

# 日本原子力研究開発機構システム計算科学センターにおける グリッド・コンピューティング技術の研究開発

## Research & Development of grid computing technology in center for computational science and e-systems of Japan Atomic Energy Agency

独立行政法人日本原子力研究開発機構  
システム計算科学センター 高度計算機技術開発室  
鈴木 喜雄

独立行政法人日本原子力研究開発機構システム計算科学センターでは、シミュレーションを行っている研究者へ複数のコンピュータを効果的・効率的に利用できる環境を提供する技術の研究開発を平成7年より開始した。時期を同じくして、そのような技術の代名詞としてグリッド・コンピューティングというキーワードが使われ始めるようになり、現在では、コンピュータ資源の利用のみならず、研究機関に跨ったアプリケーションプログラムやデータの共有化、ネットワークを介した実験施設の利用など、計算資源やネットワーク利用に関連する非常に幅広い技術に対してこのキーワードが利用されている。本稿では当センターで実施してきたグリッド・コンピューティング技術に関連する研究開発として、平成7年度より12年度まで実施したSTA (Seamless Thinking Aid)、平成13年度より平成17年度まで国家プロジェクトとして実施し、プロジェクト終了後も継続運用しているITBL (Information Technology Based Laboratory)、平成18年度より開始された国家プロジェクト「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」の中で実施しているグリッドミドル利活用研究、原子力分野のためのグリッド基盤の研究開発AEGIS (Atomic Energy Grid InfraStructure) について述べる。

### 1 はじめに

独立行政法人日本原子力研究開発機構（以下、原子力機構と略す）は、原子力研究開発を総合的・一体的に実施する先端的な研究開発機関として、科学技術の水準の向上を図り、原子力の利用の高度化及び多様化の推進に貢献する役割を担っている。システム計算科学センターは、計算科学の観点から、これら貢献に資する研究開発を実施している。このため、高度計算科学技術の推進に必要な基盤技術の研究開発および原子力分野におけるシミュレーション技術の研究開発を推進している。また、原子力機構の保有しているスーパーコンピュータやその他の各種コンピュータなどの計算・情報システムを運用すること

により、研究者・技術者への最適な計算機・情報機器環境の提供を行っている。

「計算科学」とは、数学的モデルとその数値的解法を構築し、計算機を駆使して科学技術上の問題を解決する学問分野である。近年のコンピュータの飛躍的な性能向上により、「計算科学」は、様々な科学分野において「理論」や「実験」と並び、その地位を確立してきた。原子力分野においても、計算科学が重要な役割を果たしてきていることは言うまでもない。

このような計算科学の重要性が高まっている中で、グリッド・コンピューティング<sup>[1]</sup>と呼ばれる新しい技術が、計算科学分野において研究開発のターゲットとなってきた。グリッド・コンピューティングは、一般的には、

「インターネットなどの広域ネットワーク上にあるコンピュータ資源を共用化し、ひとつの複合したコンピュータシステムとしてサービスを提供する仕組みである」と説明される。そのような仕組みにより期待される代表的な効果として、1台のコンピュータでは処理しきれないような計算が可能となることが挙げられる。また、コンピュータ資源の共有化のみならず、アプリケーションプログラムやデータの共有化、ネットワークを介した実験施設の利用などを可能とする仕組みに対してもグリッド・コンピューティングというキーワードが利用されている。

本稿では、今日に至るまで当センターで取り組んできたグリッド・コンピューティングに関連する主な研究開発について紹介する。

## 2 当センターにおけるグリッド・コンピューティングに関連する研究開発

グリッド・コンピューティングに関連する研究開発として、大きく4つの研究開発を実施してきた。一つは、平成7年度から12年度までの間実施したSTA (Seamless Thinking Aid)<sup>[2]</sup>、もう一つは、平成13年度から17年度まで国家プロジェクトとして実施し、現在も運用を行っているITBL (Information Technology Based Laboratory)<sup>[3]</sup>、三つ目は、平成18年度より開始された国家プロジェクト「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」の中で実施しているグリッドミドル利活用研究、四つ目は、平成17年度より原子力機構における中期計画の一つとして開始した原子力分野のためのグリッド基盤AEGIS (Atomic Energy Grid InfraStructure)<sup>[4]</sup>である。

### 2.1. STA (Seamless Thinking Aid)

STAの研究開発では、研究者の「途切れない思考を支援する」ため、イントラネット内に分散した異なる種類の複数の計算機を単一

計算機のように利用可能とし、シミュレーションプログラムの開発から実行、結果解析に至る一連の作業の円滑化を可能とする環境構築を目指した。このため、以下の要素技術を研究開発し、目的とする環境を実現した。

#### (1) 通信基盤

異機種分散環境上に構築された各種ツール間あるいは利用者プログラム間の通信を支援する2種類の通信機能を開発した。一つは、分散処理を支援する遠隔関数呼び出し型の通信ライブラリSTARPC (STA Remote Procedure Call)、もう一つは並列処理を支援するメッセージパッシング型の通信ライブラリSTAMPI (STA Message Passing Interface)である。

#### (2) プログラム開発環境

異機種分散環境で並列計算プログラムの開発を支援するため、計算機に依存しない操作感でプログラム開発を可能とするエディタ、コンパイラ、デバッガを開発した。

#### (3) 並列分散科学技術計算実行環境

異機種分散環境での並列計算プログラム実行を支援するため、プログラム実行におけるプログラム間のデータ依存関係や実行制御関係を視覚的に操作できるワークフローツールTME (Task Mapping Editor)を開発した。

STAの成果として、複数のコードを連成して計算した場合のスループットの向上が認められた。一例として、流体・構造連成計算コードにおいて、流体計算部分をベクトル計算機で、構造計算部分をスカラ並列計算機で実行することにより、単一計算機で全ての計算を行った場合より30~70%の処理時間短縮が実証された。また、2000年に米国で開催された世界最大級の計算科学分野の国際会議SC2000において、日米欧の5地点に分散した510個のCPUを用いた解析シミュレーション

ンとその実時間可視化の実演に貢献した。STAは、計算基盤として当時の日本原子力研究所が所有する9台の大型計算機へ導入されるとともに、国内外の7研究機関に対して提供された。

## 2.2. ITBL (Information Technology Based Laboratory)

### 2.2.1 ITBLプロジェクト

ITBLは、インターネット上に散在する計算資源、知識、ノウハウなどをネットワーク上で共用化することにより、複雑で高度なシミュレーション、遠隔地との共同研究を容易に行えるいわゆる仮想研究環境を構築することを目的に実施されたe-Japan重点計画に位置付けられた国家プロジェクトである。ITBLは、6つの研究機関（物質・材料研究機構、防災科学技術研究所、宇宙航空研究開発機構（当時、航空宇宙技術研究所）、理化学研究所、科学技術振興機構（当時、科学技術振興事業団）、日本原子力研究開発機構（当時、日本原子力研究所）により立ち上げられ、これら6機関が中心となって推進した。

ITBLでは、地理的に独立した研究機関や組織をサイトと呼ぶこととし、これらのサイト同士を有機的に接続することにより、仮想研究環境を形成した。サイトは、ITBLのサービスを提供するサーバ群（ITBLサーバ群）と仮想研究環境の資源となる計算機群により構成される。利用者は、インターネット上の端末から、セキュアな通信経路を経由して、仮想研究環境の資源を利用することができる。

当センターは、ITBLの仮想研究環境を実現するためのコアとなるミドルウェア（ITBL基盤ソフトウェア）の研究開発を実施した。ITBL基盤ソフトウェアの開発では、STAの技術をベースとした。STAで開発した通信基盤や認証機能を強化することによりインターネット環境に対応するとともに、ファイル操

作、可視化機能、コミュニティ機能など、仮想研究環境実現に必要なサービスを追加することにより $\alpha$ 版を完成させた。一方で、平成15年度からは世界標準を目指した超高速コンピュータ網形成プロジェクト（NAREGI: NAtional REsearch Grid Initiative）<sup>[5]</sup>が開始されたため、ITBL基盤ソフトウェアの2次開発（ $\beta$ 版開発）は中止され、その技術はNAREGIプロジェクトに移管され、ITBLプロジェクトでは $\alpha$ 版による実証運用を行うこととなった。実証運用では、仮想研究環境の拡大と利用普及に努めることにより、ITBLプロジェクトの最終年度である平成17年度末には、13サイト、27台のスーパーコンピュータが共用化され、これら資源の理論性能の総量は57TFLOPSに達した。利用登録者数も、大学、研究機関、企業など90機関から約600名が参加するまでに拡大した。これら利用者のため、プロジェクト終了後も現在に至るまでITBL基盤ソフトウェアの運用・維持活動を継続している。

### 2.2.2 ITBL-UNICORE連携

ITBLでは、国内にとどまらず、国外の研究機関との連携も実施した。平成16年度に独国の研究機関であるシュツットガルト大学の高性能計算センター（High Performance Computing Center in Stuttgart: HLRS）が運用するUNICOREとITBLの連携システムの開発を行うことで、HLRSが有するスーパーコンピュータの共用環境を実現している。

UNICORE (UNiform Interface to COmputing REsources)<sup>[6]</sup>は、独国の国家プロジェクト（UNICOREプロジェクト、UNICORE Plusプロジェクト）で開発されたグリッドミドルウェアである。その後、EUのEUROGRIDプロジェクト<sup>[7]</sup>やGRIPプロジェクト<sup>[8]</sup>、さらにはUniGridsプロジェクト<sup>[9]</sup>において改良が進められた。UNICOREの目的は、研究機関のイントラ内に設置された計算

機を、インターネット上のパソコンからファイアウォール越しに利用することである。特徴としては、1) 特定ポートを利用したSSL (Secure Socket Layer) 通信、2) Javaによるミドルウェアの実装、3) X.509形式の電子証明書による認証およびシングルサインオン、4) 複雑な処理を記述できるワークフロー機能、などが挙げられる。

原子力機構では、平成11年度からHLRSと共同研究を締結し、国際間におけるハードウェアあるいはソフトウェア資源の共用化技術の研究を進めてきた。その中で、両機関がそれぞれ運用するグリッドミドルウェアであるITBL基盤ソフトウェアとUNICOREの相互接続の実現を目指して、平成16年度にITBL-UNICORE連携システムの開発<sup>[10]</sup>を開始した。このシステムでは、ITBL基盤ソフトウェアとUNICORE間で相互にジョブ投入できることを目的とした。ここで、ITBL基盤ソフトウェアのGUI(Graphical User Interface)で定義したジョブリクエストをUNICOREの計算機で実行できる、あるいはUNICOREクライアントで定義したジョブリクエストをITBL環境の計算機で実行できる機能を開発した。本開発により、平成17年度には、ITBL基盤ソフトウェアのGUIで定義したジョブリクエストを、HLRSの保有するスーパーコンピュータで実行させることに成功した。また、HLRSの発行する電子証明書をセットしたUNICOREクライアントから、ITBL環境の計算機でジョブ実行させることに成功した。

## (1) 操作イメージ

### 1) ITBLからUNICOREへの接続

ITBL基盤ソフトウェアからUNICOREへのジョブリクエストの操作は、TMEを用いて入出力ファイルやプログラム(あるいはツール)をアイコンとして関連付けることで行える。利用者は、UNICOREサイトの固有情報を設定する必要があるが、ITBL基盤ソ

フトウェアでジョブのワークフローを定義するときとほぼ同等な操作で、UNICOREに対してジョブリクエストを投入することができる。

### 2) UNICOREからITBLへの接続

UNICOREクライアントの操作では、ITBLサイトはUNICOREサイトの1つであることを示すUsiteとして表示される。つまり、利用者は、ITBLへのジョブ投入を、通常のUNICOREへのジョブ投入と同様の手順で、定義、実行することができる。

## (2) システム構成

ITBL-UNICORE連携システムでは、ITBL基盤ソフトウェアとUNICOREの機能の違いを吸収するため、連携サーバを導入した。ITBL基盤ソフトウェアもUNICOREも運用システムであるため、両者のミドルウェアに手を加えない(あるいは運用を止めない)ことが重要な要件であった。連携サーバを導入するというアイデアを考案することで、本要件を満たしつつ連携システムを実現することに成功した。

## 2.3. 最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用におけるグリッド利活用技術の研究開発

平成18年度に開始された国家プロジェクト「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」に参画し、次世代スーパーコンピュータを頂点とする次世代ナショナルグリッドインフラ整備を実施している。ここでは、ITBL環境の運用経験に基づき、次世代ナショナルグリッドインフラ整備に必要な基盤技術開発を牽引するとともに、ITBL環境のアプリケーションなどの資産を、次世代ナショナルグリッドインフラへ円滑に継承可能とし、グリッドアプリケーションの創生の醸成を可能とする技術基盤を構築することを目的としている。このため、1) アプリケー

ションがグリッド技術の進歩を容易に享受でき、簡便にグリッドミドルウェアの機能を活用できるようにするためのアプリケーションプログラミングインターフェース(API)の研究開発、2) 次世代ナショナルグリッドインフラへの移行や、異なる複数のグリッドミドルウェアを円滑に活用できるようにするための利用技術の研究開発を推進している。

このため、これまでITBLとNAREGIにおいて共通的に利用可能なAPIを実現するとともに、ITBL環境からNAREGI環境へのジョブ投入やファイル操作が可能なシステムを実現している。

## 2.4 AEGIS(Atomic Energy Grid Infra Structure)

原子力分野に求められる計算科学基盤の構築に向け、平成17年10月より原子力機構の中期計画の下、原子力グリッド基盤AEGISの研究開発を実施している。これまでのSTAやITBLにおけるミドルウェア技術開発や実証運用の知見を活かし、原子力分野に必要な計算科学基盤とはどのようなものであるかということ原子力分野の研究者の視点から捉え直し、より利便性の高いグリッド環境の構築を目指している。これまで蓄積した知見から、(1)サービスの高速性、安定性の追及、(2)サービス形態の柔軟性の追求、(3)資源の共有化技術の高度化などを重要な要件とした。そこで、STAおよびITBLプロジェクトにおいて開発してきたSTARPCを発展させた通信基盤STARPC+を、AEGISの通信基盤の一つとして開発してきた。STARPC+については、2.4.1で紹介する。また、サービスの一つとして研究開発してきた可視化技術PST(Parallel Support Toolkit)について2.4.2で紹介する。

原子力研究と計算科学研究の発展のため、AEGISの国際展開を進めている。現在、仏国、独国、米国の原子力関係機関および計算科学関係機関と共同研究を締結している。仏

国では、原子力庁(CEA)、欧州科学計算研究訓練センター(CERFACS)、並列情報学研究所(LIP)、国立情報処理・自動化研究所(INRIA)、ツールーズ情報処理研究所(IRIT)、ボルドー情報処理研究所(LaBRI)、独国では、シュツットガルト大学高性能計算センター(HLRS)、フラウンホーファー研究所アルゴリズム科学計算研究所(SCAI)、ドレスデン工科大学(DUT)、米国では、オークリッジ国立研究所(ORNL)、エネルギー省(DOE)、カリフォルニア工科大学(CALTEC)である。この中で、ITBL-UNICORE連携で実現したような、それぞれの研究機関が運用するグリッド同士の連携技術の開発も進めている。

### 2.4.1 STARPC+

STARPC+は、STAおよびITBLの通信基盤として研究開発してきたSTARPCを発展させたものである。STARPCは、STAの通信基盤として開発され、ITBLプロジェクトにおいて、ITBLの仮想研究環境を構成する4種類の構成要素、すなわち、フロントサーバ、中継サーバ、実行計算機、利用者端末間の通信を司る通信基盤として拡張された。STARPCを使う全てのプログラムはツールと呼ばれ、ITBLで提供されるサービス機能もまたツールとして実装されている。STARPCは、RPC(Remote Procedure Call)通信とストリーム通信の2通りの通信を提供している。これらの通信を介して、あるツールが他のツールを起動する(ツール連携)ことが可能で、ツール連携により複雑なサービス機能の構築が可能である。また、STARPCは、インターネット上を流れる通信をHTTPS(HyperText Transfer Protocol Security)でカプセル化することができ、ファイアウォールとの共存およびセキュアな通信路の確保というグローバルなグリッドに求められる要件を満たしている。このように、STARPCは、ITBLの全てのサービスの基点となる重要な

要素技術と言える。

STARPC+の開発にあたっては、特にサービスの高速性、安定性の追及を目指した。また、STARPCからの改善として、導入やサービス構築の容易さを実現することにも注意を払った。従来のSTARPCとの相違は、主に以下の点である。

- ▶ 競合回避やエラー処理を正確に行うため、拠点制御サブレットと呼ばれるセッション管理機能を強化した。
- ▶ さまざまな資源への接続応答待ちが、操作画面のハングアップを引き起こさないよう、タイムアウト機構を積極的に導入した。
- ▶ 保守・改良を容易にするため、プログラム規模を小さくした。
- ▶ インストールや運用の手間(バージョンアップ等)を減らすため、フリーソフトの利用を少なくした。
- ▶ ツールの追加・更新・削除を容易に行えるようにした。
- ▶ インストールを簡易に行えるようにした。

AEGISの研究開発の一環として実施したSTARPC+を利用したシステム構築の事例として核融合研究における遠隔実験を紹介する。

核融合研究のように国際協力もとで大規模な実験装置を利用することが必要な分野では、インターネット越しに、安全に遠隔実験を行う必要がある。例えば、国際熱核融合実験炉ITER計画では実験施設がフランスに建設され、他の関連施設が各国に配置されるため、インターネットを介してこれら施設間を安全に連携することが望まれる。このような要望への先駆けとして、原子力機構では、臨界プラズマ試験装置(JT-60)の遠隔実験を行うシステムを開発<sup>[4,11,12]</sup>し、その実証実験として、京都大学(京都府京都市)から、原子力機構那珂核融合研究所(茨城県那珂市)にあるJT-60を使った遠隔実験を実施した。このシステムでは、遠隔地のパソコン等から遠

隔実験用のサーバへアクセスし、作成した実験条件を転送する。その際、個人認証や通信データの暗号化などにより、実験条件の改ざんや制御システムへの不正侵入を防止するなど、高度なセキュリティーを実現している。このシステムにおいて、京都大学のパソコンから原子力機構の遠隔実験サーバまでの通信路として、STARPC+が利用されている。原子力機構のファイアウォールの内側に置かれたSTARPC+のサーバが、京大に設置されたパソコンからの要求を受け、セキュアな通信路を確立し、実験条件のデータを遠隔実験サーバへ転送している。

#### 2.4.2 PST

グリッド・コンピューティング環境を用いて行われるシミュレーション研究を効率的に行う一つの要件として、出力される結果を高速に可視化することが挙げられる。そこで、グリッド・コンピューティング環境で実行されるシミュレーションから得られるデータを効率的に可視化するための可視化システムとして、PSTの研究開発を行ってきた<sup>[13]</sup>。ここで、STAおよびITBLで開発してきたSTAMPIを用いることで、グリッド・コンピューティング環境の複数の計算機を用いて分散並列に可視化処理を行うことが可能となり、ファイル転送作業削減によるユーザ負荷の軽減、グリッド環境での可視化処理の高速化等を実現した。

##### 1) データ転送作業の削減

通常、可視化を実行する場合、計算機から可視化サーバに対してファイル転送作業が必要であるが、STAMPIを用いた分散並列化により、ユーザー自身がデータ転送作業を行わずに可視化処理が可能となった。データが大規模になればなるほどファイル転送作業に対して、利用者に負荷がかかる。本開発により、利用者の転送作業に対する負担が削減されることが期待できる。

## 2) データ管理の煩雑さの削減

データ転送を行う場合、複数の計算機上にあるデータを集約するなど、データのコピーや移動が発生し、データ管理が煩雑になることが懸念される。本システムの開発により、利用者がデータ転送を行う必要がないため、可視化処理のために余分に発生するデータ管理の煩雑さを削減することが期待できる。

## 3) データ集約の高速化

可視化処理を行った後のデータ（現状はポリゴンデータ）を集約することが可能となり、もとのデータよりも小さくなったデータを転送できるため、全体の処理の高速化が可能となった。

PSTは、現在当センターにおいて、原子力施設の耐震性評価を目的に研究開発が実施されている三次元仮想振動台<sup>[14]</sup>での可視化に利用されている。また、原子力機構における他の大規模シミュレーション研究の可視化にも利用されている。さらに、PSTの技術の一部は、商用の可視化ソフトウェアAVS/Expressと連携し、製品化されている。

## 3 まとめ

1990年代の後半にグリッド・コンピューティングというキーワードが使われ始め、2000年代に入ると、グリッド・コンピューティングの概念が脚光を浴びようになり、本格的な研究開発が行われるようになった。近年では、本稿で紹介したのと同様に、実践的な研究開発への適用が進められている。先に述べたとおり、当センターでは、平成7年度よりグリッド・コンピューティングに関連する研究開発を実施し、平成18年度より原子力グリッド基盤AEGISの研究開発を新たに開始し、グリッド・コンピューティングの応用技術の研究開発を加速させている。今後、原子力分野の計算科学による研究開発をさらに発展させ、原子力分野の研究開発に貢献していく。

## 謝 辞

本稿において、2.2で紹介したITBLプロジェクトは、国家プロジェクトとして実施されたものです。また、2.3に記載したグリッド利活用技術の研究開発は、国家プロジェクト「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」において実施されているものです。両研究開発を実施するにあたり、文部科学省ならびに連携機関の関係者の皆様には多大なるご支援を賜わり、深く感謝いたします。

## 参考文献

- [1] Foster, I. and C. Kesselman, "Globus: A metacomputing infrastructure toolkit", *International Journal of Supercomputing Applications*, Vol.11, No.2(1997) pp.115-128.
- [2] 武宮博、今村俊幸、小出洋、並列分散科学技術計算を支援するソフトウェア・システム (STA) の構築、情報処理、Vol.40, No.11(1999) pp.1104-1109.
- [3] 山口勇吉他、仮想研究環境ITBL基盤ソフトウェアの開発、日本数値流体力学会誌(解説)、Vol.9, No.3(2001) pp.83-88.
- [4] Suzuki Y., Nakajima K., Kushida N., Kino C., Aoyagi T., Nakajima N., Iba K., Hayashi N., Ozeki T., Totsuka T., Nakanishi H., Nagayama Y., "Research and Development of Fusion Grid Infrastructure Based on Atomic Energy Grid Infrastructure (AEGIS)", *Sixth IAEA Technical Meeting on Control, Data Acquisition, and Remote Participation for Fusion Research* (4-8 June 2007, Inuyama, Japan), to be published in *Fusion Engineering and Design*.
- [5] NAREGI Project, [http://www.naregi.org/index\\_e.html](http://www.naregi.org/index_e.html)

- [6] UNICORE FORUM,  
<http://www.unicore.org/>
- [7] EUROGRID PROJECT,  
<http://www.eurogrid.org/>
- [8] GRID INTEROPERABILITY,  
<http://www.grid-interoperability.org/>
- [9] UNIGRID PROJECT,  
<http://www.unigrids.org/>
- [10] Suzuki Y., Minami T., Tani M., Nakajima N., Keller R. and Beisel T., "Interoperability between UNICORE and ITBL", Proceedings of WCGC' 2006 (Workshop on Computational Grids and Clusters) (Rio De Janeiro, Brazil, July 10-14, 2006) CDROM.
- [11] Iba K, Ozeki T, Totsuka T, Zsuzuki Y, Oshima T, Sakaba S, Sato M, Suzuki M, Hamamatsu K and Kiyono K., "Development and verification of remote research environment based on Fusion research grid", Sixth IAEA Technical Meeting on Control, Data Acquisition, and Remote Participation for Fusion Research (4-8 June 2007, Inuyama, Japan), to be published in Fusion Engineering and Design.
- [12] Totsuka T, Suzuki Y, Sakata S, Oshima T, Iba K., "Development of the Advanced JT-60 Man-Machine Interfacing System for Remote Experiments", Sixth IAEA Technical Meeting on Control, Data Acquisition, and Remote Participation for Fusion Research (4-8 June 2007, Inuyama, Japan), to be published in Fusion Engineering and Design.
- [13] 鈴木喜雄、グリッド環境の大規模可視化システム、第56回理論応用力学講演会論文集 (2007) pp.33-34.
- [14] 西田明美、松原仁、田栄、羽間収、鈴木喜雄、新谷文将、中島憲宏、谷正之、近藤誠、原子力プラントのための3次元仮想振動台の構築—組立構造解析法による巨大施設解析システムの提案—、日本原子力学会和文論文誌、Vol.6, No.3 (2007) pp.376-382.