパス内および複数のキャンパスをまたがるグリッドインフラへの礎とし、かつグリッドのユーザベースを拡大する。グリッドによる計算およびストレッジのサービスをキャンパス内、あるいはキャンパス連携に提供することによって、本センターはさらにわが国の HPC および旧来のスパコン中心の「計算機センター」からのパラダイムシフトのリーダー役を果たすことを目標とし、わが国のグリッドインフラの構築、国際的なグリッドインフラへの貢献、ひいては学内の新たな E-Science への挑戦を可能とし、他の大学や国立研究所、ひいては産業に対して大きなインパクトを与える。

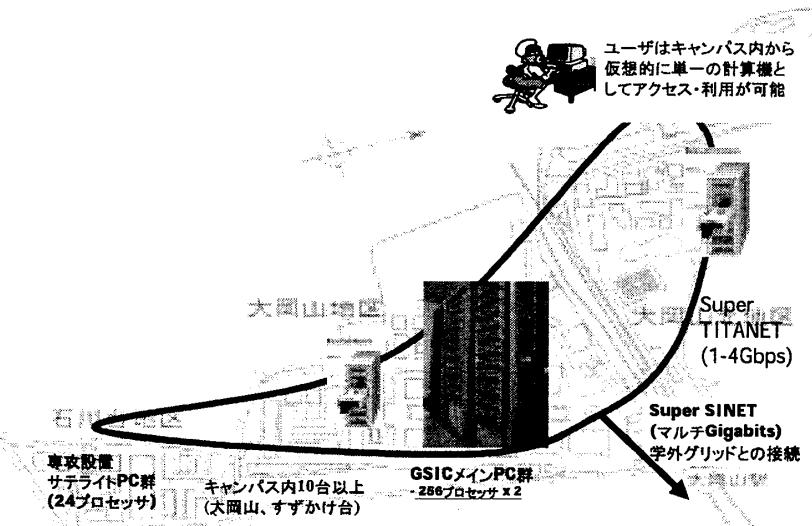
[†] 東京工業大学学術国際情報センター、GSIC

3. キャンパスグリッドの現状と将来像

TitechGrid の中心となる設備は、コモディティ PC 技術で実現する PC サーバ計算ノード群である。それぞれのノード群を GSIC センターと、学内から公募から選択された 12 以上の専攻・研究所などの個々の学内組織に配布・設置し、それを平成 12 年度の補正予算で実現したギガビット級の新キャンパスネットワークインフラである Super Titanet で接続し、物理的なグリッドの計算およびストレッジのインフラとする。さらにこれらを Globus, Ninf, Condor といった、グリッドのミドルウェアで仮想的に結合して、キャンパス内大規模計算環境を作り出す。鍵となるのは、集中型のスパコンを現状から増強するのではなく、それぞれの専攻は無料でフォアグラウンドでは占有できる計算&ストレッジのリソースを分散して保持し、かつ本 GSIC センターが(現状で行っている電子メールと同じような)統一的なグリッドサービスを実験的な行うことである。これによって、個々の専攻は PC クラスタ等の計算機管理の人的コストの高い維持費、セキュリティの問題などから開放される。さらにグリッド技術を用いてコモディティ部品で構成される安価な PC サーバ群を仮想並列計算機として扱うことにより 1.2TeraFLOPS/25GigaByte にものぼる E-Science 用の計算環境が従来の数十分の 1 のコストで実現される。これは世界最大規模のキャンパス計算環境といつても過言ではない。

平成 13 年（2001 年度）末に Grid サーバ群が学内複数専攻・研究所に設置された後、平成 14 年度前半はグリッドのインフラとして機能するソフトウェアの立ち上げが主で、後半は参加専攻がスムーズにアプリケーションが実行できるような管理・運用体制を築く。そして、平成 15 年度には学内の任意のユーザがグリッドユーザとして自由に登録し、使える体制を築くことを目指し、その時点で本格運用が可能な更なる資源の拡充「東工大/筑波大スーパーキャンパスグリッド連合」が実現されることを目指す。特に、東工大/筑波大スーパーキャンパスグリッド連合は、キャンパスグリッド間の連合をナショナルインフラとして SuperSINET を用いて確立するプロジェクトであり、キャンパスインフラのさらなる大幅な拡充、GOC (グリッドオペレーションズセンター) の創立とメーカの人的参画、グリッドによるペタバイトのデータ処理可能なデータグリッドインフラの実際の構築、ハイエンドや特殊ハードウェアのグリッドへの取り込み、などを技術的な目玉として、TitechGrid の 50 倍の計算およびストレッジの規模を目指すものである。また、一部の計算資源は外部にも提供可能であり、国際共同研究などで莫大な計算資源を有する分野で貢献していく予定である。

別の観点として、TitechGrid 上では既存の超並列機(SGI Origin2000)で動作する並列アプリケーションは容易にかつ効率良く動作するが、ベクトル機(NEC SX-5)で動作するような、単一の CPU 上でベクトルチューニングされた逐次のアプリケーションが効率良く動作しないという問題がある。特に、それらのアプリケーションは例えば研究室内で何年にもわたり改良されてきて、並列化は困難であることが多い、しかも場合によっては PC のプロセッサの 32 ビットのメモリ空間をはるかに越えたメモリ要領を要求したりする。しかしながら今後もベクトル型スーパーコンピュータをグリッド環境においても使い続けることは、コスト高になるのみならず、もともとそれらが高速なネットワークコンピューティングに適したハードウェアやソフトウェア基盤を有していないため、余り好ましい状況ではない。そこで、IBM のハイエンドの最新の 64-bit プロセッサである Power4 プロフェッサを東工大キャンパスグリッドの新たなリソースとして導入し、ベクトルアプリケーションのグリッド環境へ移行実験も併せて行う予定である。



合算800以上の高性能プロセッサ、25TeraByteストレッジの学内グリッドの構築