

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

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



- ・登録済みAP,WFなどを活用し、新規の処理手順をWFTで作成
- ・WFTよりジョブを実行指示
- ・WFT実行モニタでジョブ処理状況をモニタ



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











グリッドワークフローの作成





PSEによるアプリの登録と配置

- 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 用意してパイナリを転送
 - 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 7



VOでのアプリケーション・ワークフローの共有



National Research Grid Initiative

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



1144191141 1193941411 9119 111414419Ú



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





GUILCUI



機にワークフロージョブを投入することが可能。

GUI: Graphical User Interface



CUI: Comand User Interface





コマンド一覧(Linux, Mac, Windows)

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 15



(ステップ3)

グリッド可視化

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.純粋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.









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





NAREGI利用の流れのまとめ





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

20