

格子QCDデータグリッド ILDG/JLDGの構築と運用

1. 格子(Lattice) QCD 計算の概要
2. データグリッドの意義
3. JLDG: Japan Lattice Data Grid
4. ILDG: International Lattice Data Grid
5. ILDG/JLDG の将来計画
6. サマリー



第3回データ科学ワークショップ

2010年11月25-26日

於 筑波大学計算科学研究センター

筑波大学計算科学研究センター 吉江友照

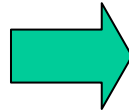


1. 格子QCD計算の概要

— 格子QCD計算の目的 —

QCD

quark と **gluon** の
強い相互作用の
基礎理論



ハドロン物理

ハドロン: 中間子 ($\pi \dots$)
バリオン (陽子 $\dots$)
グルーボールなど

QCDの第一原理にもとづく数値シミュレーションで

- QCD の検証
- QCD の基礎パラメータ (クォーク質量など)
- ハドロンの性質: 形状因子, EM 行列要素
 - ✓ 素粒子標準模型を越える理論の探査
- ハドロン相互作用: 崩壊, 散乱, 力

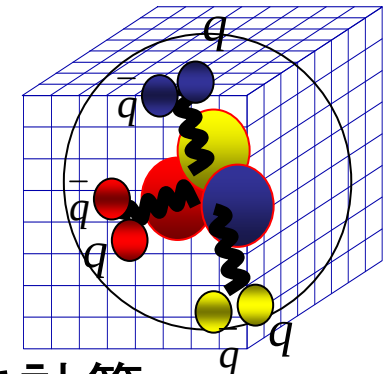
—格子QCDシミュレーションの概要—

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int dU \, O \det(D_{ud})^2 \det(D_s) \cdots \exp(-S_{gluon})$$

4次元時空を格子で離散化

分子動力学モンテカルロ法で経路積分を評価

- ✓ 多数の gluon 配位 **configuration** を生成
- ✓ 配位のセット **ensemble** に対して物理量の平均を計算
- ✓ 種々の物理パラメータの ensemble に関して計算を実行



シミュレーションの試みは1979年から、最近ようやく

quark-反quark の対生成・消滅を取り入れた近似無し
 QCD 計算が realistic な格子サイズ、格子間隔、quark
 質量に対して、可能になりつつある

計算規模: 1 ensemble の生成にスパコンで半年～1年

2. データグリッドの意義

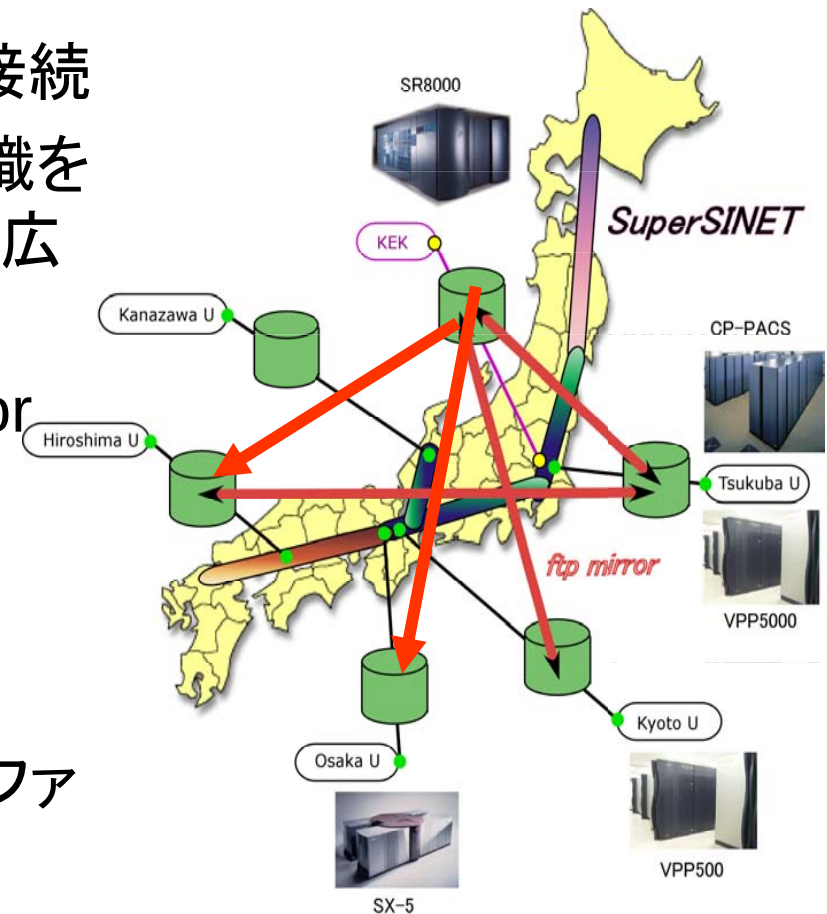
- QCD の ensemble/configuration は貴重
 - データ生成に膨大な計算資源を必要とする
 - 生成された ensemble を用いて、種々の物理量の計算(解析)が可能である
- 2種類のデータグリッド
 - 研究グループ内でのデータ共有
 - 複数の研究機関の研究者が研究グループを組織する
 - 遠隔地の複数のスパコンで、データ生成と解析を分担できる
 - Japan Lattice Data Grid (JLDG)
 - 世界規模での ensemble / configuration の共有
 - コミュニティ全体での研究の加速
 - International Lattice Data Grid (ILDG)

3. Japan Lattice Data Grid

—JLDG 以前の試み—

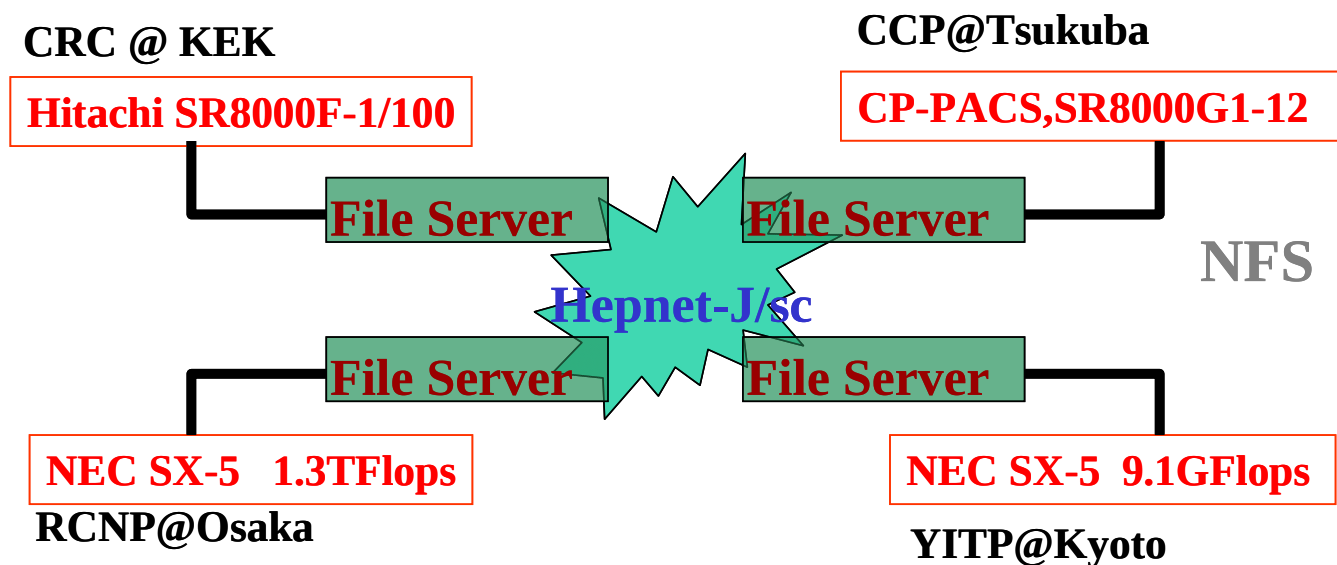
- HEPnet-J/sc 2002~
 - NII Super SINET GbE 専用線接続
 - 日本の主要な格子QCD研究組織を接続 (KEK, 筑波大, 京大, 阪大, 広島大, 金沢大)
 - high energy physics network for super computers

- 広域分散型ファイルシステム
 - 各拠点のファイルサーバー間でファイルをミラー



ーファイルミラーの key issueー

- 異なる管理体制を持つ組織をセキュリティを維持しつつ接続
 - file serverをデータ共有とファイアウォールとして使う
 - file server を supercomputer が nfs マウント, user login は禁止
 - 管理者がファイルサーバー間でデータミラーを作成 (rsync, cron)



- 初期段階では比較的うまくいった
 - CP-PACS/JLQCD (筑波, KEK, 広島)
 - KEK 大規模シミュレーション (KEK-RCNP 他)

—問題とその解決策—

- 問題

- ひと纏まりのデータが大きく、パーティションサイズを越える。
 - データが複数のディスクに分散してしまう。
 - ユーザーはデータが何処にあって何処にミラーされているか覚えきれない。
- user/group 認証がない(誰でもどのファイルでも読める。)
 - 複数研究グループのサポートに難

- 必要なもの

- 境界のないフラットなファイルシステム
- 拠点をまたがるユーザー管理 (仮想組織管理)

- Japan Lattice Data Grid

- 筑波大計算機工学者と各拠点の格子QCD研究者が協力

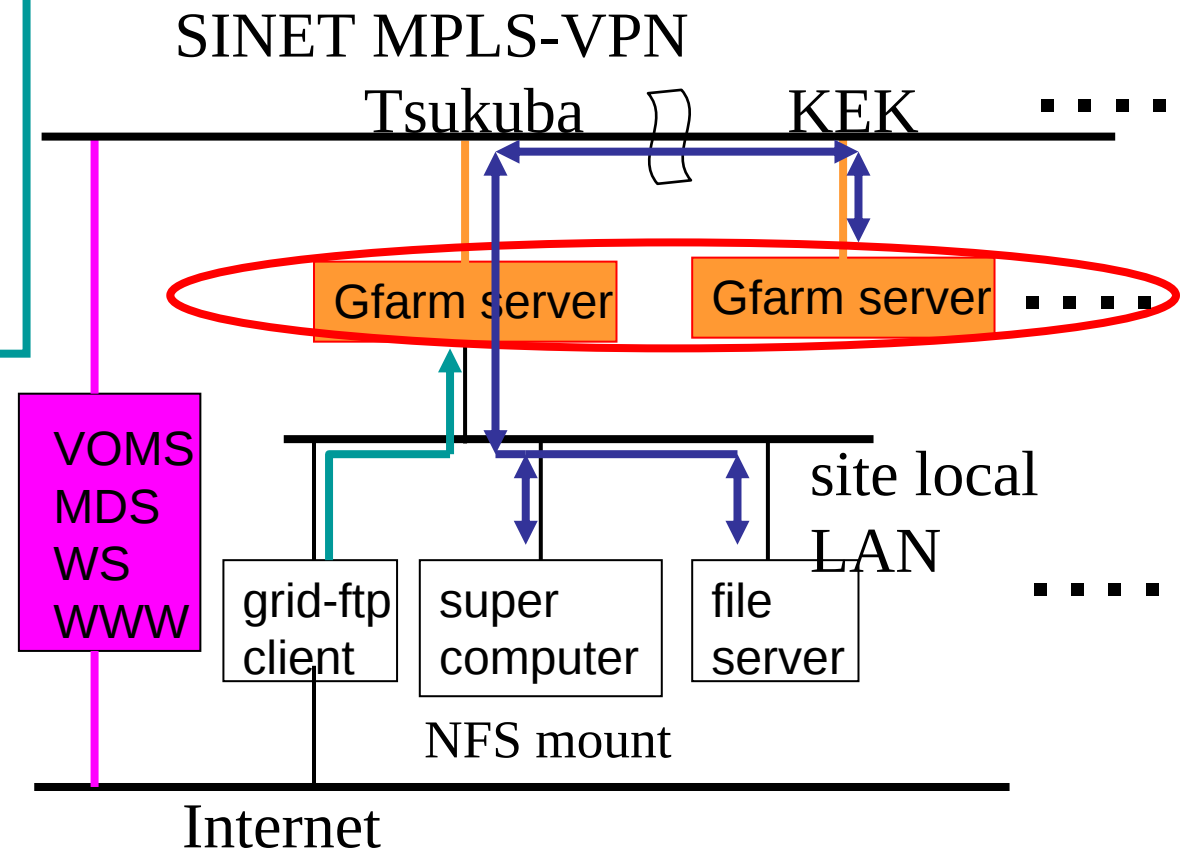
—JLDGの経緯とシステム概要—

• 経緯

- ✓ 2005/11より開発開始
- ✓ 2007/03 試験運用開始
- ✓ 2008/06 実運用開始
(一般公開データのみ)
- ✓ 同 ILDG との接続
- ✓ 2009/09 システム改修
(グループのサポート)
- ✓ 2009/12 研究グループ
による利用を開始
- ✓ 2010/08 機能向上

- grid-ftp client に login, 自サイトの server に接続
- file を持っている server から file が転送される
 - ユーザーは file がどの server にあるか知る必要はない

- **Gfarm** (AIST, Tsukuba): global file system
- VOMS (EDG): virtual organization management
- Naregi-CA : user certification (private)
- Globus Toolkit (ANL) : GSI- GridFTP
- uberftp (NCSA): interactive GridFTP client

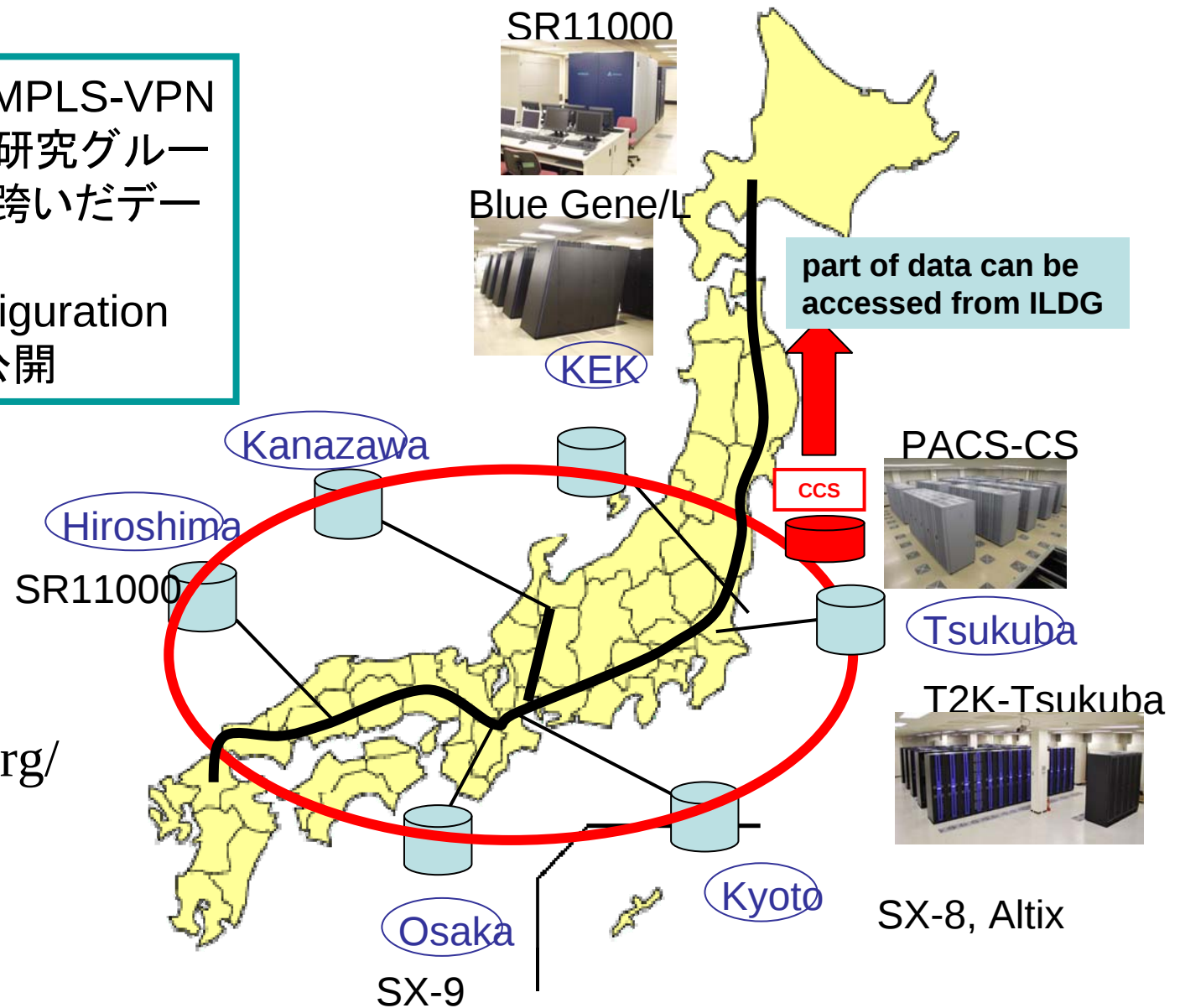


ーJLDG拠点とスパコン資源ー

- バックボーン NII MPLS-VPN
- 国内の格子QCD研究グループによる、拠点を跨いだデータ共有
- 格子QCDの configuration を国内外に一般公開



<http://www.jldg.org/>



—JLDGの運用—

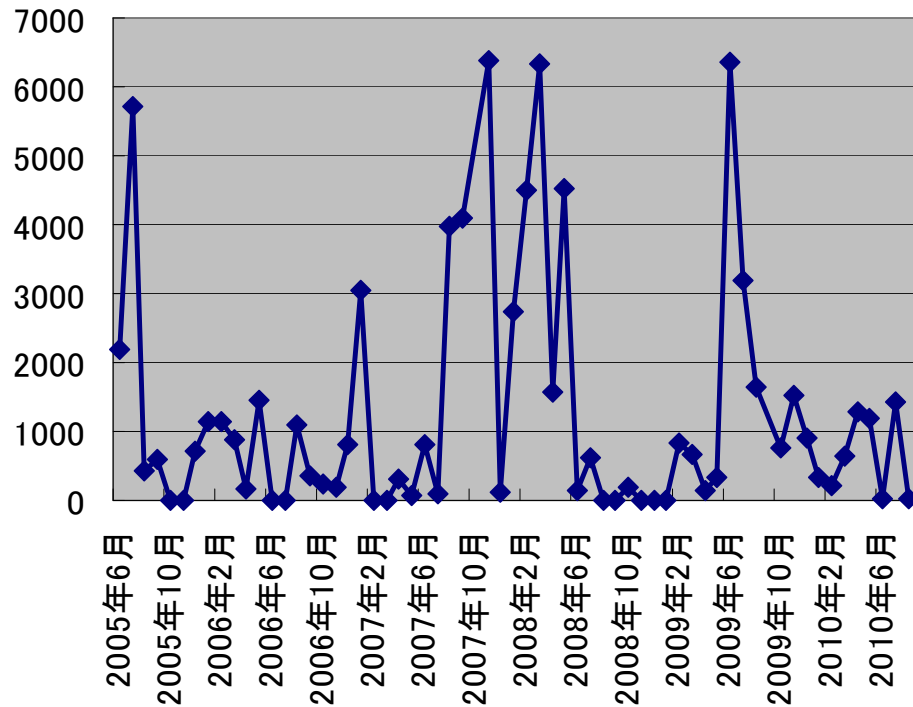
- 現在の研究(利用)グループ
 - pacscs: 筑波大中心の PACS-CS Collab. (含む3小グループ)
 - jlqcd: KEK中心のJLQCD Collab.
 - rcnp: 阪大 RCNP のユーザー (含む1小グループ)
 - npftqcd: npftqcd Collab (KEK, RCNP を利用)
 - jldg: 上記グループに所属しないユーザー
 - public: 配位データ一般公開用 (JLDG からのアクセス含む)
- ユーザー・グループ毎のアクセス制御
 - private CA によるユーザー認証と仮想組織管理
- 管理グループ
 - 拠点、利用グループの管理者
 - 管理・運用の議論・決定、ユーザー登録の受付
- セキュリティポリシー
 - Gfarm server と 管理サーバ (VOMS,MDS,WS,WWW) は管理者アカウントのみ
 - ユーザーは、client から grid-ftp でアクセス
- 予算
 - ILFTN, NII e-science, 新学術,

—JLDGの利用状況(1)—

- ディスク
 - 筑波 200TB (5台に分散)、
 - 他各6TB (KEK,RCNP,広島,金沢)、ほとんど 100% 利用
- ユーザー数とディスク使用量

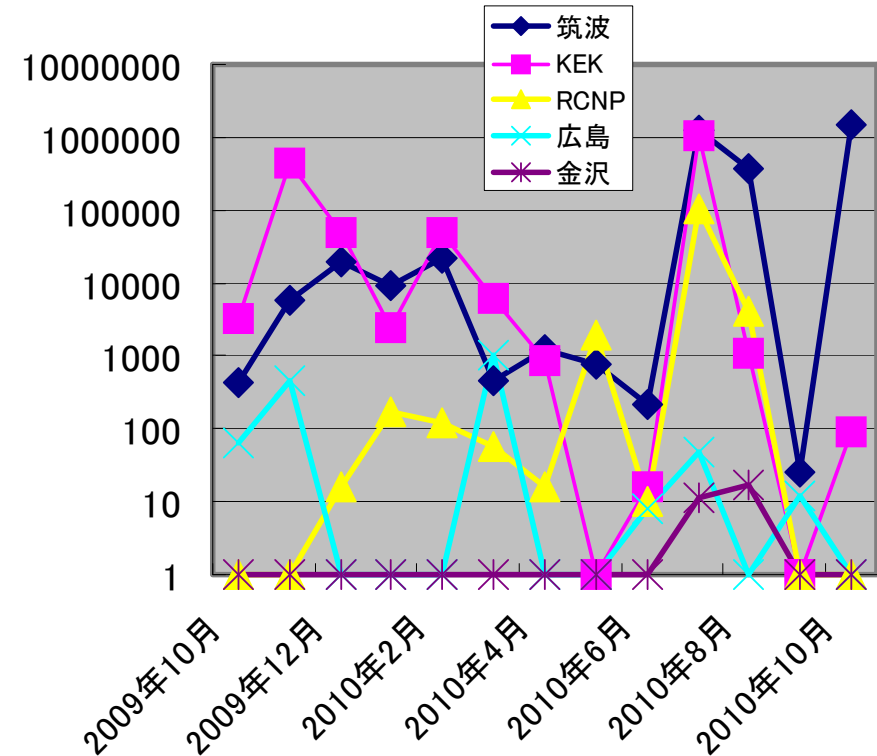
グループ	ユーザー数	ディスク使用量(TB)
pacscs	19	35
jlqcd	4	0
rcnp	4	0
npftqcd	7	2
jldg	15	
public	3	31
JLDG全体	52	68
ILDG経由	72	
計	124	68

—JLDGの利用状況(2)—



公開配位(configuration)のダウンロード数
JLDG 経由含む、旧システム含む

平均 1200配位/月、～ 1-2 アンサンブル



拠点毎のJLDGへのアクセス数

100万アクセスを越える月もある

—JLDGに携わる(った)人々—

13

所属は当時

- 筑波
 - 建部修見、天笠俊之、浮田尚哉、吉江友照
 - 宇川彰、佐藤三久、石井理修
- KEK
 - 松古栄夫
 - 金子敏明、橋本省二、鈴木聡、.... (HEPnet-J/sc)
- 大阪
 - 外川浩章
 - 芳賀昭弘
- 京都
 -
 - 大野木哲也、福村一三
- 広島
 - 石川健一
- 金沢
 - 武田真滋
 - 出渕卓
- 利用グループより
 - 駒佳明(沼津高専)
- メーカー
 - 日立製作所、SRA, 他

4. International Lattice Data Grid

14

—ILDG の概念(1)—

- ensemble/configuration の共有
 - ensemble を生成したグループが、自分たちが興味ある物理量の計算が終わったら、他のグループに使ってもらってもよい、と考える研究者は多い。(共同研究が始まる場合もある)
- ILDG 以前
 - ensemble を提供する研究グループは
 - ✓ ensemble (configuration のセット)を何処かに置いて、
 - ✓ それを生成した物理パラメータ(メタデータ)や、データフォーマットのドキュメントを書いて、
 - ✓ それらを引き渡す
 - ensemble を利用する研究グループは
 - ✓ ensemble やドキュメントを受け取り、
 - ✓ データフォーマット等を理解して、自分達のフォーマットに変換し、
 - ✓ 利用する

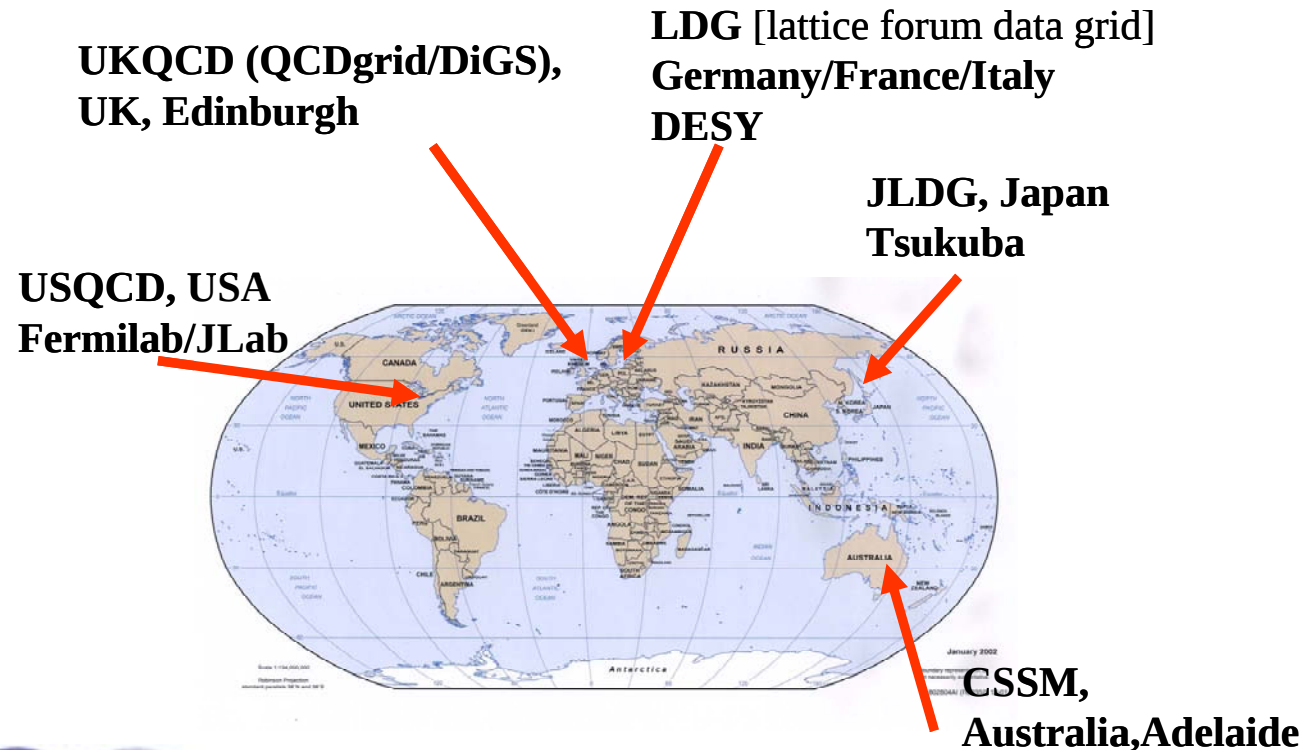
—ILDG の概念(2)、経緯と経過—

- ensemble/configurationを世界規模で共有する為の data grid
 - 共有してもよい ensemble を grid に蓄積
 - メタデータ記述、データ交換用のフォーマットの標準化
 - ensemble 共有手順の簡素化
- 経緯と経過
 - 構想の提案 R.Kenway (EPCC, Edinburg) in 2002
 - 2つのworking groups, ILDG board、年2回のワークショップ
 - 地域グリッドの構築とその相互運用
 - 相互運用可能な ILDG が 2007年7月稼働開始

ー ILDG に接続する 5つの地域グリッドー

16

- 複数の地域グリッドを接続した **Grid of Grids**
 - ー 共通の interface を通しての相互運用
 - ー 地域グリッドの構築が既に進んでいたため



<http://www.lqcd.org/ildg>

—規約の策定と技術開発—

metadata WG

- ✓ ensemble/configuration の metadata記述言語策定
 - QCDml: XML based markup language
- ✓ データとメタデータの連携
 - ensemble/configuration の定義
 - file/binary format の策定

middleware WG

- ✓ 地域グリッド間interfaceの策定と実装
 - metadata search
 - locating files
 - download protocol
- ✓ データ検索や download のクライアントソフトの開発

両WGに計算機工学者と格子QCD研究者が参加、共同で開発

ILDG board, supervise WGs, organize WS,.....

- **Metadata Working Group**

P.Coddington (Adelaide), T.Yoshie (Tsukuba), D.Pleiter(DESY) ,
G.Andronico (INFN), C.Maynard (Edinburgh), C.DeTar (Utah),
J.Simone (FNAL), R.Edwards, B.Joo (JLAB)

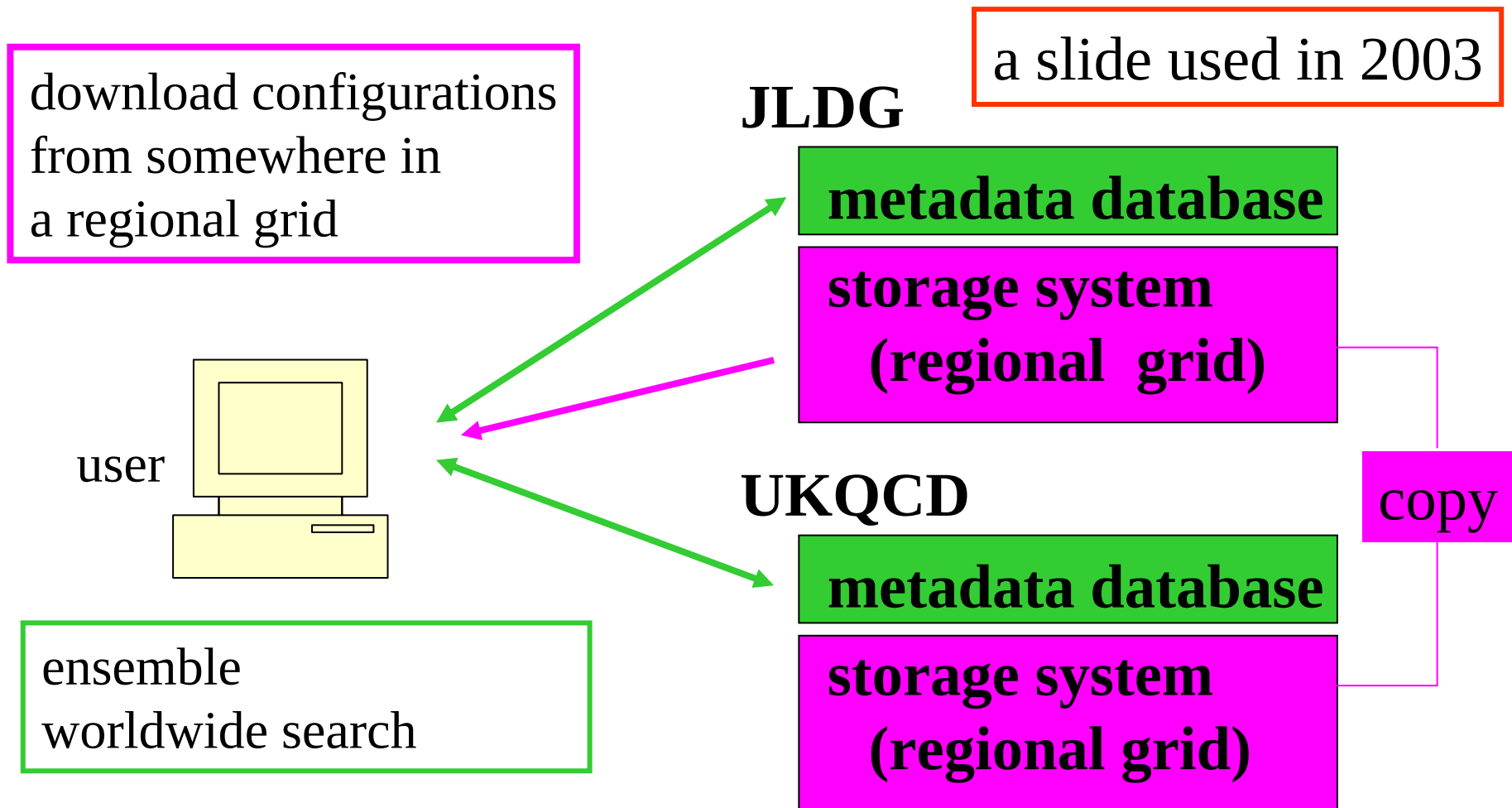
- **Middleware Working Group**

P.Coddington, S.Zhang (Adelaide), T.Amagasa, O.Tatebe. M.Sato
(Tsukuba), D.Melkumyan, D.Pleiter (DESY), G.Beckett, R.Ostrowski
(Edinburgh), J.Simone (FNAL), B.Joo, C.Watson (JLAB)

- **ILDG board**

R.Brower (USA), K.Jansen (Germany), R.Kenway (UK),
D.Leinweber (Australia), B.Blossier (France), F.Di Renzo (Italy),
A.Ukawa and T.Yoshie (Japan)

— ILDG の グランドデザイン —

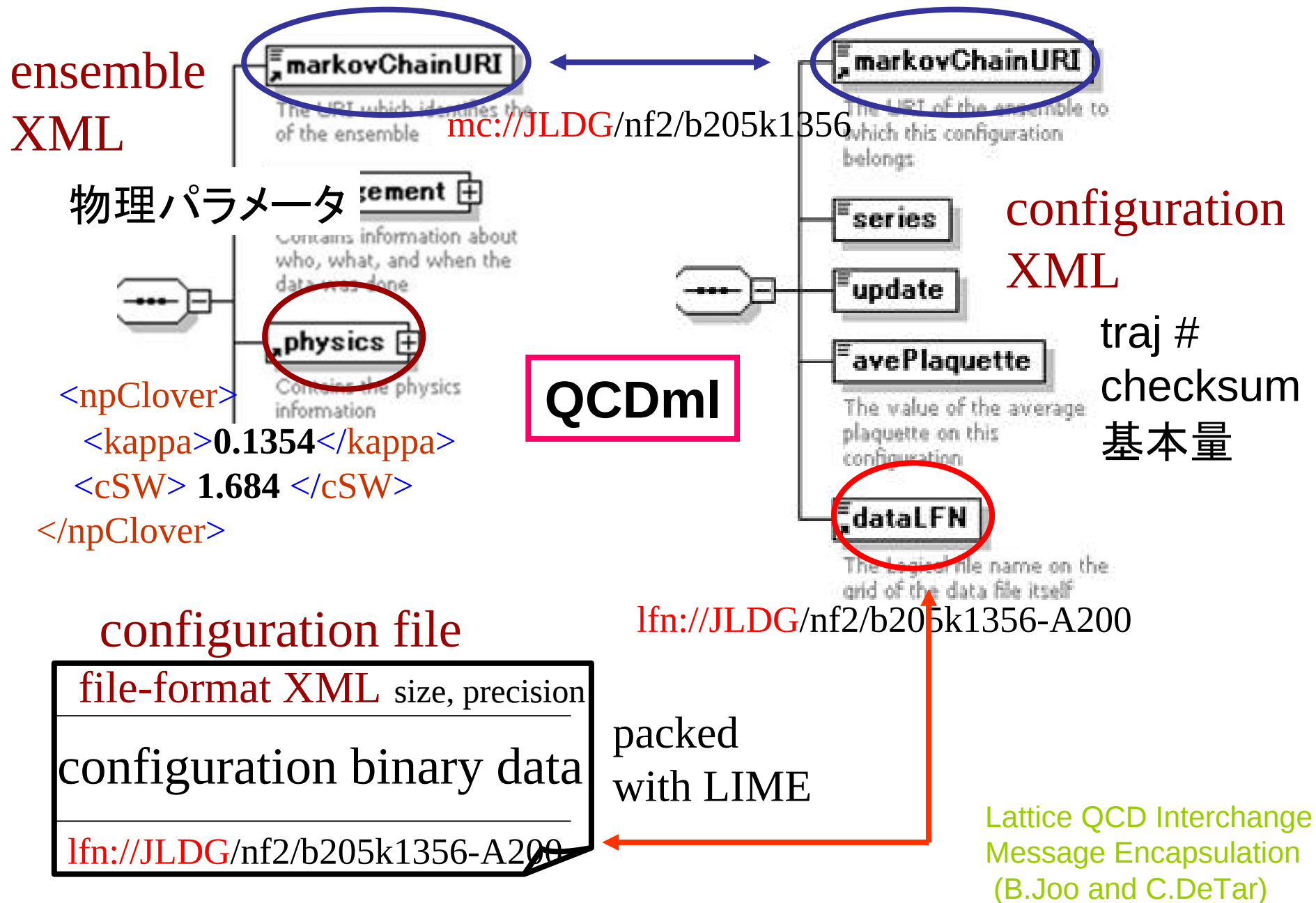


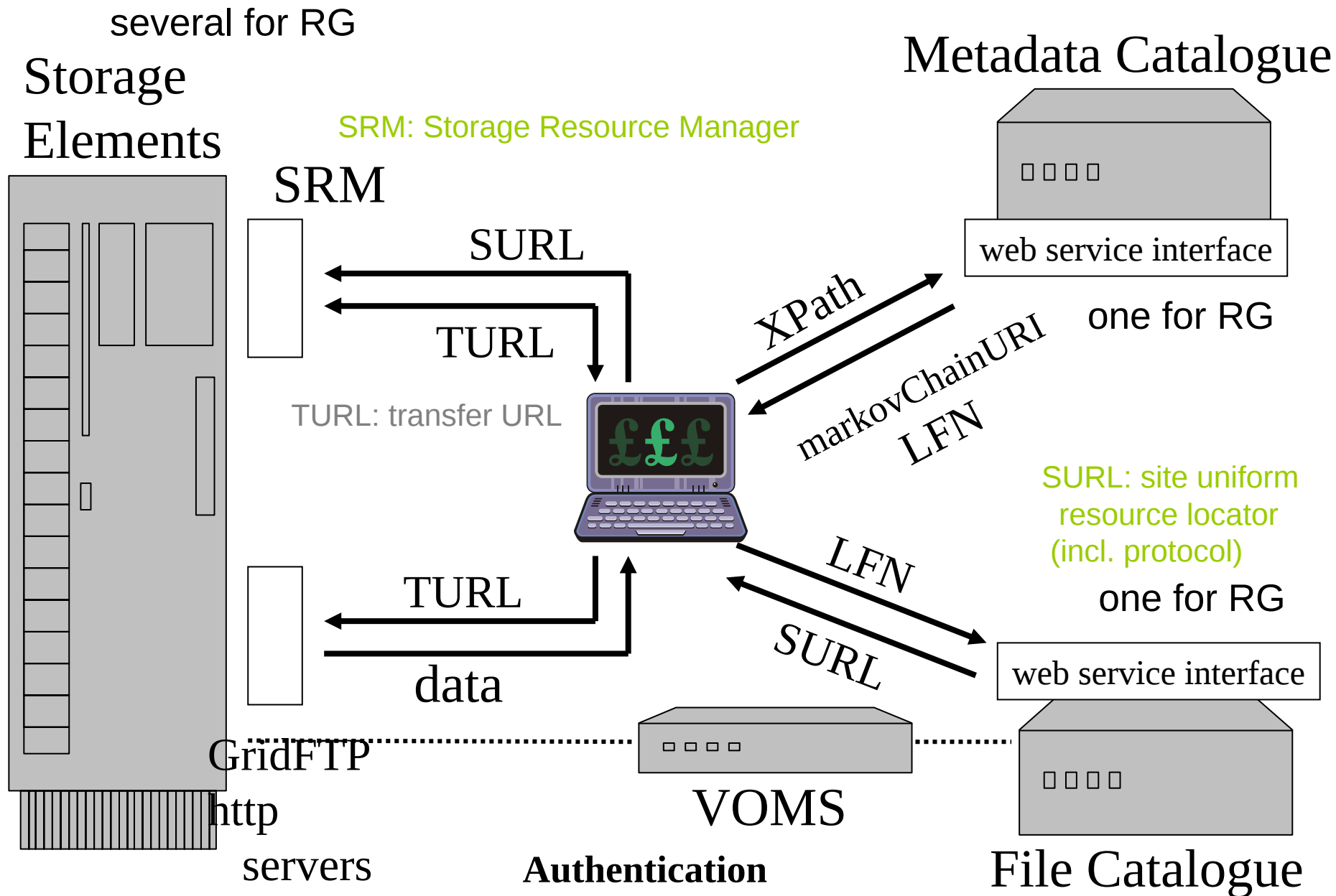
metadata:

identity information of ensemble/configuration (collaboration/project, physics parameters (lattice size, quark mass.....), literature)

ーデータメタデータ要素ー

20





—その他の要素—

• VOMS

- ILDG user とその役割/所属グループのデータを保持
- グループ (~ regional grid) 単位でのファイルアクセス制限が可能
- ユーザー登録: 公式 CA の証明書、地域グリッド代表による認証、必要

• Services.xml

- 地域グリッドの catalogue service や storage elements の URL を保持するマスターファイル

• INCA monitoring system

- <http://www.sapac.edu.au/inca>

	localResource
ildg.fc.unittest_cssm	error
ildg.fc.unittest_jldg	pass
ildg.fc.unittest_ldg	error
ildg.fc.unittest_ukqcd	error
ildg.fc.unittest_usqcd	pass
ildg.mdc.unittest_cssm	pass
ildg.mdc.unittest_jldg	error
ildg.mdc.unittest_ldg	pass
ildg.mdc.unittest_ukqcd	pass
ildg.mdc.unittest_usqcd	pass
ildg.se.unittest_cssm_sasr.edu.au_gsiftp	246.45KByte/s
ildg.se.unittest_cssm_sasr.edu.au_srm	20.54KByte/s
ildg.se.unittest_jldg_jldg.org_gsiftp	277.72KByte/s
ildg.se.unittest_ldg infn.it srm	157.54KByte/s
ildg.se.unittest_ldg rug.nl srm	29.78KByte/s
ildg.se.unittest_ldg_fz-juelich.de_srm	144.57KByte/s
ildg.se.unittest_ldg_ifh.de_srm	145.14KByte/s
ildg.se.unittest_ldg_in2p3.fr_srm	162.4KByte/s
ildg.se.unittest_ldg_zib.de_srm	142.89KByte/s
ildg.se.unittest_ukqcd_epcc.ed.ac.uk_gsiftp	error
	localResource
ildg.se.unittest_ukqcd_iris.soton.ac.uk_gsiftp	1577.59KByte/s
ildg.se.unittest_usqcd_fnal.gov_srm	error

ー地域グリッドサマリー

Grid	#site	storage elements (regional grid)	Catalogue	comments
CSSM	1	dCache 7TB	Adelaide	web site, INCA
JLDG	6	Gfarm 100TB	Tsukuba	
LDG	6	dCache huge	DESY	VOMS
UKQCD	7	DiGS 80TB	Edinburgh	
USQCD	2	dCache huge	JLAB	

dCache: distributed data storage caching system
developed by a joint collab. of DESY and FNAL

2009年5月現在

gfarm: grid data farm
developed at AIST and Tsukuba

DiGS: distributed grid storage
developed at EPCC, Edinburgh

—ユーザーインターフェース(1)—

- web page での ensemble 検索
- command line download command **ildg-get**

ILDG List Ensembles

[LDG Home](#)
[List](#)
[Ensembles](#)

- mc://USQCD/LHPC/aniso/wilson/NF2/wl_16_64_5p5_x2p38_um0p4086 [usqcd]
- mc://USQCD/LHPC/aniso/wilson/NF2/wl_16_64_5p5_x2p38_um0p4125 [usqcd]
- mc://USQCD/LHPC/aniso/wilson/NF2/wl_24_64_5p5_x2p38_um0p4086 [usqcd]
- mc://USQCD/LHPC/aniso/wilson/NF2/wl_24_64_5p5_x2p38_um0p4125 [usqcd]



Show Ensemble

markovChainURI=mc://ldg/etmc/tmqcd_nf2/tSym_b3.75_L24T48_k0.1660_mu0.0200, grid=ldg

[LDG Home](#)
[Show XML](#)
[List Configs](#)
[List Ensembles](#)

Management

Collaboration: etmc
 Project name: tmqcd_nf2
 Archive History: action = add; participant = Carsten Urbach (University of Liverpool); date = 2006-07-02T17:28:47+02:00;

Physics

Size: X = 24; Y = 24; Z = 24; T = 48;
 Gluon: treelevel Symanzik improved action
 beta = 3.75 c0 = 1.6666666700000001; c1 = -0.08333333329999999
 Quark [# 1]: Twisted mass action
 kappa = 0.166; mu = 0.02; numberOfFlavours = 2

Algorithm

Name: mthHMC
 Glossary: <http://www-zeuthen.desy.de/latfor/ldg/algorithmGlossaries/mthHMC.pdf>
 Reference: Comp.Phys.Commun. Vol 174/2 pp 87-98
 Exact: true
 Parameters: integrationScheme = Sexton-Weingarten

LDG Portal



<http://www-zeuthen.desy.de/latfor/ldg/mdc/>

—ユーザーインターフェース(2)—

- faceted navigation による絞り込み検索
 - JLDG 提供、天笠氏作成
 - facets: categories of XML documents

QCDml Faceted Navigation

Filter Condition(s):

>>

clear conditions

Ensemble(s) (261):

#1 [12/12/12/24] mc://JLDG/CP-PACS, iwasakiRGGluonAction (beta=1.800) tpCloverQuarkAction (nf=2/kappa=0.140) [Show XML] [Show LFNs]

#2 [12/12/12/24] mc://JLDG/CP-PACS, iwasakiRGGluonAction (beta=1.800) tpCloverQuarkAction (nf=2/kappa=0.143) [Show XML] [Show LFNs]

#3 [12/12/12/24] mc://JLDG/CP-PACS, iwasakiRGGluonAction (beta=1.800) tpCloverQuarkAction (nf=2/kappa=0.144) [Show XML] [Show LFNs]

#4 [12/12/12/24] mc://JLDG/CP-PACS, iwasakiRGGluonAction (beta=1.800) tpCloverQuarkAction (nf=2/kappa=0.146) [Show XML] [Show LFNs]

#5 [16/16/16/32] mc://JLDG/CP-PACS, iwasakiRGGluonAction (beta=1.950) tpCloverQuarkAction (nf=2/kappa=0.137) [Show XML] [Show LFNs]

#6 [16/16/16/32] mc://JLDG/CP-PACS, iwasakiRGGluonAction (beta=1.950) tpCloverQuarkAction (nf=2/kappa=0.139) [Show XML] [Show LFNs]

Facets:

rgrid

ossm (22)

JLDG (64)

ldg (130)

ukqcd (9)

USQCD (39)

www.lqcd.org (1)

collaboration

CP-PACS (12)

CP-PACS+JLQCD (30)

OSSM (22)

dik (2)

etmc (54)

JLQCD (6)

LHFC (8)

MLG (31)

PACS-CS (6)

qcdsf (67)

RBC-UKQCD (9)

theta (7)

UKQCD (7)

projectName

2+1 DWF (9)

2+1 Dynamical AsqtAD (31)

asqtad.3264.b7095.Jong (1)

Baryon Resonances (1)

clover.nf2 (36)

clover.nf2p1 (39)

Dynamical FQC Studies (2)

Electromagnetic Form Factors (1)

FQC Overlap Studies (5)

Flux Tube Test (1)

Gluon Propagator (6)

Long asqtad run (2)

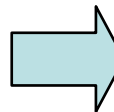
Pentaquark Volume Dependence (1)

Quark Propagator Studies (3)

RCONF2 (NF=2 full QCD with iwasaki RG gauge and tadpole improved clover quark action) (12)

RCONF2+1 (NF=2+1 full QCD with iwasaki RG gauge and non-perturbatively O(a) improved wilson (clover) quark action) (36)

RgDwtNF2 (NF=2 full QCD with iwasaki RG gauge and overlap quark action with topology fixing extra Wilson



QCDml Faceted Navigation

Filter Condition(s):

>> rgrid=JLDG >> collaboration=PACS-CS

clear conditions

Ensemble(s) (6):

#1 [32/32/32/64] mc://JLDG/PACS-CS, iwasakiRGGluonAction (beta=1.900) npCloverQuarkAction (nf=2/kappa=0.137) [Show XML] [Show LFNs]

#2 [32/32/32/64] mc://JLDG/PACS-CS, iwasakiRGGluonAction (beta=1.900) npCloverQuarkAction (nf=2/kappa=0.137) [Show XML] [Show LFNs]

#3 [32/32/32/64] mc://JLDG/PACS-CS, iwasakiRGGluonAction (beta=1.900) npCloverQuarkAction (nf=2/kappa=0.137) [Show XML] [Show LFNs]

#4 [32/32/32/64] mc://JLDG/PACS-CS, iwasakiRGGluonAction (beta=1.900) npCloverQuarkAction (nf=2/kappa=0.137) [Show XML] [Show LFNs]

#5 [32/32/32/64] mc://JLDG/PACS-CS, iwasakiRGGluonAction (beta=1.900) npCloverQuarkAction (nf=2/kappa=0.137) [Show XML] [Show LFNs]

#6 [32/32/32/64] mc://JLDG/PACS-CS, iwasakiRGGluonAction (beta=1.900) npCloverQuarkAction (nf=2/kappa=0.137) [Show XML] [Show LFNs]

Facets:

rgrid

JLDG (6)

collaboration

PACS-CS (6)

projectName

RCONF2+1 (NF=2+1 full QCD with iwasaki RG gauge and non-perturbatively O(a) improved wilson (clover) quark action) (6)

date

2009 (6)

size

32/32/32/64 (6)

numberOfFlavours

2+1 (6)

gluon

iwasakiRGGluonAction (6)

quark

npCloverQuarkAction (12)

beta

1.900 (6)

kappa

0.1364000 (5)

0.1366000 (1)

0.1370000 (1)

0.1372700 (1)

0.1375400 (2)

0.1377000 (1)

0.1378100 (1)

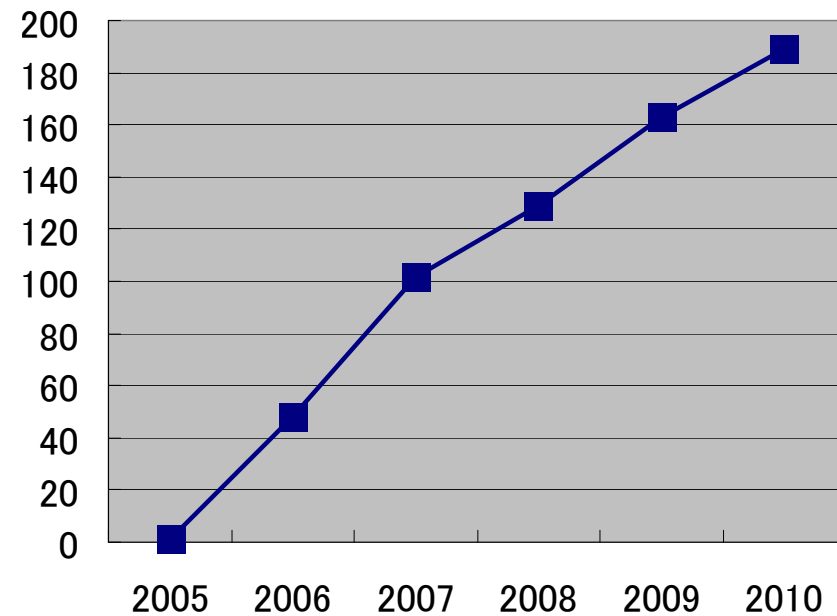
mass

mu

—ILDG の利用状況—

Grid	#member	#ensemble
CSSM	7	22
JLDG	5	54
LDG	81	130
UKQCD	33	9
USQCD	19	39
total	145	254

configuration数: 約28万
実データサイズ: 約60TB
• 2008年の情報の外挿



ensemble 数の推移

5. ILDG/JLDG の課題と将来計画

—ILDG—

- 配位投入手順の簡素化
 - 配位投入は(一般の研究者には)ハードルが高い
 - ensemble/configuration metadata の markup
 - (configuration) metadata capture project 進行中
- クォーク伝搬関数の共有
 - 物理量を計算する際、最も計算コストがかかる
 - configuration の 10~100 倍のデータ量
 - 規約の策定
- 統計情報・成果情報の取得と蓄積
 - 対外アピール(予算獲得等)に必要
 - 統計情報: 原理的には可能
 - 成果情報: 報告義務を課していないので網羅は困難

—JLDG—

- 他拠点への伸張
- 利便性の向上
 - 現在は grid-ftp のみ (セキュリティ維持のため)
 - client (スパコン login node) から gfarm ファイルシステムをマウントして使いたい
 - セキュリティ維持が課題
- 運用・保守
 - 現在はボランティア(他に本業がある)
 - 維持管理の負担は軽くない
 - 外注を検討(恒常的予算が必要)
- 耐故障性の向上
 - ファイル複製 (gfarm の機能)
 - 管理機器の二重化
- 他分野への展開

6. サマリー

JLDG/ILDG が格子QCD研究にもたらしたもの

- 地域グリッド (Japan Lattice Data Grid)
 - 異なる組織に属する研究者が研究グループを構成し、(事実上)無限のディスクスペースの上でデータを共有しつつ、共同研究を実施できる様になった
- International Lattice Data Grid
 - 独立な研究グループがそれぞれの目的で生成した ensemble/configuration データが、格子QCD コミュニティーの共有資産として蓄積され、
 - そのデータを用いて、種々の物理量を計算する事によって、新たな研究が生まれている

格子QCD研究のインフラストラクチャ

ILDG/JLDG を成功に導いたもの

- 物理(ニーズ)と計算機工学(シーズ)の研究者の緊密な協力
- 多くの会話
 - 多機関に跨るプロジェクトでは、特に重要
 - 全員が一堂に会する機会はほとんどない
 - 短くてもよいから頻繁にTV/電話会議
 - メールリスト上で合意形成を促進する工夫
- 少しの(多くの)妥協
- 必要最小限の設計