

Grid における最適化システムの構築 片浦 哲平

1 はじめに

近年、遠隔地の計算資源を結びつけ、ひとつの巨大なコンピュータとして有効活用する Grid に関する研究が盛んに行われている。Grid はスーパーコンピュータの計算性能を超える大規模計算機、テラバイト級の大規模データを格納できる巨大なデータベースとなる可能性を持っている。本研究では、Grid を想定した最適化システムの提案を行っている。提案するシステムはデータを格納する Database Server、近似計算を行う Approximation Server、解析計算を行う Analysis Server、そして、それらをコントロールするための Control Server から構成される。最適化計算に必要な評価値の導出は、計算シミュレーション、データサーバに格納済みデータ、データサーバのデータからの近似値を利用することが可能である。また、本研究では、最適化手法に遺伝的アルゴリズムを、対象問題はタンパク質立体構造予測問題を扱う。

2 提案する最適化システム

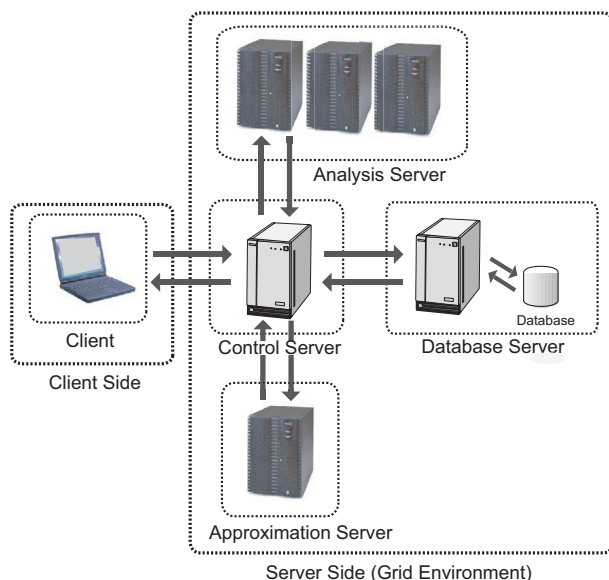


Fig. 1 提案システム

提案システムを Fig. 1 に示す。提案システムは、Client、Function Agent、Database Server、Analysis Server、Approximation Server から構成される。それぞれの役割は以下の通りである。

- Client



Fig. 2 Database Server

Client は、最適化手法の最適化計算部分を担う。最適化手法は決定論的手法と確率的手法に分類されるが、どちらの手法も実装することができる。本研究では、遺伝的アルゴリズムを実装する。

- Control Server

Control Server は、各サーバから送られてくる情報を振り分ける役割をする。

- Database Server

Database Server は、一度計算された目的関数の評価値と実際の実験によって得られた結果を格納する。未評価の個体を Database Server で検索し検索に成功した場合には、目的関数値を Client に送信する。検索に失敗した場合には、Analysis Server に評価を依頼する。また、データベースに格納された情報を Fig. 2 に示すように視覚的に検索できる仕組みを実装する。

- Analysis Server

Analysis Server は、Database Server が検索に失敗した場合に Control Server から送信される情報をもとに目的関数の評価を行う。目的関数値が求められると Control Server に送信する。

- Approximation Server

Approximation Server は Client による最適化計算が停滞した場合に、Control Server から送信される Database Server の情報をもとに近似計算を行い新たな個体を生成する。

2.1 データベース

データベースは、個体の染色体の情報と設計変数値、それに対応した個体の適合度が格納されている。染色体は0,1の遺伝子で構成されており、検索は遺伝子または設計変数値のマッチングにより行う。データベースに検索対象となる染色体が存在した場合には、その染色体の適合度を返す。失敗した場合には、検索対象となる染色体の評価計算を行う。

2.2 近似計算

近似計算は、進化計算が停滞した場合に、データベースの情報から近似を行うことで新しい個体を作り出す操作である。近似方法には、線形近似や応答局面法を実装する予定である。

2.3 提案システムの利点

提案システムの利点を以下に述べる。

- データベースを利用することで個体の重複計算を省くことができる。
- 近似計算にを行うことで進化計算の停滞を防ぐことができる。
- 評価計算、最適化計算など各コンポーネントが独立に存在するため並列分散処理することができる。

3 システム構築のための技術

提案システムには、Web サービス技術を用いる。Web サービス技術について説明する。

3.1 SOAP

サービス利用者と、サービス提供者が数値や文字、あるいは複雑な業務データを正確に受け渡しするには、交換するメッセージの形式を決定する必要がある。このメッセージの形式を定めたものがSOAPである。SOAPは、XMLを利用して記述される。

3.2 WSDL

サービス提供者がサービスを公開する際に Web サービスの定義を記述する必要がある。WSDLは、XMLを利用してどのような業務データをどのように送るかというインターフェースの情報や、実際のサービスの提供場所 (URL) などの情報を記述する。

3.3 UDDI

サービス提供者がサービスを公開しサービス利用者がそのサービスを見るためにはそのための機能を提供するサービスレジストリのインターフェースを規定する必要がある。この規定を定めたものがUDDIである。サービス提供者は、UDDIの公開インターフェースを通じて

WSDLを登録する。サービス利用者は、登録された情報からサービスを知ることができる。

3.4 Web サービス技術の利点

Web サービス技術を用いる理由は以下のような点による。

- Grid 環境ではファイアウォールの制約があるためプロトコルを統一する必要がある。SOAPを用いることで通信にはXMLを利用することになるためhttpなどの一般的なプロトコルで通信が可能となる。
- WSDLによって様々なユーザがサービスを容易に利用できる。
- Web サービス技術は不特定多数のユーザの利用を想定しているため、多人数が利用するシステムにおいて有効である。

Web サービス技術はSOAP, WSDL, UDDIで構成される。これらはFig. 3のような相関関係がある。

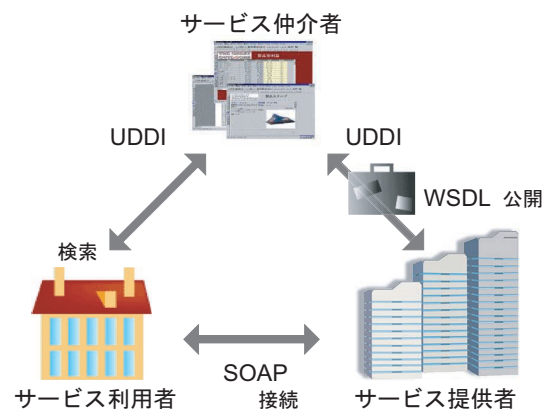


Fig. 3 SOAP, WSDL, UDDI

4 今後の課題

今後は各サーバの機能を充実させ、最終的に1つのシステムとして動作することを目指す。また、近似計算のアルゴリズムを実装しタンパク質立体構造予測に有効な最適化手法を確立する。

参考文献

- 1) Apache Axis
<http://xml.apache.org/axis/>
- 2) パソコンで試して分かる Web サービス
http://www.atmarkit.co.jp/fjava/rensai2/wbsrvic01/wbsrvic01_0.html