

課題名 (タイトル) :

ライフサイエンス系研究基盤の開発

利用者氏名 : 寺井 優晃

所属 : 横浜研究所 生命情報基盤研究部門

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

ライフサイエンス分野では、DNA やタンパク質の配列を既知配列のデータベース中から類似性を検索することにより、遺伝子の機能予測やタンパク質の立体構造予測が行われている。ポストゲノム以後、ライフサイエンスはさらに急速な進展を見せており、その背景として、次世代シーケンサ、イメージング等の計測技術の革新がある。生産されたデータは編纂され、理研サイエンス*1のような統合データベースに收容され公開されているが、これらデータベースを利用した二次データ加工の際に、膨大な計算処理が必要な場合が多い。

一般的に計算処理の最大必要量に応じて計算リソースを常時確保しておくことはコストが大きい。その為、想定される計算処理閾値の超過分を外部リソースにアウトソーシングすることで、システムのスケラビリティを確保する方法がある。概念は単純であるが、計算リソースとストレージが遠隔地間に配置されていた場合、そのストレージへのハンドリングがクリティカルな問題になりやすい。

遠隔地に配置されたリソースを連携させる試みは、以前はグリッド・コンピューティングとして、昨今はクラウド・コンピューティングとして規格化あるいは概念化されてきた。現在、和光本所と横浜研究所間には、1Gbps の広域イーサネットを利用することができ、今回これを積極的に利用することで、大規模な計算リソースとしてのスパコンと遠隔地に配置されたストレージの相互運用性向上を目的としたミドルウェアの開発及びシステム構築を行った。なお、これは理研サイエンスと RICC の連携システムの構築に必要な要素技術開発として行った。

*1) <https://database.riken.jp/>

2. 具体的な利用内容、計算方法

1) RICC内部VLANの横浜研究所への延伸

今回の試験環境は、計算リソースは和光に、データ

ベースは横浜研究所に配置されていることから、リモート間のデータのハンドリングがクリティカルな問題としてあった。今回は、この問題を解決する為に、1Gbps の広域イーサネットを用いて、RICC の内部 VLAN を横浜研究所まで延伸し、延伸した先にゲートウェイを設置し、そのゲートウェイと理研サイエンスを接続することで根本的な解決を図った (図 1)。なお、ゲートウェイは、情報基盤センターと生命情報基盤研究部門の間の責任分界点でもある。技術的な特徴としては、RICC の計算ノードから横浜研究所のターゲット・ストレージ宛の TCP パケットの転送に、当初ゲートウェイで SSH によるポートフォワーディングを用いていたが性能が出なかった為、NAPT(Network Address Port Translation)による方法を採用した。この試験環境の実測ネットワークスループットは 851[Mbps]、RTT は 1.6[ms]と、ローカルネットワーク並の性能が得られている。また、ミドルウェアには SSHFS と HPN-SSH を利用し、暗号化と非暗号化を使い分けることで、ネットワークスループットを稼いでいる。

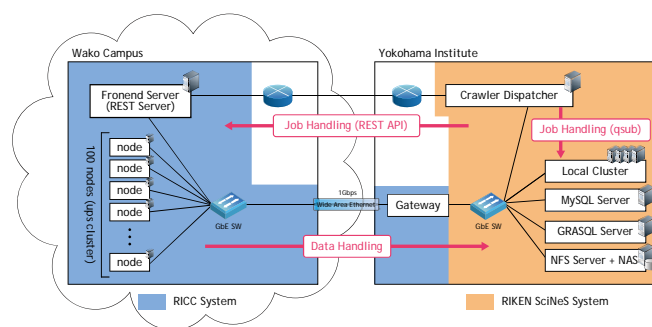


図 1 広域イーサネットを用いた RICC 内部 VLAN の延伸

2) RICCのRESTクライアント(JAVA版)の開発

RICC と理研サイエンスはそれぞれ自律的に運用されているシステムである。RICC 導入時に理研サイエンスのような外部システムとの相互運用性の向上が課題としてあった。一般的に、システムが持つインタフェースの要件としては、可用性及び汎用性が求められる。現在の RICC は、REST(Representational State Transfer)

とばれる HTTP のメソッドを利用した Web インタフェイスを実装しており、これを用いることで、リモートからのジョブのハンドリングを行った。

REST API を呼び出すクライアント・ライブラリ (Perl 版) は情報基盤センターより提供されているが、理研サイネシスは主に JAVA により構築されており、開発の親和性を高めるために、クライアント・ライブラリ (JAVA 版) の開発を行った。これは、REST API が提供するほとんどの機能をサポートしており、また JavaDoc 等のドキュメント整備も行い、パッケージ化されている。

今回開発したクライアント・ライブラリ (JAVA 版) の特徴を以下に示す。

- **認証機構**

RICC 利用時に発行されたアカウントを用いて認証が行える。特別な申請は必要ない。

- **ファイルのアップロード及びダウンロード**

ローカルに配置されたファイルを RICC にアップロードする機能及び RICC に配置されたファイルをローカルにダウンロードする機能を提供する。1 ファイル 2GB 以上のファイルに対応しています。現在最大 50GB まで対応可能である。

- **リモートに配置されたファイルのアーカイブ・圧縮・解凍機能**

ローカルで圧縮されたファイルをリモートで解凍する為の機能を提供する。また、リモートで計算された結果をアーカイブ・圧縮する機能も提供する。

- **ジョブの投入制御・ステータス取得**

ジョブ・スクリプトファイルによる投入だけでなく、コマンド名による直接投入も可能である。投入されたジョブは RICC 側のバッチ・システムにより効率的に処理される。投入されたジョブのステータス取得も簡単に行える。

- **RICC 上に配置されたファイルに対する各種ハンドリング**

UNIX のコマンドラインと同じように、ls、cp、mv、chmod、rm、find、grep 等が利用できる。

- **RICC の各種ステータス取得**

RICC は 8192 コアを搭載した巨大なシステムである。これら各クラスタ群のシステム利用率等をリアルタイムに取得することができる。

3. 結果

測定には、10GB のファイルを dd コマンドで作成に必要な経過時間を元にスループットを算出した。なお、横浜に設置されたターゲット・ストレージは NFS によってマウントされており、RICC の多目的 PC クラスタの計算ノードからアクセスした。また、キャッシュの影響を抑えるために、測定環境のサーバではすべての測定の度に sysctl を用いたクリアを行った。

図 2 に、広域イーサネットを用いた場合の同ターゲット・ストレージの Read/Write 性能を示す。最大 Read 性能が 29[MB/s]、最大 Write 性能が 22[MB/s] が得られた。同時実行数 (多重度) を 8 ジョブ程度まで大きくすると、スループットは低下したが 10[MB/s] 程度を得た。これまで広域イーサネットを積極的に用いてこなかったこともあるが、過去の実績を考慮しても相当高速な結果だと考える。

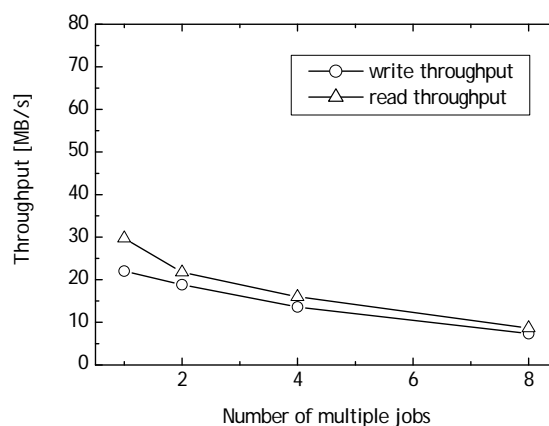


図 2 横浜側ストレージの Read/Write 性能
(広域イーサネット経由でのアクセス)

4. まとめ

RICC と外部システムを連携させる場合の相互運用性の向上を目的としたソフトウェア開発を行った。開発は完了し、アプリケーションを用いた実証試験も完了した。

5. 今後の計画・展望

RICC と外部システムを連携させる場合の相互運用性の向上を目的としたソフトウェア開発を行った。開発は完了し、アプリケーションを用いた実証試験も完了した。本プロジェクトは本年度を区切りとするため、利用の更新は行わない。

平成 21 年度 RICC 利用研究成果リスト

【その他】

Masaaki Terai, Yuko Yoshida, Norio Kobayashi, Yoshiki Mochizuki, Akihiro Matsushima, Motoyoshi Kurokawa, Takayuki Shigetani, Tsuyoshi Horiki, Ryutaro Himeno, Tetsuro Toyoda, *RIKEN SciNeS using RICC Supercomputer as Cloud Computing Infrastructure*, ASI-Yokohama Institute 連携フォーラム (2010).

