

仮想研究環境 ITBL 基盤ソフトウェアの開発

Software Infrastructure of Virtual Research Environment ITBL

山口 勇吉^{*} 武宮 博^{*}

^{*}日本原子力研究所 計算科学技術推進センター

Yukichi YAMAGUCHI and Hiroshi TAKEMIYA

^{*}Center for Promotion of Computational Science and Engineering
Japan Atomic Energy Research Institute

E-mail:yamaguchi@koma.jaeri.go.jp

1 はじめに

日本原子力研究所計算科学技術推進センターでは、旧科学技術庁傘下機関と協力しITBL(IT-Based Laboratory)計画を進めている。この計画は、高速ネットワークの整備と併せて、90年代中頃から注目されてきたグリッドコンピューティング[1]要素技術など最新の情報処理技術の活用により、全国に散在するスーパーコンピュータを接続し、計算資源、計算プログラム、データベースなどの知的資源の共有を可能とする仮想研究環境を構築しようとするものである。本計画は、今年3月29日に発表されたe-Japan重点計画「高度情報通信ネットワーク社会の形成に関する重点計画」[2]において国の重点施策として位置付けられた。ここで、“世界最高レベルの研究環境を整備・維持し、研究水準の一層の向上を図るとともに、産学官の研究への迅速かつ的確な情報提供を進めるため、科学技術・学術情報基盤の整備を推進する”ことを目標に、“研究開発のIT化を進めることにより、先端的な科学技術の各分野において技術革新を実現するため、2005年までに、国内すべての研究機関のスーパーコンピュータを大容量ネットワーク上に共有化し、高度なシミュレーション等を行う仮想研究環境ITBLを構築する”とされている。

本報告では、このITBL計画のうち、計算科学技術推進センターの担当している基盤ソフトウェアの概要について紹介することとする。

2. ITBL システム基盤ソフトウェア

2.1 基盤ソフトウェアの果たすべき基本要件

ITBL用基盤ソフトウェアの開発においては、さまざまな科学技術分野で活躍する研究者、技術者が、障壁を感じることなく、安全に、全国の何れの場所からも(インターネットを通じて)、さまざまな計算サイトに配置されている複数のスーパーコンピュータシステムにアクセス、利用できる環境を提供し、計算機資源並びにこれに付属(搭載)している計算プログラム、データベースなどの知的資源の利用を可能にする研究環境を提供することを目標としている。こうした研究環境の提供により、科学技術研究開発を次の二つの側面から支援する。

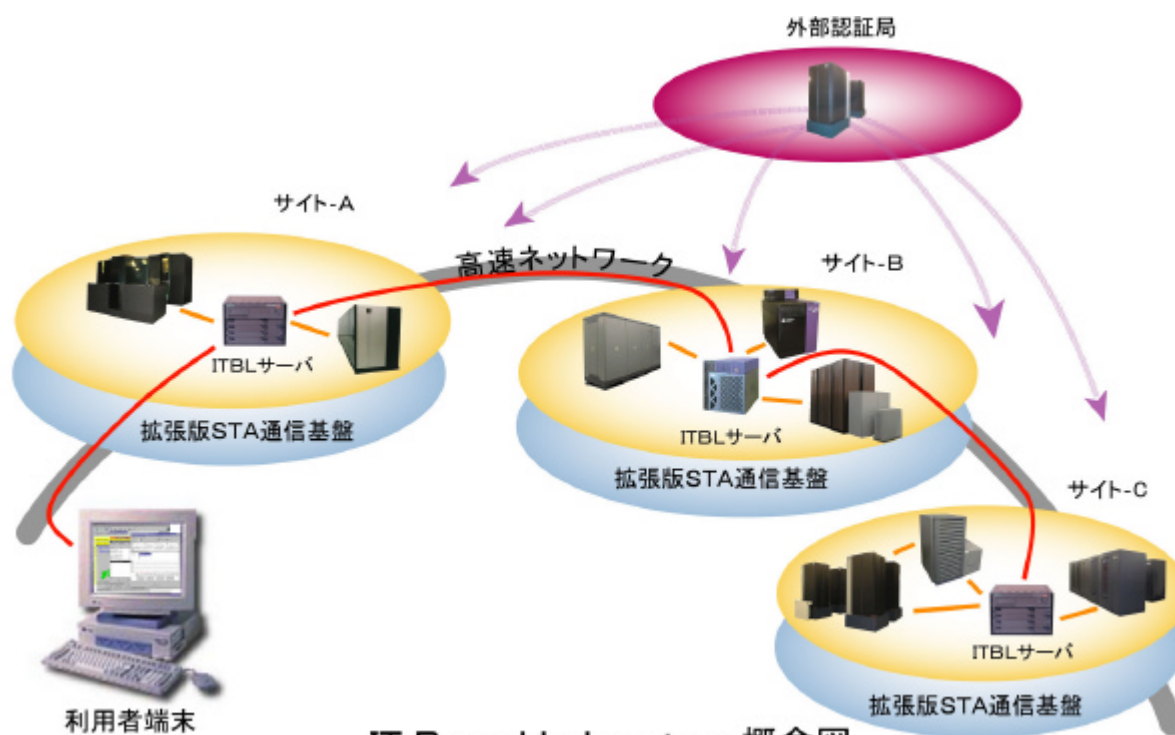
地理的に偏在する計算機資源あるいは大規模データベース等の知的資源を多数の研究

者により共有可能な条件を整える。これにより、地域的に分散している研究者が共通の計算機資源並びに知的資源を協調的に共有・活用することを可能とする分散的研究環境の構築を支援する。

分散した計算機資源並びに夫々の計算機上に配置された計算プログラム、データベース等の知的資源を総合/集約化することを可能にする計算機環境を提供する。これにより、既存の科学技術研究開発の枠組みのもとで整備してきた計算プログラムあるいはデータベースを相互に組み合わせ、高度なシミュレーション等を可能にする。

2.2 ITBL の構成と機能

ITBL の概念図を図 1 に示す。この図に示されるように、ITBL は、高速ネットワークにより接続された複数の計算機サイト、ネットワーク上の何れかに位置する利用者端末、そして外部認証局から構成される。各計算機サイトには、スーパーコンピュータなど個々の計算機サイトに属する計算機資源に加えて、ITBL サーバー用計算機が配置される。



IT Based Laboratory 概念図

図 1 IT Based Laboratory 概念図

ITBL サーバーは、個々の計算機サイト内に設置されているスーパーコンピュータなどの計算機と計算機サイト外との通信を仲介するとともに、ITBL 運用面から必要とされる諸機能を果たす。ITBL 運用に関わる諸制御は、ITBL 全体を統括する特別な仕組み（スーパーサーバー的仕組み）を設けず、個々の計算機サイトに設置している ITBL サーバー間の通信による情報の照会・交換により行う。こうした分散的な処理制御方式の適用により、ITBL 参加機関の拡大可能性を担保しようとする。一方、こうした分散的な処理方式を採用することにより、ITBL サーバー間の通信負荷の増大並びに各 ITBL サーバーにおけるデータ蓄積量、ひいてはデータ処理量の増大が予想される。こうした困難を取り除くため、利用者のアクセス可

能計算機数の制限などの適切な手段を講じることが必要となる。

ITBL を通じた計算機の利用にあたっては、利用者は自らの PC あるいは WS を利用端末として使用することになる。利用に際して必要となる GUI(Graphical User Interface)は、Java Applet を用いて構築し、ITBL サーバー用計算機上に置かれた Web サーバーから必要に応じてダウンロードし活用する構成としている。

ITBL 用基盤ソフトウェアの開発に先立ち、原研では、並列処理にかかわる共通基盤技術研究の一環として、科学技術計算環境 STA(Seamless Thinking Aid) [3] を開発・構築してきた。ITBL の基盤ソフトの開発にあたっては、この STA 環境構築の経験を生かすとともに、その機能の拡張を基本に進めている。

STA は、並列分散科学技術計算を対象とし、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、消費される時間の低減を実現することで、利用者の途切れのない思考を支援する(Seamless Thinking Aid)環境を提供することを意図して開発されたものである。

STA は、概略、次の3つのサブシステムから構成されている；

- 1) 通信基盤：SCE； 複数の並列計算機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通信基盤である。ここでは、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、および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 [4] を提供する。
- 2) プログラム開発環境：PPDE； 並列分散プログラムの開発を支援する各種ツールの連携を実現した統合プログラミング環境である。複数の計算機を用いたプログラム開発作業の流れの円滑化並びに計算機に依存しないツールの統一的な操作感を提供することを念頭に設計されている。
- 3) 並列分散科学技術計算実行環境：PPExe； 並列分散科学技術計算の実行を支援する統合環境である。この計算実行環境は、複数のツールから構成されているが、特に TME(Task Mapping Editor)では、計算ジョブ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図式的に表現することにより、視覚的な操作によるジョブの定義、実行を可能にしている。この計算実行環境下で、並列分散科学技術計算における実時間可視化解析や分散スーパーコンピューティングが行われる。

これまでに、計算科学技術推進センターでは、STA 上にいくつかの並列分散科学技術計算アプリケーションを構築し、実用性評価を行ってきた。評価対象としたアプリケーションには、分散スーパーコンピューティングの事例としての流体・構造連成計算コード [5]、PPExe 適用事例としての緊急時放射線源情報推定システム [6] などがあり、これまでに、その有効性を確認するとともに、ITBL 基盤ソフトウェア開発の基礎となる様々な経験を蓄積することができた。

3. 基盤ソフトウェア開発における諸課題

既に述べたように、ITBL 基盤ソフトは、STA 基本システムの拡張を通じて開発が進められている。STA で実現した諸機能の大部分は、ITBL においても、これを継承し、実運用システムとして充実させることとしている。これまでに STA 基本システムの開発を通じて、単一サイト内において複数の異なる種類の計算機を単一の計算機のように利用できる計算環境

構築のための基盤技術を開発してきた。しかしながら、ITBL では、利用者が、複数の計算機サイトを対象とし、個々の計算機サイトの持つ運用ポリシーの相違、さらには計算機の機種相違を意識することなく、それらをあたかも単一の計算機のように利用できる計算環境を提供することが求められる。以下、単一計算機サイトから複数計算機サイトを対象とすることに伴う、STA 拡張の必要性を中心に、開発にあたって取り組んでいる諸課題について基本的な方針、考え方を述べることにする。

3.1 運用ポリシーの独立性と ITBL サーバー

一般に、ITBL で接続対象とするスーパーコンピュータなど個々の計算機システムは、研究機関あるいはこれに属する支分組織ごとの計算機サイトに属している。これら個々の計算機サイトでは、夫々の計算機サイトに特有な運用ポリシーに基づき、個別ユーザーへの計算機資源の割り当て / 許可、課金システムを採用するとともに、外部（計算機サイト外）からの不正なアクセスから計算機システムを防護するためのファイアウォールなどの設置などによるセキュリティ確保の方策を講じている。また、各々の計算機サイトには、機種の異なる複数の計算機が設置されていることも多い。

STA 基本システムで実現した計算環境を、計算機サイトの枠を越えたかたちで、構築、提供しようとする場合、二つの異なる方式が考えられる。即ち、

ITBL に参加する機関の計算機サイトのセキュリティ確保策を含む計算機運用方式を
共通 / 標準化する

個々の計算機サイトが採用している計算機運用方式を尊重し、サイト毎に異なる運用
方式の相違を補償するなんらかのメカニズムを考案する

の二つの方式である。

ITBL システムでは、後者の方式、即ち、ITBL に参加する計算サイト独自の運用ポリシーを最大限尊重する方式を採用する。既に、2.1 で述べたように、サイト間の通信を仲介する中継点として ITBL サーバーを設置するが、この通信上の中継点という役割に加えて、これに計算サイト間の計算機運用方式の相違を補償するための諸機能を付加し、個々のサイト特有の運用方式をここで吸収する。ITBL サーバーには、サイトに属する計算機の利用可能な資源情報、利用者毎のアクセス許可情報（パスワード等）あるいは課金情報などの計算機サイト運用上必要な情報を蓄え、個々のサイトの運用方式に沿ったかたちで適切な利用制御を実現する計画である。

3.2 ITBL システムの利用と Single Sign-on

計算機システムの利用にあたっては、一般に、それぞれの計算機システムのアクセスコントロール / 認証方式に従い ID、パスワードが要求される。ITBL システムの利用に際しては、基本的に、複数のサイト並びに複数の計算機システムへのアクセス・利用を前提とすることから、個別の計算機システムから要求される ID、パスワードの入力を、拠点サイト（個々の利用者が最初にアクセスをするサイト）に位置する ITBL サーバーへのアクセス時に一括して行える仕組み (Single Sign-on) を整える必要がある。

Single Sign-on 実現のため、夫々の ITBL 利用者には Global-ID（並びにパスワード）を付与する。利用者は、この Global-ID を用いて ITBL サーバーにアクセスする。ターゲットとする個々の実行計算機システム（個々の実行計算機システムに対応する ID を Local-ID と呼ぶ）へのアク

セスにあたっては、Global-ID に個別の実行計算機システムの利用に必要な Local-ID を対応付け、これを用いる。

各々の利用者が実行計算機システムを利用するにあたっては、あらかじめ利用者自らが当該実行計算機システムの利用に関わる ID (Local-ID) を取得することを前提としている。取得した Local-ID は、利用者の拠点サイトに位置する ITBL サーバー上に適切な形式で登録する。

3.3 計算機サイトのセキュリティ確保方策とサイト内計算機へのアクセス

既に述べたように、個々の計算機サイトは、ファイアウォール、あるいは不正侵入防護装置を設置するなどの手段により、サイト外からの不正なアクセスからサイトに属する計算機システムを防護している。加えて、計算機サイトに属する個々の計算機システムあるいはデータへのアクセス制限などの措置も講じている。防護の(セキュリティの)方策は、個々の計算機サイトの運用ポリシーによりさまざまである。

個々の計算機サイトにおけるセキュリティ確保措置の結果、当然のことながら、計算機サイト外部から計算機サイトに属する実行計算機へのアクセスは、大きく制限を受ける。まず、サイト外部からサイト内に設置する ITBL サーバーにアクセスする通信プロトコルが制限される。サイト外部からのアクセスを可能にするには、

ITBL の枠組みで使用する特別な通信プロトコルを設定し、ITBL に接続するサイトに対して、この通信プロトコルでのアクセスを可能にするよう、ファイアウォールの設定等の変更を依頼する、もしくは、

個々のサイトにアクセスするに際して、サイトにアクセス可能な通信プロトコル(例えば、http(s))を選択、採用し、サイト内に設置された ITBL サーバーにアクセスするのいずれかを用いることになる。ITBL サーバーへのアクセスが達成された後は、ITBL 特有の通信規約に基づいた形式で計算機間通信が行われる。

セキュリティ確保のもうひとつの側面、即ち利用者データ(ID、パスワード情報を含む)の保護が重要である。このため、利用者端末/ITBL サーバー間あるいは ITBL サーバー間のデータの転送に際して、データの暗号化措置を講じる。

ITBL サーバーのサイト内への設置、さらには前項で述べた Single Sign-on 機能の導入等 ITBL システムの活用に伴う計算機サイトのセキュリティ確保レベルの低下は許されない。適切な認証方式を活用するとともに、ITBL サーバーへのアタックを想定したセキュリティ強化策について検討を進めている。

4. その他の基盤技術関連機能

4.1 研究コミュニティの支援

これまでに述べた計算環境の整備により、この計算(研究)環境のうえで、複数の研究者が協調して研究を行う条件が生まれるものと期待される。既存の研究グループあるいは中間領域の研究分野において「草の根的に」創出される研究グループなどが、ITBL 上で協調的に研究活動を行う場合、これらの集団を研究コミュニティと呼ぶ。

ITBL では、研究コミュニティにおける研究活動を効果的に進めるため、これを支援するために必要な仕組みを提供する。これらの仕組みには以下のものが含まれる；

共通の作業領域(解析結果、実験データ、計算プログラムなどを保存)としての「共用キ

「キャビネット」の設置、

「共用キャビネット」内ファイル検索機能

研究コミュニティ内メンバー間のコミュニケーションの円滑化、促進を図るための掲示板の設置

なお、研究コミュニティが共通して使用するファイル等については、研究コミュニティに特有のアクセスコントロール機能を付加する。

4.2 複数サイトにまたがる分散スーパーコンピューティングの支援

複数のサイトにわたり複数の(異機種)スーパーコンピュータを連携させた大規模計算の実施、あるいはサイト間で大量のデータのやりとりを行う計算ジョブの実施については、ITBL サーバーの処理能力の限界などから、3章で紹介した計算機サイト間の通信をITBL サーバー経由で行う方式に加え、特別な配慮、仕組みが必要と考えられる。また、使用対象とする計算機をあらかじめ予約するなど、計算機運用者間での特別な取り決めが必要となる。

前者の要求に応えるため、複数サイト間の通信に対して、ITBL サーバーを介した通信に加えて、実行計算機間をVPNで接続した構成の検討をしているところである。また、後者の要求に対して、計算機サイト運用管理者間の調整支援機能についても検討を行っているところである。

5. おわりに

ITBL 基盤ソフトの概要、並びに開発上の諸課題について簡単に紹介した。ITBL の開発は、その端緒についたばかりのところであり、これを実運用に耐えるシステムとするためには、数多くの課題を解決するとともに、徹底した運用試験を行い、安全でかつ利用者に魅力あるシステムとすることが必要である。解決すべき課題についても、具体的なシステムの構築を進めるなかで明らかになるものも多いと予想される。ともあれ、本報告を通じて、現段階でのITBL 基盤ソフトウェアの構成、計画について理解をして戴ければ幸いである。

参考文献

- [1] Foster, I. and C. Kesselman, Ed., The GRID; Blue Print for a New Computing Infrastructure. Morgan Kaufmann, 1998.
- [2] 情報通信技術戦略本部, <http://www.kantei.go.jp/it/network/dai3/3siryou45.html>
- [3] 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) 1104-1109
- [4] Imamura, T., Tsujita, Y., Koide, H. and Takemiya, H. An Architecture of Stampi: MPI Library on a Cluster of Parallel Computers. In Recent Advances in Parallel Virtual Machine and Message Passing Interface, LNCS 1908 Springer (2000), 200-207.
- [5] Kimura, T. and Takemiya, H.; Distributed Parallel Computing for Fluid-Structure Coupled Simulations on a Heterogeneous Parallel Computer Cluster. The International Journal of High Performance Computing Applications, Vol.13, No.4(1999) 320-333
- [6] Kitabata, H. and Chino, M.; Development of Source Term Estimation Method During Nuclear Emergency, in Proc. of International Conference on Mathematics and Computing (1998)