

NetSolve の調査 青井 桂子

1 今月の課題

- NetSolve システムのマニュアル作成
- NetSolve の Web ページの作成
- タンパク質用語集作成
- NetSolve Farming の調査

2 NetSolve システムのマニュアル作成

GridAPI の一つである NetSolve システムに関するマニュアルを作成した。マニュアルでは NetSolve システムのインストール, Server と Client での環境設定, システムの起動, Server の機能拡張, Client 側で用いる API の紹介などを行った。

3 NetSolve の Web ページ作成

NetSolve 関連の Web ページを作成した。具体的には, NetSolve システムの概要, インストールメモ, アプリケーション使用時のメモなどのページを作成した。

4 タンパク質用語集作成

タンパク質の基本用語, タンパク質の立体構造の研究に関する用語集を作成した。

5 NetSolve Farming の調査

NetSolve Farming は NetSolve システムでの並列実行要求を行う場合に用いられる機能である。

5.1 NetSolve

NetSolve では遠隔地にある計算資源にアクセスすることができ, 遠隔地のコンピュータに最適化されたライブラリを使用することができる仕組みを兼ね備えている。

NetSolve は, 計算資源を提供する Server, 計算資源を利用する Client, その間を取り持つ Agent から構成されている。Client は Agent に問題の Request を行うことにより, Agent の最適な判断によって, 最適な計算資源 (Server) を利用することができる。Fig. 1 に NetSolve システムの概念図を示す。

5.2 NetSolve Farming の利点

引数の内容は異なるが同じ命令を複数実行させるような並列処理を行う場合, Client が何度も Server に実行要求を行うのは非効率的である。このような類似処理を一括に行えるようにするのが NetSolve Farming である。

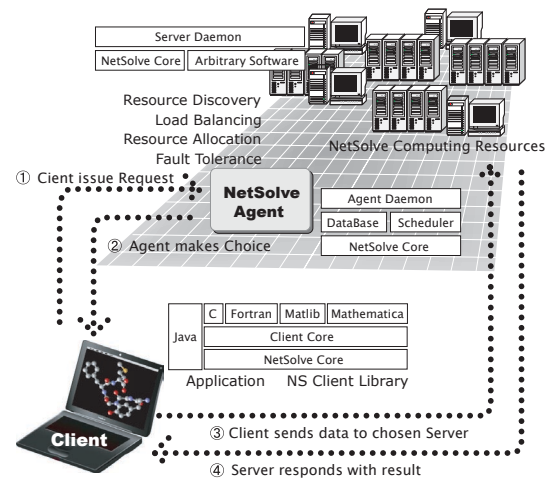


Fig. 1 NetSolve システム

これまで NetSolve の API として Client 側で用いていた関数では, 一つの実行要求を行った場合に Server での実行が終了して Client に値を返すまで次の実行要求を行うことができなかった。

このため, これまでの関数を用いて並列処理を Server で実行させたい場合, 以下のように Client 側で複数のプロセスを立ち上げて各々のプロセスが NetSolve の実行要求を行う必要があった。

```
request1=netslnb('iqsort',size1,ptr1,sorted1)
request2=netslnb('iqsort',size2,ptr2,sorted2)
request3=netslnb('iqsort',size3,ptr3,sorted3)
(以下略)
```

NetSolve Farming 機能では, 上記に示した複数の命令群と同様の命令を "netsl_farm" 関数を用いて以下のように記述できる。

```
status_array = netsl_farm("i=0,10",'iqsort',
netsl_int_array(size_array,"$i"),
netsl_ptr_array(ptr_array,"$i"),
netsl_ptr_array(sorted_array,"$i"));
```

6 今後の課題

- NetSolve Farm を用いて現在の PSA/GAc の Client プログラムを書き換える
- NetSolve を用いた PSA/GAc のデータ取りを行う
- CASP5 にエントリーする
- タンパク質の文献調査