

バイオグリッドシンポジウム BioGrid 2005

「グリッド基盤技術」 バイオグリッド基盤システムの 整備と運用

2005/3/9

NECシステムテクノロジー株式会社

藤井 省吾

仲川 拓志

目次

- 基盤グループの概要
- 2004 年度の成果
- 今後の予定
- システムご利用案内
- 来年度以降のグリッド基盤運用体制

基盤グループの概要

基盤グループの位置づけ

コンピューティンググループ

データグリッドグループ

基盤グループ

テレサイエンスグループ

運用や他組織との連携、後方支援に重点

基盤グループメンバー構成

- 大阪大学 下條真司
- 大阪大学 伊達進
- (財)千里国際情報事業財団 4名
- 大阪大学下條研究室 学生 5名
- NEC・NECシステムテクノロジー(株) 5名

基盤システムの概要

■グリッド1 (低遅延型クラスタ)

- 管理ノード × 1
- 計算ノード (PIII 1GHz × 2) × 8
- **Myrinet によるノード間高速通信**

■グリッド4 (データグリッド)

- 3 ノード
- 約15TB (データディスク)

■グリッド2 (高速計算用)

- 管理ノード × 2
- 計算ノード (PIII 1.4GHz × 2) × 78
- **156CPUによる大規模演算**

■グリッド3

- Compaq GS-80



大阪大学
基幹
ネットワーク



吹田CMC本館

豊中CMC新棟

基盤グループの役割

- 他グループ、連携先の研究をサポート
 - 必要なソフトウェアなど、研究環境の整備、構築
 - デモンストレーション対応
- ユーザの様々な要求を満たす
 - ネットワークフィルタ対応
 - ソフトウェアのアップデート
 - etc...
- バイオグリッド基盤システムの安定性の維持
 - システムの安定稼動
 - 障害時における復旧の為の迅速な対応

2004年度の成果

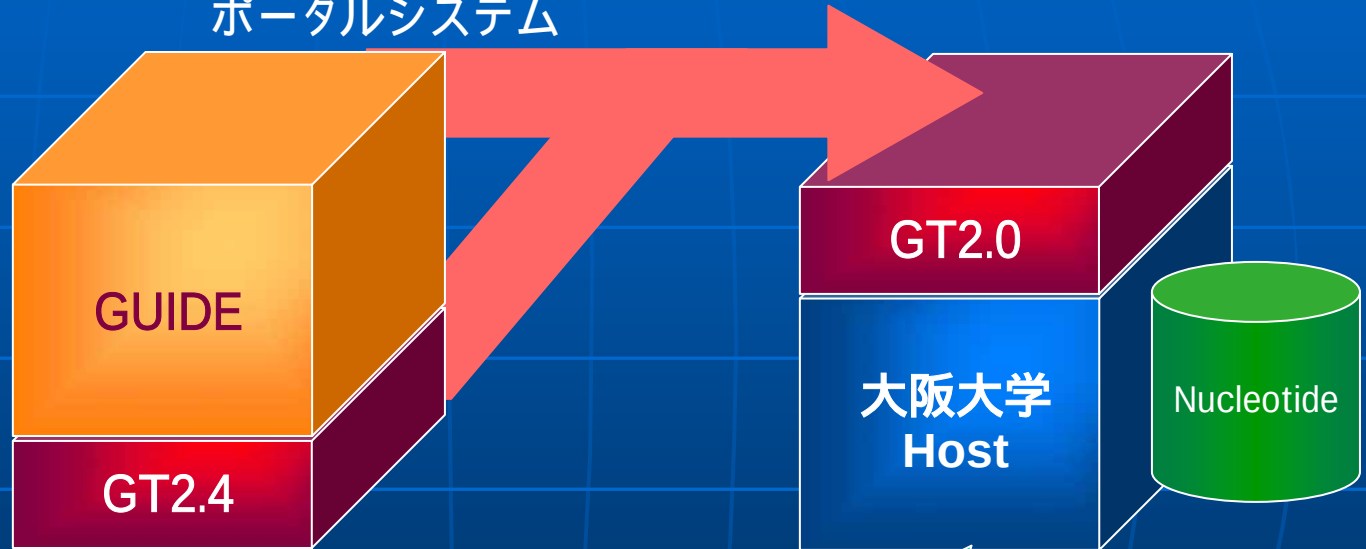
今年度の目標

- 運用のノウハウを基盤システムに限らず活用し、他組織、グループの成果に貢献する
- ユーザの要求への即時レスポンス
- 基盤システムの安定稼動

基盤システムの利用

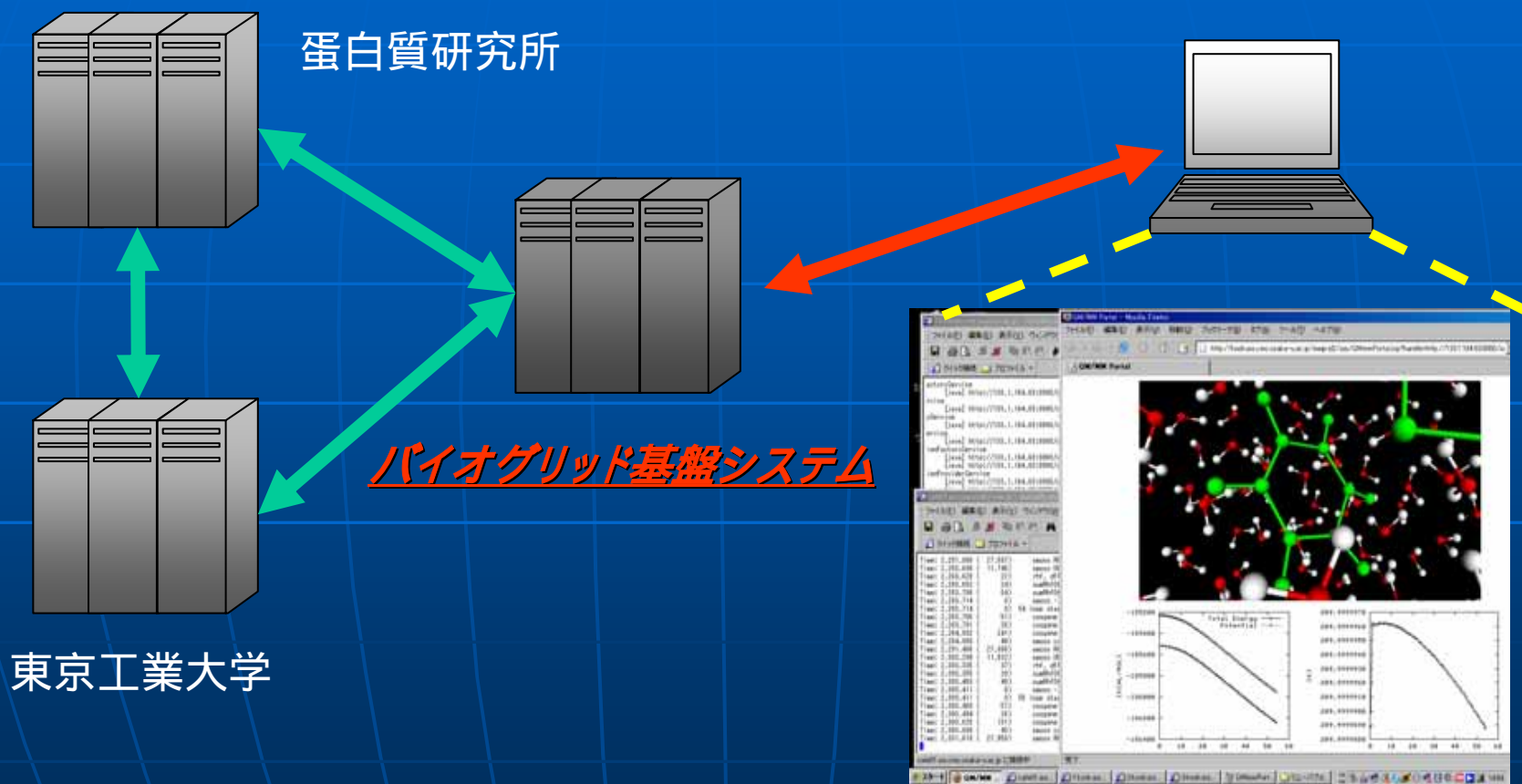
GUIDE (A Grid User interface to the Distributed Environment)

- グリッド環境の複雑性を隠蔽し、ユーザ利便性を提供するために設計された遺伝子配列情報の相同性検索ポータルシステム



バイオグリッド基盤システム

コンピューティンググループ



複雑な分子計算の高速処理を実現

ハードウェアトラブルを未然に防止

■ 予防処置

- 月一回の定期保守による DISK エラーチェック
- 論理 DISK データ整合性チェック
- DISK のRAID 構成変更
- ログ確認
- 各部点検清掃

ネットワーク障害の調査

- 障害
 - 基盤システムネットワーク通信異常
- 対策
 - ネットワーク疎通確認、障害箇所切り分け
- 結果
 - 障害箇所発見、復旧

ソフトウェアアップデート(グリッド1)

導入ソフト

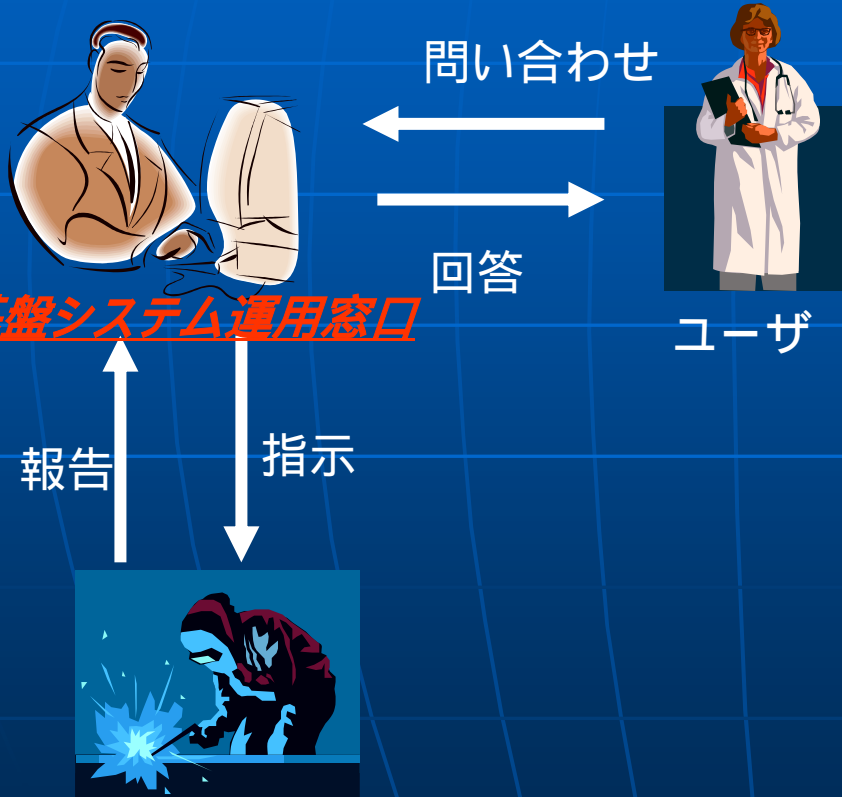
ソフト名称	Ver ,Rev	管理 ノード	計算 ノード	備考
Fedora Core	1	○	○	Kernel 2.4.22
SCore	5.8.2	○	○	mpich 1.2.4
PBS/SCore	5.8.2	○	-	
Condor	6.6.8	○	-	
Globus Toolkit	2.2.4	○	-	
Intel C++ Compiler	8.0	○	○	
Intel Fortran Compiler	8.0	○	○	
Intel Math Kernel Library	6.1.1	○	○	
MPI/PC-32 (SCore)	1.0.0	○	○	MPI-2 (Spawn)
PGI Server	4.0	○	○	
MPICH	1.2.6	○	-	
J2SE, SDK	1.4.2_07	○	○	

ソフトウェアのアップデート(グリッド2)

ソフト名称	Ver , Rev	管理 ノード #0	計算 ノード	管理 ノード #100	備考
Red Hat Linux	7.3	○	○	○	Kernel 2.4.18
SCore	5.4	○	○	-	mpich 1.2.4
OpenPBS	2.3.16	-	○	○	
Condor	6.4.7	-	○	○	
Globus Toolkit	2.2.4	○	-	○	
Intel C++ Compiler	8.0	○	○	○	
Intel Fortran Compiler	8.0	○	○	○	
Intel Math Kernel Library	6.1.1	○	○	-	
MPI/PC-32 (SCore)	1.0.0	○	○	○	MPI-2 (Spawn)
PGI Server	4.0	○	○	-	
MPICH	1.2.6	○	-	○	
J2SE, SDK	1.4.2_04	○	○	○	
Homology Searcher (BLAST)	2.2.5a	○	-	-	
Homology Searcher (BLAST) MPI	2.2.5b	○	-	-	
Homology Parser (Nucleotide, Protein)	1.0	○	-	-	
FASTA	3.4	○			
SSEARCH	3.4	○			

ユーザ要求への対応

ネットワークフィルタリング



- 目的: デモンストレーションや、他サイトの新規ユーザからの接続を実現する為
- 対応: 接続相手先とのコミュニケーションにより要求されているポート、IPアドレスなどを特定、実働部隊に設定を指示

基盤システム実働

システム情報の発信

■ 目的

- システム情報をユーザに発信する
- Ganglia Cluster Toolkit によるシステム負荷情報の公開
- 各アプリケーションの利用マニュアルの公開
- システムの停止スケジュールや障害情報を載せた運用計画の公開
- ヘルプデスクシステム

■ システム情報発信WEBページを作成

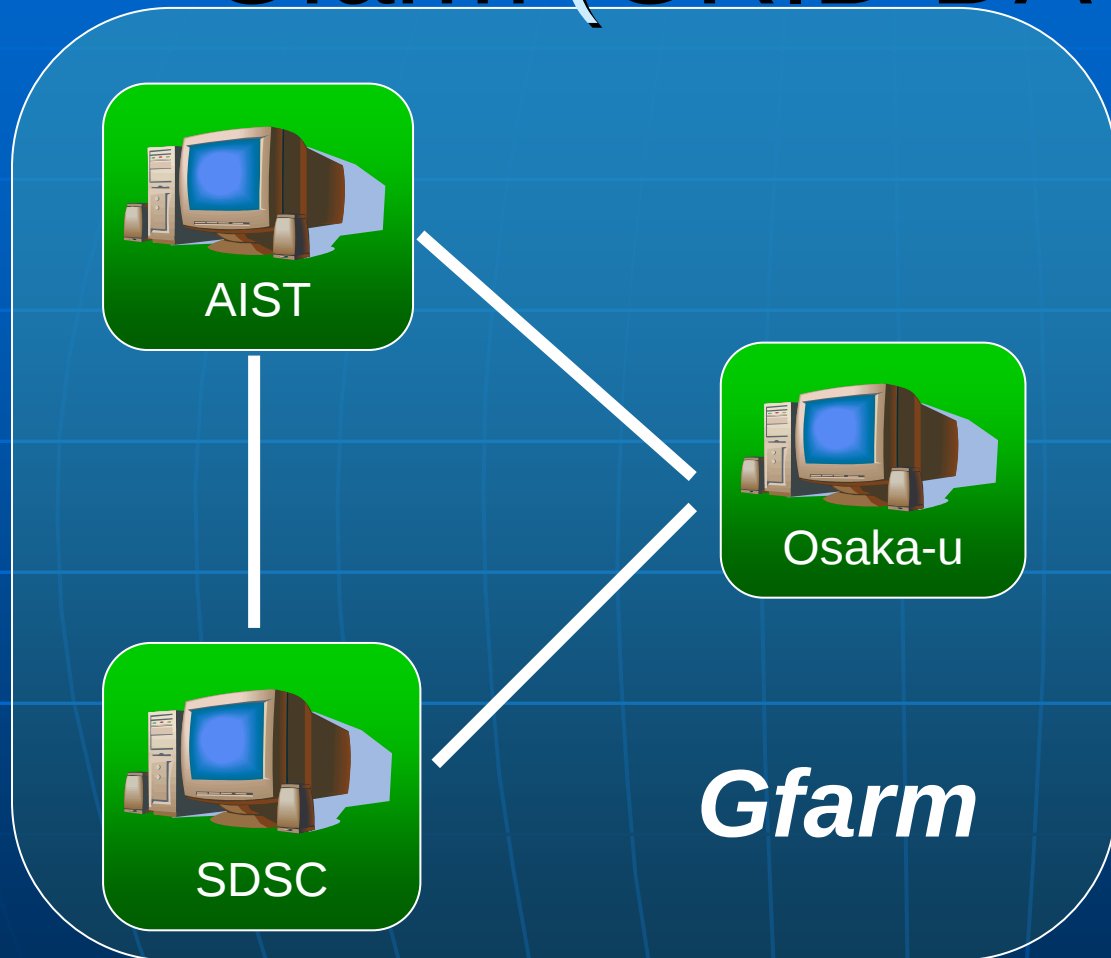
■ デモンストレーション

連携支援

概要

デモンストレーション名	連携先	対応内容
Gfarm (GRID DATA FARM)	AIST, SDSC, Konkuk University, BII, KISTI, APAN	・Gfarm インストール、設定 ・ネットワークフィルタ設定 ・Globus 設定
NAREGI テストベッド モニタリング	NAREGI (National Research Grid Initiative)	・ネットワークフィルタ設定
QM/MM 連成シミュレーション	東京工業大学	・システム利用制限 ・コンパイラバージョンアップ ・新規アカウント作成
JGN	NICT (National Institute of Information and Communications Technology)	・デモンストレーションマシン監視

Gfarm (GRID DATA FARM)



グリッドデータファームにより複数組織での高信頼なデータ共有, 高速なデータアクセスを実現。その実証実験を行った。

Gfarm 導入

ネットワークフィルタリング

Globus 設定

QM/MM 連成シミュレーション

要望

対応

要望その1

デモ期間中は他のジョブで
高い負荷をかけないでほしい

デモ期間中のみ他のユーザ
に対し、システムの利用制限

要望その2

グループ内の協調作業を円滑に進める
ため、共有アカウントを作成してほしい

ログイン制限つき
共有アカウント作成

要望その3

最新バージョンの Intel(R)
コンパイラやライブラリを導入してほしい

最新版 Intel(R) C++ Compiler、
MKL、等導入

今年度のまとめ

- 当初の目的の達成
 - 基盤グループとして、運用のノウハウを活かし、デモンストレーションに貢献
- ユーザの多様な要求に随時対応
 - ネットワークフィルタリング
 - ソフトウェアアップデート
- システムの安定性を1年間維持
 - DISK 障害などのハードウェア障害対応
 - ネットワーク障害対応

今後の予定

IPv6の運用技術の確立

韓国KISTI, 中国CASとのIPv6Globusによる連携

運用面

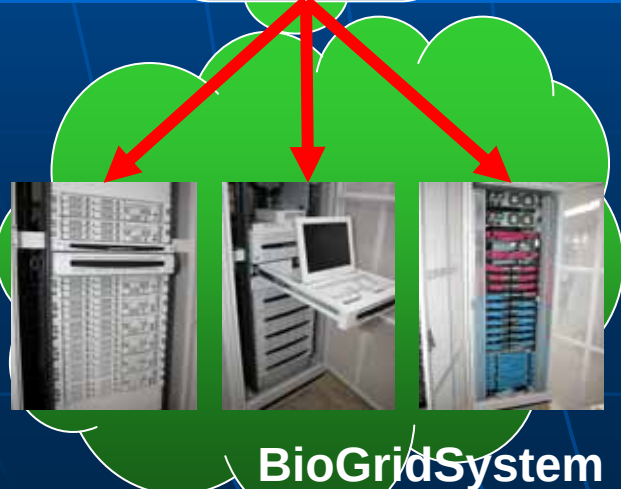
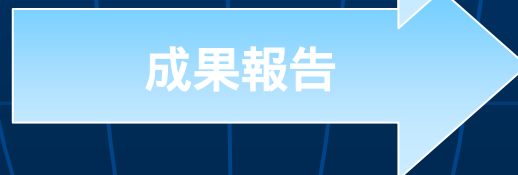
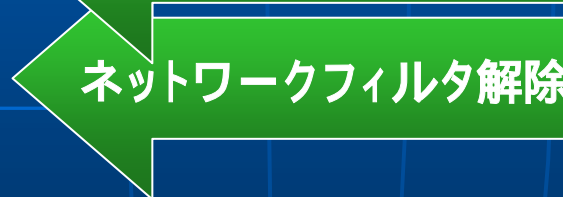
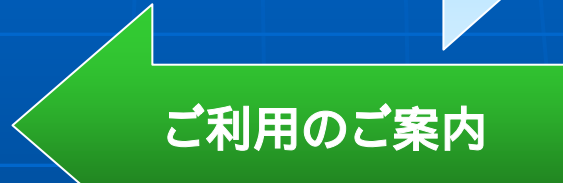
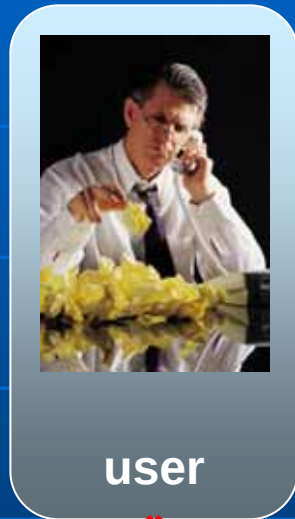
安定したサービスの維持

最新環境への対応

**用途によってノードを配分する
など、運用形態の最適化**

システム利用案内

システム利用申請



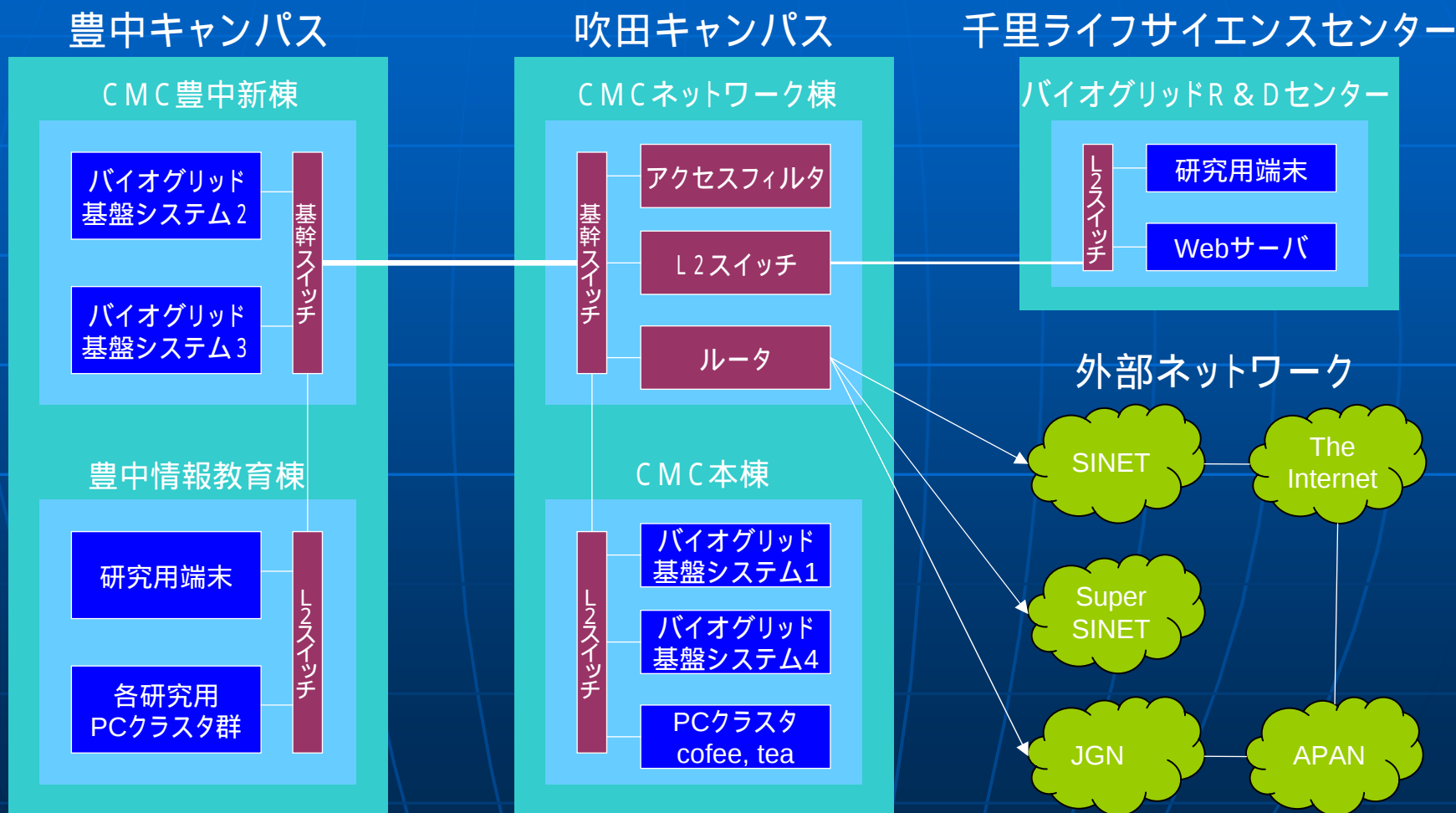
システムのご利用にあたって

- 大規模計算機資源の利用が可能
 - 78ノード 156CPU からのクラスタ・システム
 - 約15TB のネットワーク・ストレージ
- ユーザの様々な問い合わせにシームレスに対応
 - ヘルプデスクシステム
(<http://web.biogrid.osaka-u.ac.jp>)
- 定期保守日（毎月第4木，金曜日）
 - DISK のエラーチェック等実施
- 新規ご利用についてのお問い合わせ
 - NPO法人、運用窓口を通じてご連絡ください



来年度以降の グリッド基盤運用体制

主なバイオグリッド研究システム構成



研究成果の広域検証のためには

ソフトウェア・ネットワーク環境の調整・構築が必要

■ ソフトウェア

- OSやライブラリ、アプリケーション
 - バージョンの組み合わせ
 - 必要なソフトウェアのインストール
- 他の研究グループで使用されているソフトウェアとの競合

■ ネットワーク

- 帯域・経路・VLAN・IPv4・IPv6
 - 学内ネットワーク
 - 外部ネットワーク
- ネットワークフィルタ

→ これらは研究の本質ではない

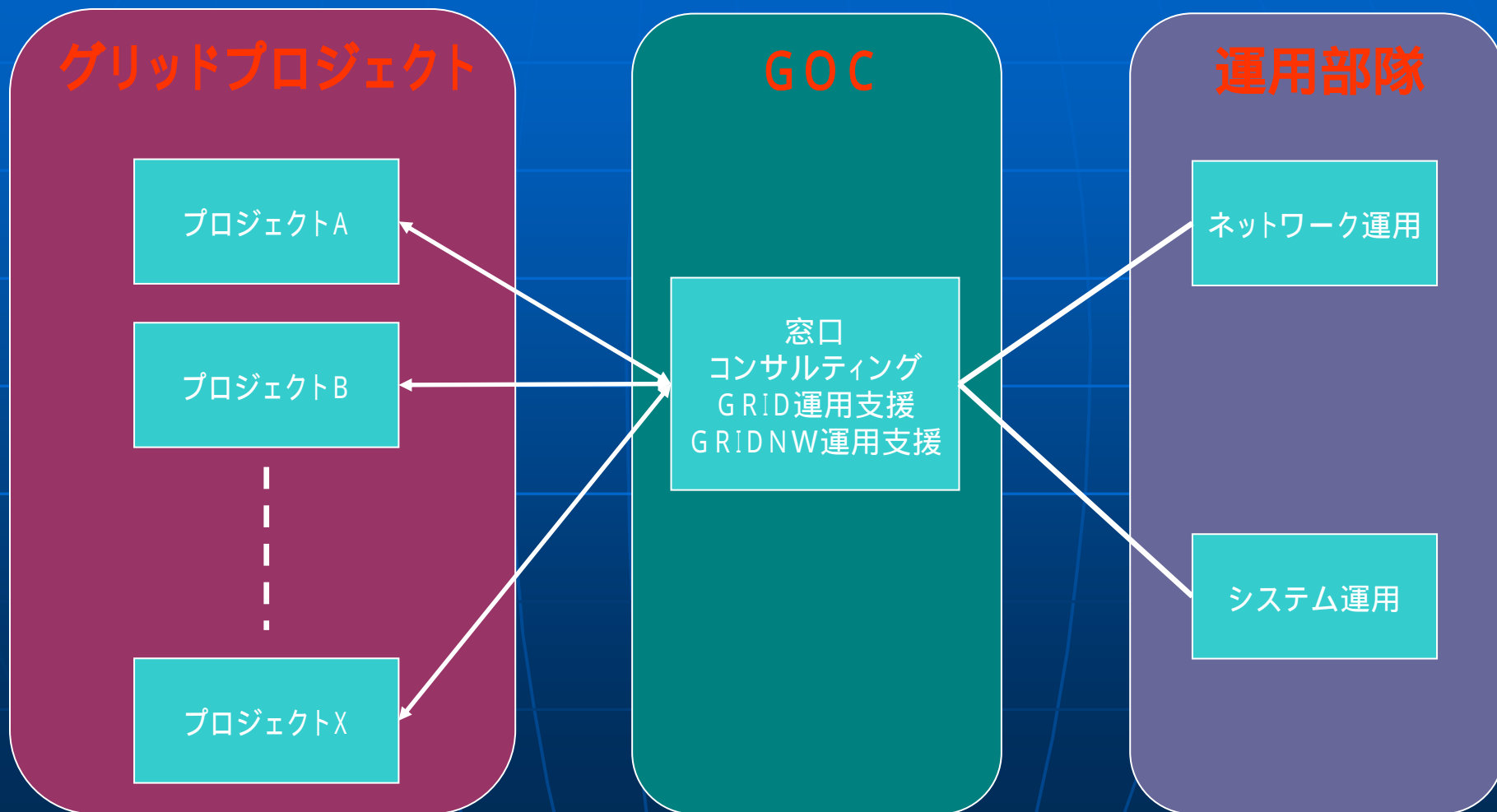
GOC(Grid Operations Center)構想

- バイオグリッド連携プロジェクトの増加
 - NaReGI, JGN , ASP, ...
 - 様々なアプリケーション環境の構築が必要
- 外部ネットワーク経路の複雑化
 - SINET, SuperSINET, JGN
 - 連携プロジェクトに応じて経路の設定が必要



GOCがグリッドの広域検証をバックアップ

GOC体制(2005年度)



GOCの役割

- ユーザ対応一次窓口業務
- グリッド基盤技術コンサルティング
- グリッドの研究・開発環境の構築・運用
 - ・ グリッドシステム
 - ・ ネットワーク
- ネットワークの情報提供
 - ・ トポロジ
 - ・ ネットワークフィルタ
 - ・ トラフィック
- 広域検証パートナー連携支援

グリッド基盤システム強化

- さまざまな研究環境に対応するための技術開発
 - 運用管理・監視強化
 - 統合Webによる操作性向上
 - スケジューラ強化
 - 利用予約機能
 - 環境切り替え
 - 予約に応じて環境を切り替えて起動

まとめ

- GOC設立による運用体制を整備
 - ・ バイオグリッド関連プロジェクトを包括的に運用
 - ・ 研究開発成果の実践的な展開
 - ・ グリッド基盤有効利用のための技術支援
- グリッドシステムの運用技術開発
 - ・ 分散複雑化するグリッドの最適環境を提供
- 新たなグリッド基盤技術の研究開発
 - ・ 先進的なグリッド基盤技術の提供

グリッドの基盤技術開発と安定運用

おわり