

NAREGIミドルウェアの利用環境

2008年9月26日

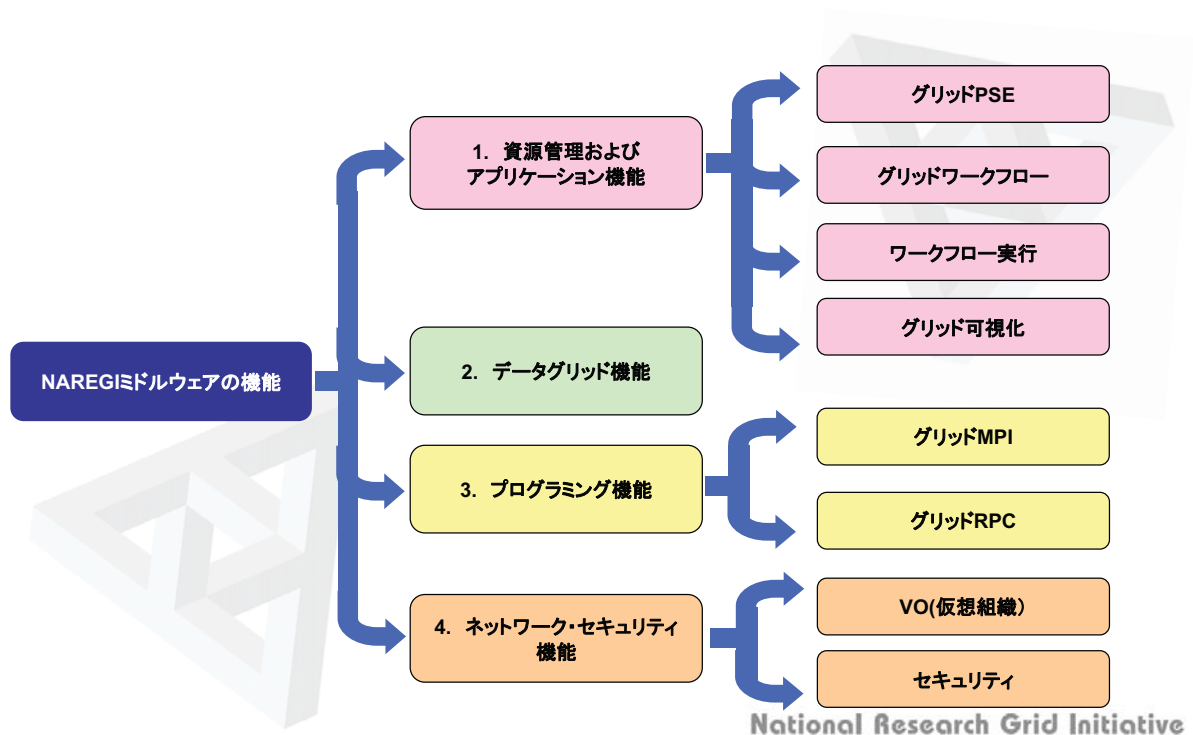
国立情報学研究所

リサーチグリッド研究開発センター

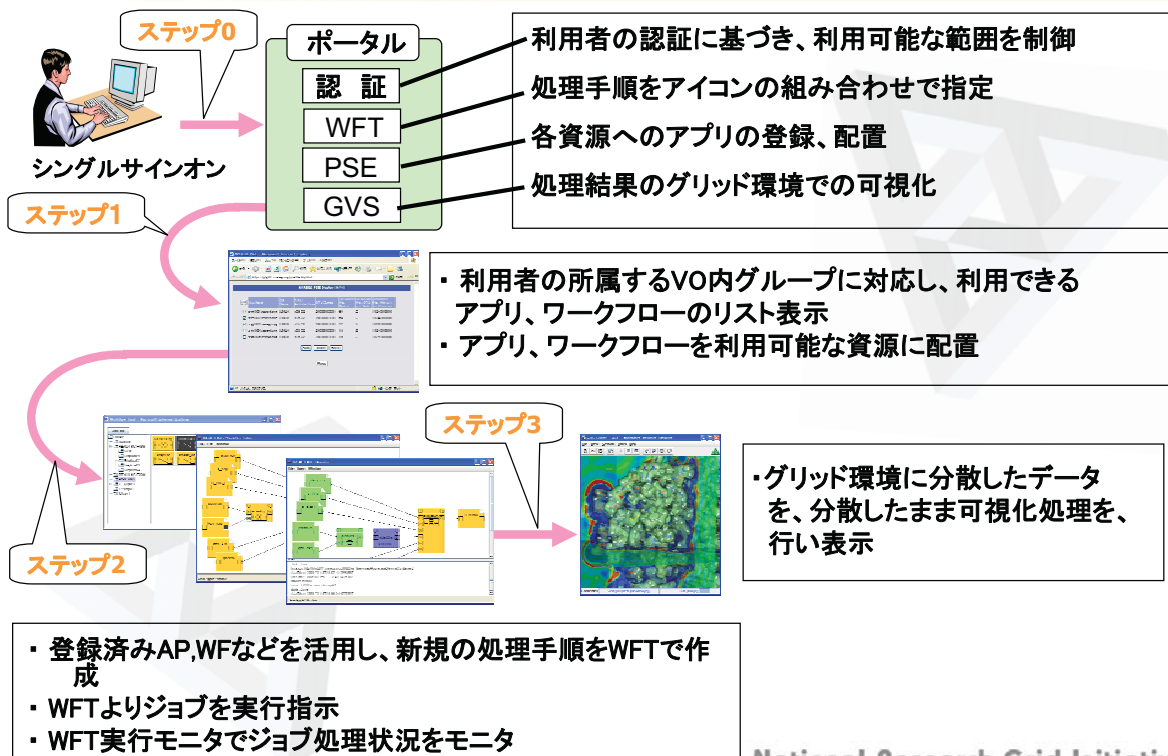
田中 義一

National Research Grid Initiative

NAREGIミドルウェアの利用者から見た機能



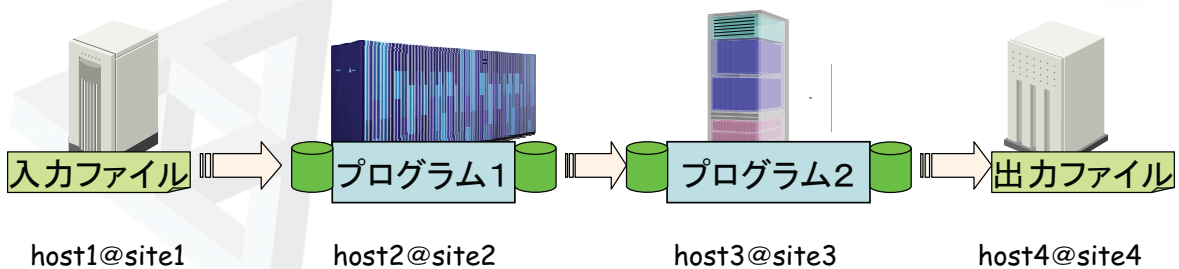
グリッド利用環境



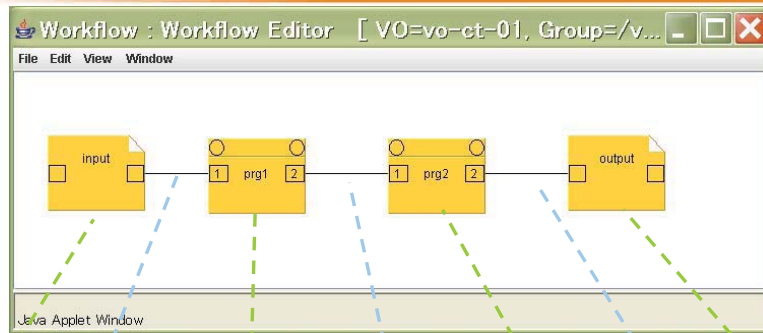
National Research Grid Initiative

グリッドアプリケーション開発のシナリオ例

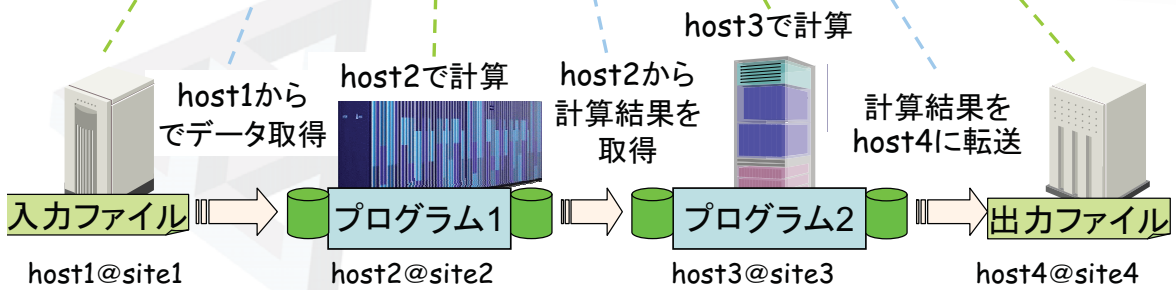
- host1のデータを入力し、host2のプログラム1と、host3のプログラム2を逐次実行し、結果をhost4に得たい
 - プログラム1はsite2のhost2上
 - 入力ファイルはsite1のhost1上から転送
 - 出力ファイルをプログラム2の入力ファイルへ転送
 - プログラム2はsite3のhost3上
 - 入力ファイルはプログラム1の出力ファイルから転送
 - 出力ファイルはsite4のhost4上へ転送



National Research Grid Initiative



WFTで以下の事を記述



National Research Grid Initiative

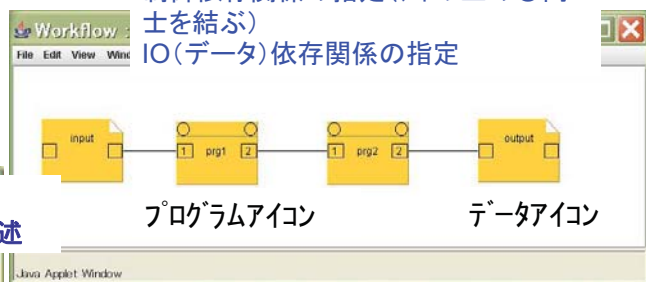
グリッドワークフローの作成

- WFコンポーネントとなるアイコンの貼り付け
プログラムアイコン, データアイコン
ワークフローアイコン, GridMPIアイコン
バルクジョブアイコン, ループ, ifアイコン
- コンポーネント間の接続(アイコン間の線)
制御依存関係の指定(アイコン上の○同士を結ぶ)
IO(データ)依存関係の指定

プログラムアイコンの実行要件設定

メニューによるプログラム実行要件記述

IO情報の記述



データアイコンの要件設定

複数のデータセットを用意して実行の際に選択可能

National Research Grid Initiative



PSEによるアプリの登録と配置

7

WFTのプログラムアイコンのプログラム実行要件を指定して、プログラムが実行できるためには、開発者は

- * プログラムのソース(またはバイナリ)を準備
- * プログラム実行要件を満たすリモートホストを見つける必要
- * リモートホスト用にソースをコンパイルしてバイナリプログラムを準備
望む計算機の候補が複数であれば、それぞれに対して用意
- * 実行候補の計算機にバイナリプログラムを転送
- * もし、プログラムをVOに属する人にも公開するのであれば、VOの共有領域を用意してバイナリを転送

そして WFTのプログラム実行要件を記述

(プログラムファイルパス、プログラム引数、環境変数、実行ディレクトリ、要求メモリ、要求CPU時間、、、)

PSE:上記の手動による操作を、メニュー形式のGUIにより容易に行えるようにするのが、アプリの登録と配置の機能

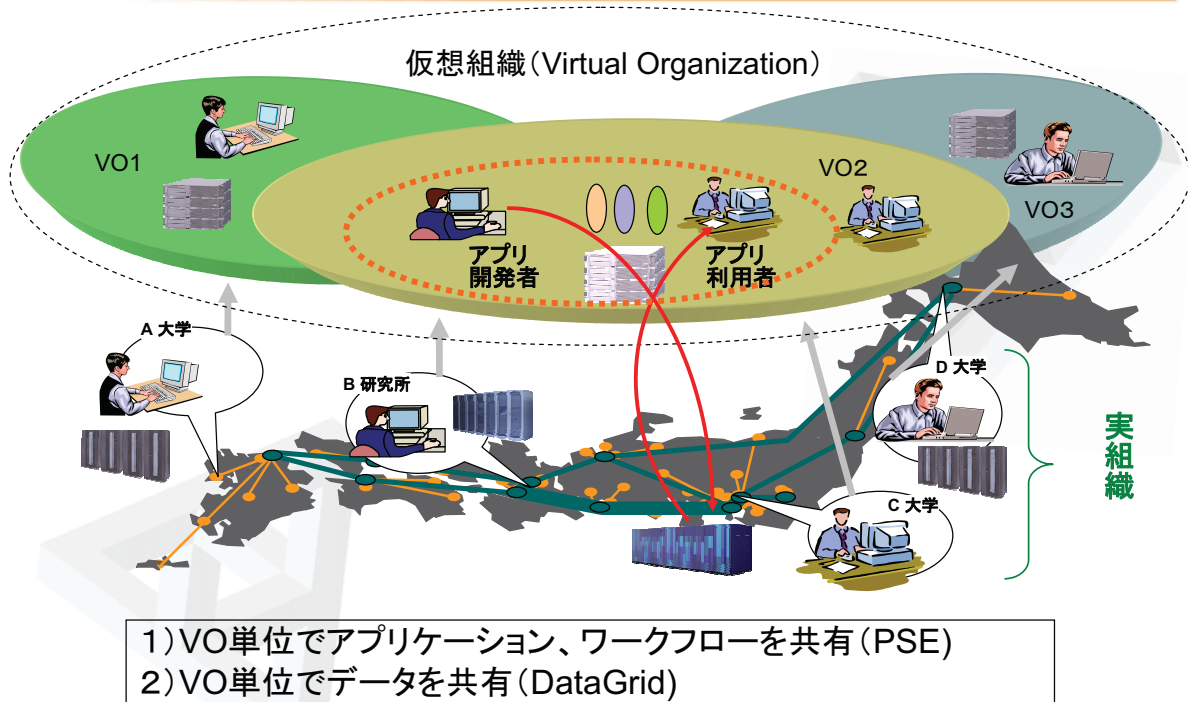
PSE経由で行うと、1度つくったプログラムアイコンをVO内のユーザが検索してWFT内に取り込んで利用することが可能

ve

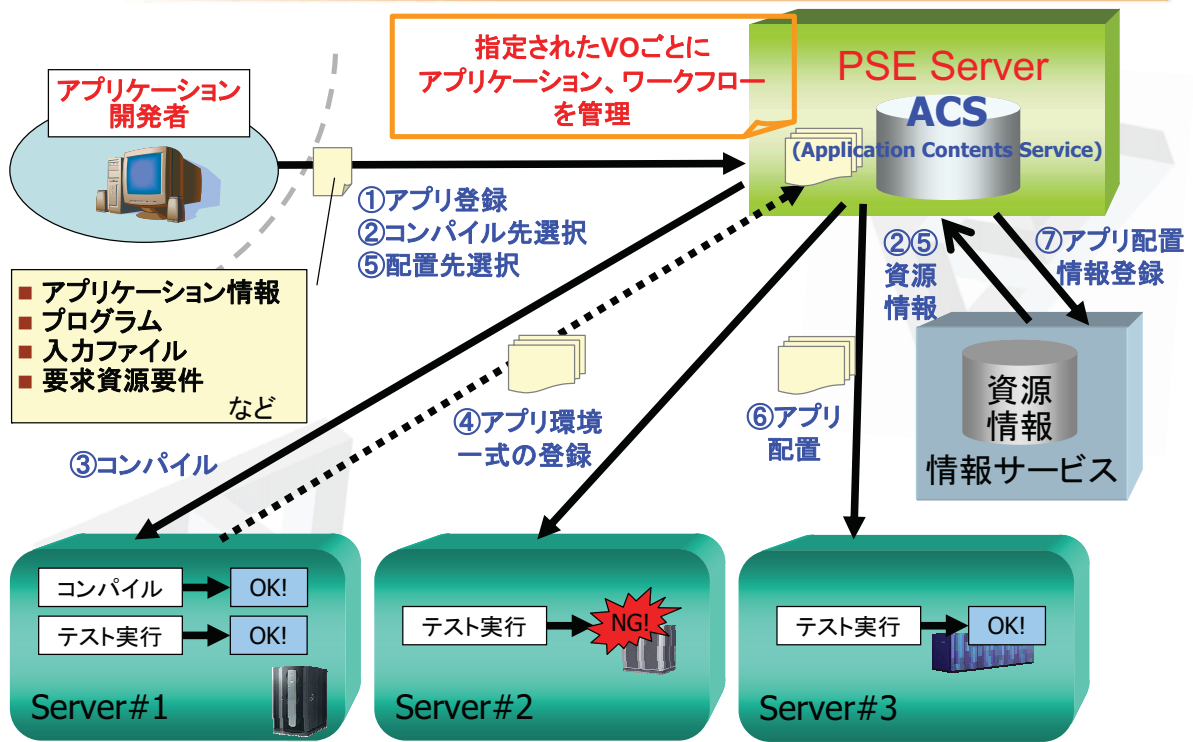


VOでのアプリケーション・ワークフローの共有

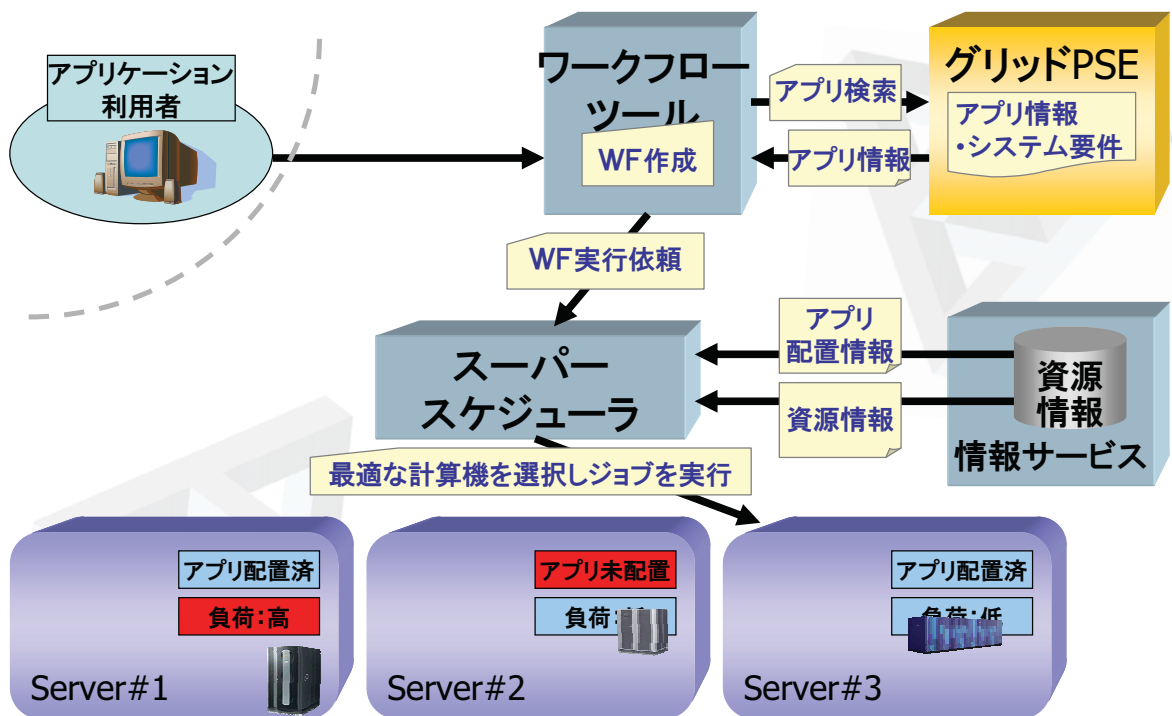
8



アプリケーションの登録・配置

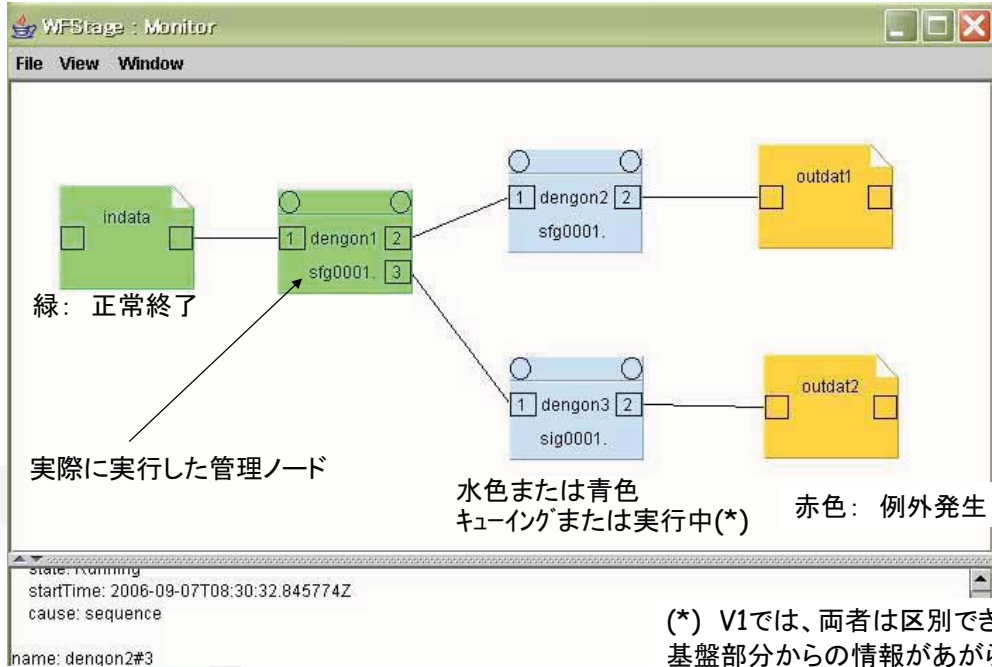


アプリケーション利用者による実行



ワークフローの実行の途中の状態

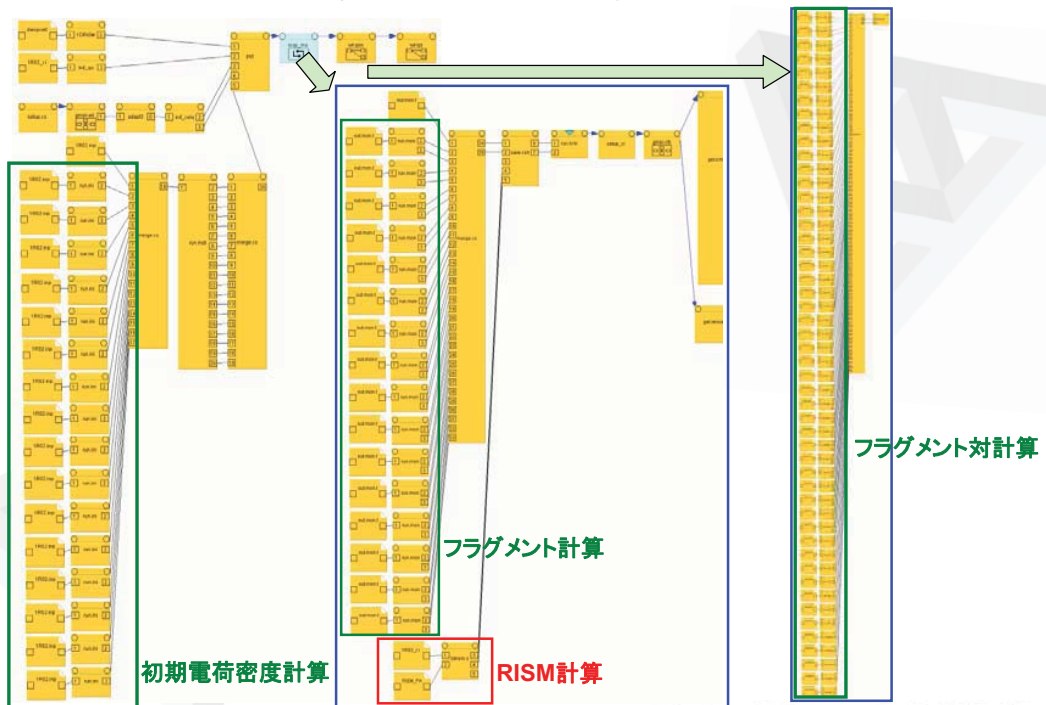
Monitor画面



(*) V1では、両者は区別できない
基盤部分からの情報があがらない

大規模な連成解析ワークフロー例

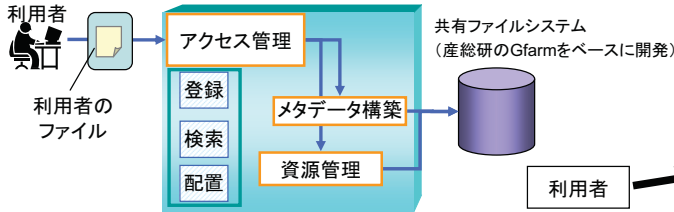
RISM-疎結合FMO連成計算(九大、東工大、情報研の3サイト使用)



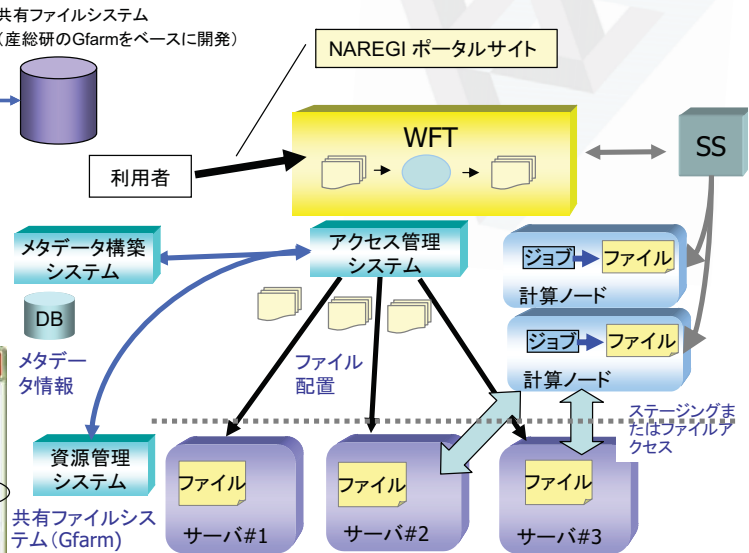
グローバルデータファイル(DataGrid)

広域に散在するデータ資源を、利用者がグリッド上のファイルサーバの構成を意識することなしに、グローバルなパス名で参照可能

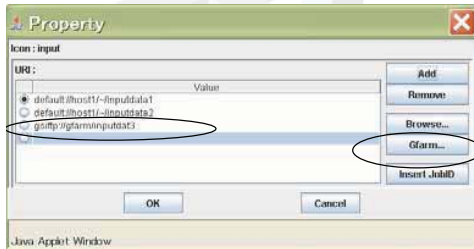
データグリッド概要



データグリッド利用例

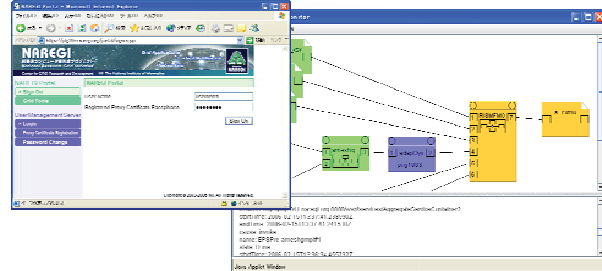


WFTでのデータアイコンの指定

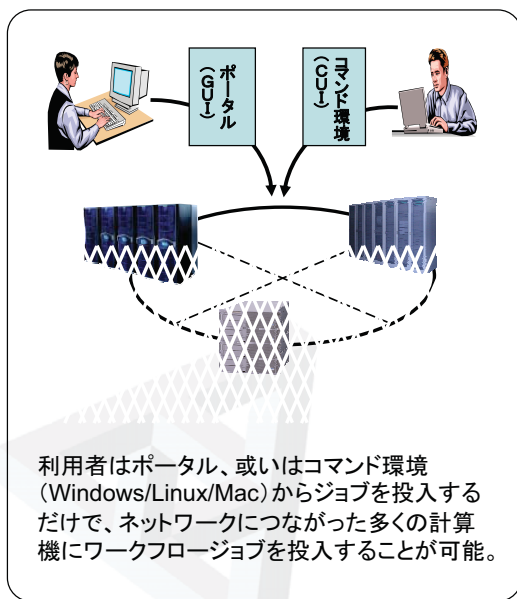
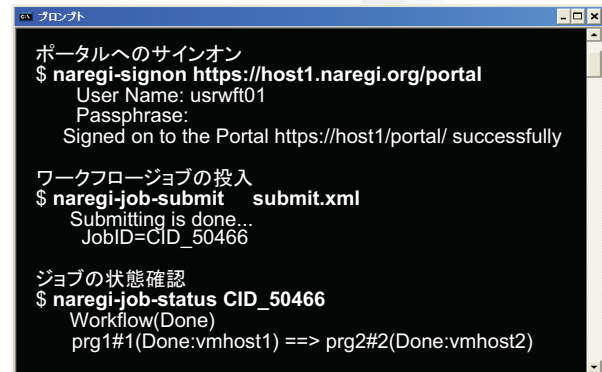


GUIとCUI

GUI: Graphical User Interface



CUI: Comand User Interface



利用者はポータル、或いはコマンド環境 (Windows/Linux/Mac) からジョブを投入するだけで、ネットワークにつながった多くの計算機にワークフロージョブを投入することが可能。



コマンド一覧 (Linux, Mac, Windows)

15

サインオンコマンド

naregi-signon, naregi-signout

ワークフロージョブの投入削除コマンド

naregi-simplejob-submit, naregi-mpijob-submit, naregi-job-submit,
naregi-bulkjob-submit, naregi-job-cancel, naregi-job-delete

ワークフロージョブ状態取得コマンド

naregi-job-list, naregi-job-status, naregi-job-log
naregi-std-print, naregi-server-list

アプリケーション／ワークフローの管理・共有コマンド

naregi-pse-serach, naregi-pse-getapp, naregi-pse-getwf
naregi-pse-register, naregi-pse-serverlist
naregi-pse-deploy, naregi-pse-status

National Research Grid Initiative



(ステップ3)

グリッド可視化

16

■ インタラクティブ可視化

- ClientのGUI上のユーザ操作(マウス操作, 設定変更等)に応じて, 計算サーバ上のVisualizerにて可視化画像を生成, GUI上に表示.

■ バッチ可視化

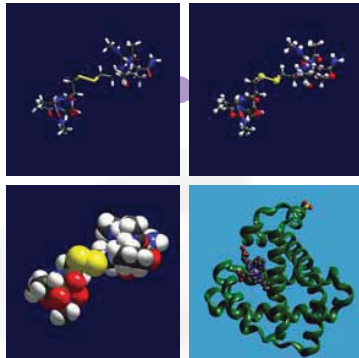
- ユーザが事前に定義したシナリオに従って, 視点等の各種可視化パラメータ変更, 時刻ステップ進行の自動制御を行い, 一連の可視化画像を生成, 動画ファイルに変換して出力. 純粹なバッチジョブとして実行.
- インタラクティブ可視化と同様, ポスト可視化, 疎結合リアルタイム可視化が可能.

National Research Grid Initiative

対応図種

■ 分子構造

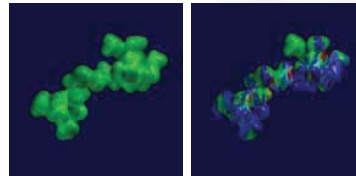
- スティック
- ボール&スティック
- 空間充填
- チューブ&リボン



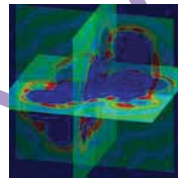
↑ PDBデータから描画可能

■ 等値面

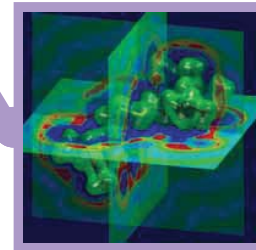
- 単色
- コンタ



■ コンタ平面



複数図種を合成可能

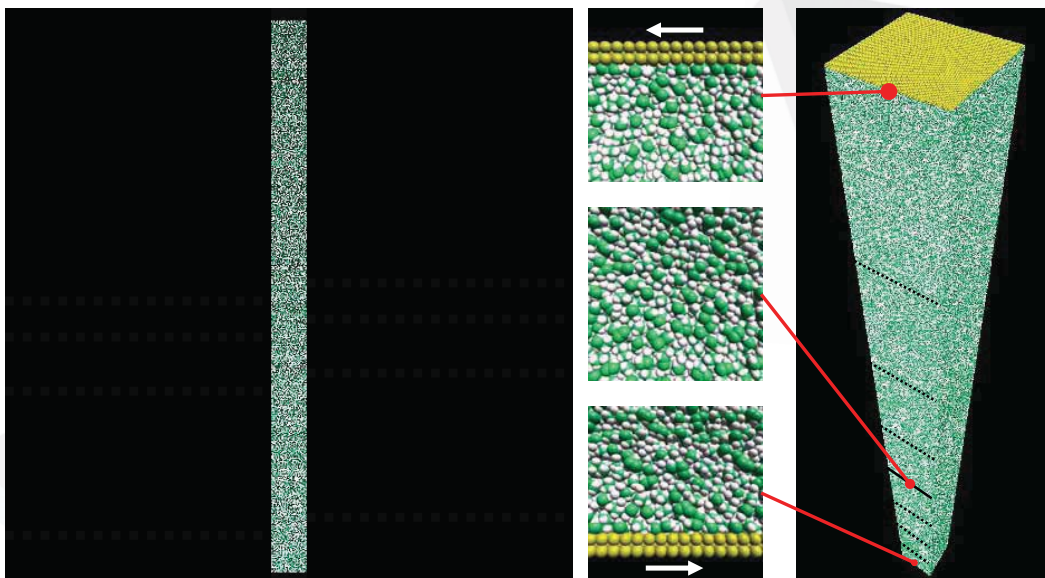


↑ 規則構造格子, 電子密度行列から描画可能

大規模/連成可視化事例

• MD(2000万原子)

※ シミュレーション自身は50万原子
水平方向に仮想セルを追加して可視化

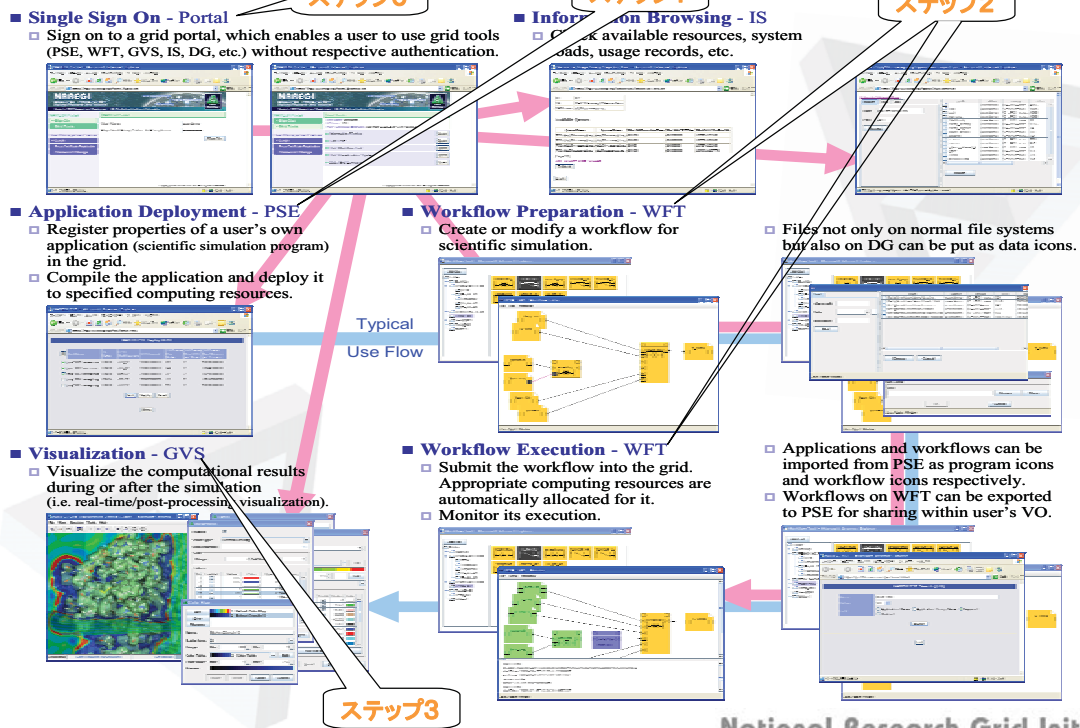


Dynamics of oil molecules between metal solids

データ提供: 豊田中央研究所

NAREGI利用の流れのまとめ

Use Steps



National Research Grid Initiative

まとめ

- **次世代研究環境でのグリッド利用**
研究コミュニティ(VO)に特化したグリッド利用環境の実現
- **ポータルにより平準化された利用環境**
- 計算・データ資源をどこからでも同じように使える
- **GUIによる計算資源を意識しない操作、利用**
- 計算資源、分散した大規模データを意識せずに利用
- **コマンドラインインターフェイスによるアプリケーション管理とジョブ実行**
- **VO単位でのデータ、及びアプリケーションの共有**

National Research Grid Initiative