

行政院國家科學委員會專題研究計畫 成果報告

網格計算平台之建置及應用

計畫類別：個別型計畫

計畫編號：NSC92-2218-E-164-002-

執行期間：92年12月01日至93年10月31日

執行單位：修平技術學院資訊管理系

計畫主持人：姜文忠

共同主持人：楊朝棟

報告類型：精簡報告

處理方式：本計畫可公開查詢

中華民國 94 年 1 月 31 日

# 網格計算平台之建置及應用

The Implementations and Applications of a Grid Computing Platform

計畫編號：92-2218-E-164-002-

執行期限：92 年 12 月 1 日至 93 年 10 月 31 日

主持人：姜文忠 修平技術學院資訊管理系

## 一、中文摘要

叢集式系統即是以設備與效能可能較低的多部伺服器主機來取代單獨一部設備與效能較高的伺服器主機。其優點為不僅能做到負載平衡，亦能避開已停止服務的伺服器主機，而改用其它工作正常的主機來繼續負載平衡的工作。而叢集式系統亦有助於高速計算與平行處理相關技術與應用的普及，對於各應用領域的學術發展有莫大的助益。而近年來，結合分散式計算與平行式計算環境的網格計算(Grid Computing)，亦是學術研究的重要議題。如何應用開放原始碼於網格計算上，並研發相關技術，已是重要的課題。

網格計算(Grid Computing)的目的是用來整合大型網路環境下的各種資源(如處理器 cycles、磁碟空間、內容)。在本計劃中，我們將以目前最新的開放網格服務架構 OGSA 技術及 JAVA 跨平台的特性建置新一代的網格計算實驗平台，以協助推廣網格計算的觀念到各產學領域。本實驗平台之建置將著重在使用網格計算領域最常用之程式集及工具套件 Globus Toolkit。Globus 提供了網格中使用的協定以及 APIs/SDKs，可以讓我們利用分散於各處的資源中建出網格計算的架構。於本年度中已完成四項計畫目標，茲分述如下：

- (1) 研讀並了解及分析 Globus Toolkit 的三大主要元件 GRAM、MDS、GridFTP 的 API 和 SDK 設計及其應用。
- (2) 於修平技術學院、東海大學分別建置完成以 Globus Toolkit 3(OGSA)為基礎的第 3 代網格計算平台。並開發具有 Data Grid 能力的應用程式，並分析實驗平台的執行結果。
- (3) 建置以 OGSA Web Service 技術為基礎的專屬入口網站，提供使用者最便捷使用網格計算之服務。
- (4) 以 Globus OGSA 為基礎，分享第 3 代網格計算平台的架設經驗及應用程式開發技術。

關鍵詞：個人電腦叢集、網格運算、平行及分散的運算、資料網格

## Abstract

Internet computing and grid technologies promise to change the way we tackle complex problems. They will enable large-scale aggregation and sharing of computational, data and other resources across institutional boundaries. And harnessing these new technologies effectively will transform scientific disciplines ranging from high-energy

physics to the life sciences.

Grid computing focuses on aggregating resources (e.g., processor cycles, disk storage and contents) from a large-scale computing environment. It intends to deliver high-performance distributed platforms for computation- and/or data-intensive applications. In this project, we will study the enabling techniques for grid computing for computing. Our study will center on Globus, a widely used toolkit set for grid computing, and related tools. Globus provides inter-grid protocols and APIs/SDKs to facilitate the “construction” of grid infrastructures over geographically distributed resources. We will study and use the key components of Globus, such as Grid Resource Allocation Management (GRAM), Grid Resource Information Service (GRIS), Meta Directory Service (MDS), Grid Security Infrastructure (GSI), MPICH-G2, FTP extension protocol (GridFTP), etc.

In last year, a considerable number of studies have been made on the system. We finished five objects as follows : (1) understand the design of these key components of OGSA for grid platform (2) set up a grid computing platform of Data Grid for high-performance applications among HIT and THU (3) learn how to create grid-enabled Portal site for user's applications, and (4) share experiences on constructing such platforms and applications.

**Keywords :** PC Clusters, Grid Computing, Parallel and Distributed Computing, Data Grid21

## 二、緣由與目的

近年來由於寬頻普及率提高及網路頻寬品質大幅進步，使得不同的各類通訊與計算，如電信、多媒體、資訊、工程模擬等領域得以加以整合，進而使得分散式計算環境成為研究發展主流。因此，人們對計算資源尤其是計算能量的需求遠遠超越線性增長，而分散式計算環境提供資源分享，平行式計算環境提供計算能量，將這二者結合就是所謂的網格技術。進一步來說，網格計算就是利用互聯網路把分散在不同地理位置的計算機組織成一個「虛擬的超級計算機」，其中每一台參與計算的計算機就是一個「節點」，而整個計算是由成千上萬個「節點」組成的「一張網格」，因而將這種計算方式稱為網格計算。這樣組織起來的「虛擬的超級計算機」有不僅數據處理能力超強，而且可能充分利用網上的閒置處理能力。

以目前各大專院校來說，分散在校園四處的計算資源常常沒有完善的整合，一個校園內可能有個人的桌上型電腦、系所實驗室的工作站及叢集計算系統、計算機中心大型伺服器、快速的區域網路及網際網路服務、以及分佈於各地的各種資料等。所需要的是在特定目的下，把這些分布在各地點的資源做一整合。這些整合過的資源，可以被不同的裝置和服務所使用。

Data Grid 為網格計算的應用之一。在現代科學研究和應用領域中，大量的資料是重要的資源，然而，現有的資料管理體系結構、方法和技術已經不能滿足人們對高性能、大容量分散儲存和分散處理能力的要求。因此，在計算網格的基

礎上人們提出了資料網格(Data Grid)的構想，以解決上述應用所面臨的問題

Globus 提供了一些基本的工具來建立一個網路的計算系統。未來可以預見的是，隨著 Internet 和快速成長的有線及無線網路的驅使，更多的資源可以在各處被連結起來。Globus 正是一種實現這個目標的工具。Globus Toolkit 在網格計算技術上扮演一中介軟體的角色，正如之前所敘述的提供了大量的通信協定、服務機制、

API、SDK 等，將這些集合在一起並不能提供任何的價值，我們需要的是去利用它、開發它的潛在價值，無論是在工業設計或是科學研究上，甚至還可以擴及未來網際網路的電子商務技術上。讓 Globus Toolkit 能夠成功的在各式不同的作業平台、環境上執行，甚至具有產能，需要具有一定程度的專業才能做到。

### 三、 結果與討論

#### (一) 完成在 RedHat 9.0 上安裝 GT3

##### (1) 安裝前的準備：Account Requirement

- globus or root account
  - Toolkit environment
  - For installation and execution of Toolkit.
- Any other user account
  - End user environment.
  - For jobs execution on the Grid.

##### (2) 使用軟體

- JAVA SDK
  - <http://java.sun.com>
  - <http://java.sun.com/j2se/1.4.2/download.html>(j2sdk-1\_4\_2\_03-linux-i586-rpm.bin)
- Apache Ant

- <http://ant.apache.org>  
<http://ant.apache.org/bindownload.cgi>(apache-ant-1.6.0-bin.tar.gz)

- JUnit
  - <http://www.junit.org>
  - <http://prdownloads.sourceforge.net/junit/junit3.8.1.zip?download=junit3.8.1.zip>
- GT3 Source Installation Package
  - <http://www-unix.globus.org/toolkit/download.html>(gt3.0.2-source-installer.taz)
- Globus Simple CA Package
  - <http://www.globus.org/security/simple-ca.html>
  - <http://www-unix.globus.org/ftppub/gsi/simple-ca/globus-simple-ca-latest-src-bundle.tar.gz>(globus\_simple\_ca-latest-src-bundle.tar.gz)
- MPICH-G2
  - <http://www-unix.mcs.anl.gov/mpi/mpich/>
  - <http://www-unix.mcs.anl.gov/mpi/mpich/downloads/mpich.tar.gz>

##### (3) 安裝 GT3

- 設定網域名稱和 IP 位址
- 安裝 Java SDK
- 安裝 Apache Ant & JUnit(JUnit 是用來測試 Java 程式)
- 設定 Java 環境變數
- 開始安裝 GT3
- 設定 Globus 環境變數
- Install and setup Globus Simple CA(CA client)
- 設定 grid-mapfile
- 設定 gatekeeper
- 設定 host file(optional)

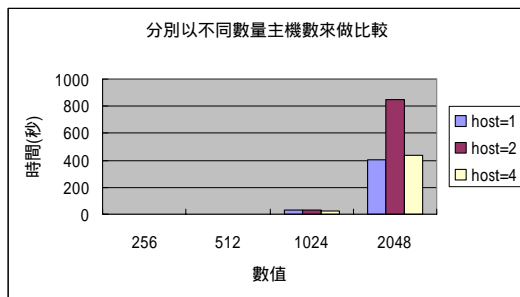
- 測試並執行一個
- 簡單的 job
- 設定 GridFtp Service

#### (4) 安裝和設定 MPICH-G2

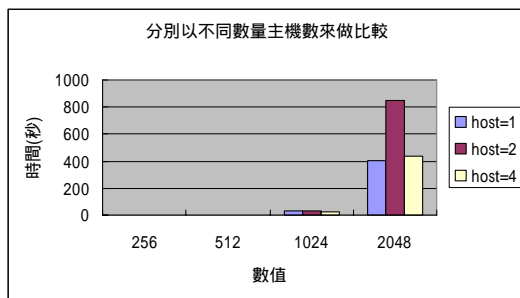
- Use root account
- Uncompress mpich-g2
- Configuration
- Make install

#### (5) MPI 的編譯和執行

- 編譯一個 MPI 程式
- 執行 MPI 程式
- MPI 程式測試(分別以 Mm\_mpi 和 Pi\_mpi 這兩個程式做出的測試數據和圖表如圖一、圖二)



圖一: Mm\_mpi 程式的測試數據圖表



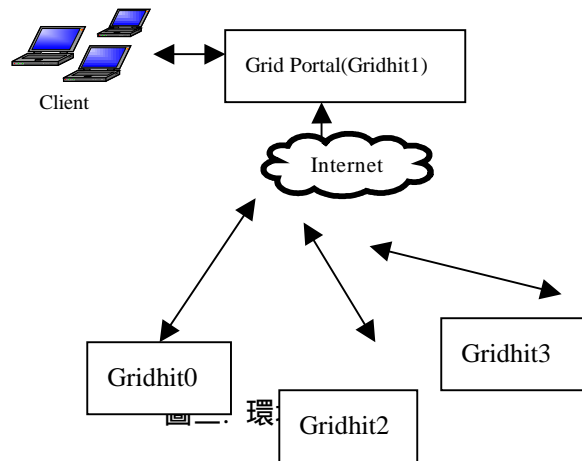
圖二: Pi\_mpi 程式的測試數據圖表

(二) 以 OGCE 的 NMI Portal 軟體建置一個 Grid Portal

(1) 以 OGCE 的 NMI Portal 軟體建置一個 Grid Portal 系統, 並且以此 Portal 達到下列二個主要目標:

- 財憑證(Certificate)的管理及取用。
- 使用 GridFtp 做檔案管理及傳輸。

- Submit Job (Grid Job Submission Portlet)
- 其環境架構如圖三所示。



#### (2) NMI Portal 安裝

- Prerequisite Software
- Untar the portal bundle
- Copy mysql-connector-java-2.0.14-bin.jar into the directory "portal/chef-1.0.7"
- Edit build.properties
- Build in and install the portal
- If you are rebuilding a portal, type "ant clean" first before "ant deploy".
- Change Host certificate file attributes

#### (3) MyProxy 安裝

- 檢查系統時間是否正確
- Download a MyProxy GPT Package
- Install the MyProxy GPT Package
- \$GLOBUS\_LOCATION/etc/myproxy-server.config
- 複製檔案
- 修改/etc/rc.d/init.d/myproxy
- 設定為開機自動啟動
- 手動啟動

(4) Java CoG Kit 安裝(在非 root 使用者下)

- Login with normal user (“test” user in our demo)
- Untar
- Edit cog.properties
- Store your credentials into the MyProxy server

(5) 系統範例操作

- 示範實例一：Proxy 管理和取得認證

(a) Connect to the Grid Portal, web URL is

<http://163.17.75.211:10081/nmi/>

(b) Login or create new account (如圖四)



圖四：登入 MyProxy

(c) Change to Proxy Manger page (如圖五)



圖五：切換至 Proxy Manger 設定頁面

(d) \Click the “Get New Proxy” button

(e) Key in the data and get proxy

(f) Result after successfully logging in

- 示範實例二:使用 GridFTP 工具來管理檔案

(a) Change page to GridFtp

(b) Login GridFtp server(One Host Only)

(c) Screen after login

(d) Download file by clicking this button

(e) Upload fil

(f) Login into two GridFtp server (Two Hosts)

(g) Screen after login

- 示範 3: Submit Job (Grid Job Submission Portlet)

(a) 輸入工作內容(如圖六)



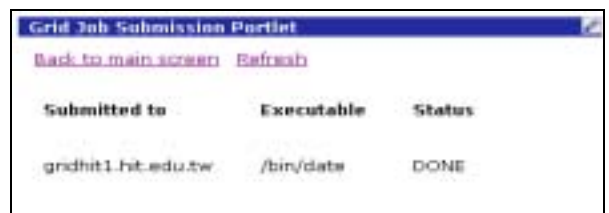
圖六：輸入 Submit Job 內容

(b) 完成結果(如圖七)



圖七：Submit Job 成功

(c) Monitor submitted jobs (如圖八)



圖八：Submit Job 成功的紀錄

四、計畫成果自評

這一年來,我們收集並研讀了許多有關 Globus Toolkit 的三大主要元件 GRAM、MDS、GridFTP 的 API 和 SDK

的相關資料與參考書籍及軟體，因此在實際架設網格計算平台前便已完成相關的系統與軟體分析。因而得以順利完成 Globus Toolkit 3(OGSA)為基礎的第3代網格計算平台。並開發具有 Data Grid 能力的應用程式，並分析實驗平台的執行結果。進而，建置以 OGSA Web Service 技術為基礎的專屬入口網站，提供使用者最便捷使用網格計算之服務。並以 Globus OGSA 為基礎，分享第3代網格計算平台的架設經驗及應用程式開發技術。

## 五、參考文獻

- [1] 國家網格計算實驗平台之建置及應用  
<http://unigrid.nchc.org.tw/info.html>
- [2] 《網格計算》，都志輝、陳渝、劉鵬 編寫，李三立院士審閱，清華出版社  
<http://hpclab.cs.tsinghua.edu.cn/~duzh/book/grid.pdf>
- [3] 開放網格服務架構之旅  
<http://www-900.ibm.com/developerWorks/cn/grid/gr-visual/index.shtml#1>
- [4] GT3 安裝實作參考  
<http://www.globus.org/>  
<http://www-unix.globus.org/toolkit/>  
[http://crystal.uta.edu/~levine/class/spring2003/grid/globus\\_commands/](http://crystal.uta.edu/~levine/class/spring2003/grid/globus_commands/)  
<http://www-900.ibm.com/developerWorks/cn/grid/gr-redbook/index.shtml>  
[http://www-unix.globus.org/toolkit/3.0/ogsa/docs/java\\_programmers\\_guide.html](http://www-unix.globus.org/toolkit/3.0/ogsa/docs/java_programmers_guide.html)
- [5] OGCE 安裝書面參考  
<http://www.collab-ogce.org/nmi/index.jsp>  
<http://grid.ncsa.uiuc.edu/myproxy/install.html>
- [6] MySQL JDBC Connector 2.0.14 (MySQL Java Database Connectivity)  
[http://chensh.loxa.edu.tw/php/C\\_1.php](http://chensh.loxa.edu.tw/php/C_1.php)
- [7] JAVA SDK 1.4.2 簡介
- [8] Apache Ant 1.6.0簡介  
<http://www-900.ibm.com/developerWorks/cn/opensource/os-ecant/index.shtml>
- [9] JUnit 3.8.1 簡介  
<http://www.d>
- [10] D. Pekurovsky, I.N. Shindyalov and P.E. Bourne (2002). High Throughput Biological Data Processing on Massively Parallel Computers. A Case Study of Pairwise Structure Comparison and Alignment Using the Combinatorial Extension (CE) Algorithm. Bioinformatics Submitted.
- [11] I.N. Shindyalov and P.E. Bourne (2001). CE: A Resource to Compute and Review 3-D Protein Structure Alignments. Nucleic Acids Research, 29(1), 228-229.
- [12] M. Thomas, S. Mock and J. Boisseau (2000). Development of Web Toolkits for Computational Science Portals: The NPACI Hotpage. In Proc. of the Ninth IEEE International Symposium on High Performance Distributed Computing.
- [13] Foster and C. Kesselman (1997). Globus: A Metacomputing Infrastructure Toolkit. Intl. J. Supercomputer Applications, 11, 115-128.
- [14] Chaitanya Baru, R. M., Arcot Rajasekar, Michael Wan (1998) In Proc. CASCON'98 Conference: Toronto, Canada.
- [15] Schmidt, M.W.; Baldrige, K.K.;

- Boatz, J.A.; Elbert, S.T.; Gordon, M.S.; Jensen, J.H.; Koseki, S.; Matsunaga, N.; Nguyen, K.A.; Su, S.; Windus, T.L. (1993) The General Atomic and Molecular Electronic Structure System. *J. Comp. Chem.*, 14, 1347.
- [16] Foster, C.K. (1998) In IPPS/SPDP '98 Heterogeneous Workshop, 4-18. The New Biology and the Grid Baldrige and Bourne 24[8]
- [17] <http://gridport.npaci.edu/amber>
- [18] Pevzner, P.; Tang, H.; Waterman, M. S. An Eulerian Approach to DNA Fragment Assembly, *Proc. Natl. Acad. Sci* 2001, 98, 9748-9753; [http://gridport.npaci.edu/euler\\_srb](http://gridport.npaci.edu/euler_srb)
- [19] Baker, N. A.; Sept, D.; Holst, M. J.; McCammon, J. A. The adaptive multilevel finite element solution of the Poisson-Boltzmann equation on massively parallel computers, *IBM Journal of Research and Development* 2001, 45, 427-438; <http://gridport.npaci.edu/APBS>
- [20] Baldrige, K. K.; Greenberg, J. P. QMView: A Computational 3D Visualization Tool at the Interface Between Molecules and Man, *J. Mol. Graphics* 1995, 13, 63-66.
- [21] Seely, S. SOAP: Cross Platform Web Service Development Using XML; Prentice Hall: Upper Saddle River, 2002.
- [22] Rajesh Raman, Miron Livny, and Marvin Solomon, "Resource Management through Multilateral Matchmaking", Proceedings of the Ninth IEEE Symposium on High Performance Distributed Computing (HPDC9), Pittsburgh, Pennsylvania, August 2000, pp 290-291
- [23] Rajesh Raman, Miron Livny, and Marvin Solomon, "Matchmaking: Distributed Resource Management for High Throughput Computing", Proceedings of the Seventh IEEE International Symposium on High Performance Distributed Computing, July 28-31, 1998, Chicago, IL.
- [24] D. H. J Epema, Miron Livny, R. van Dantzig, X. Evers, and Jim Pruyne, "A Worldwide Flock of Condors : Load Sharing among Workstation Clusters" *Journal on Future Generations of Computer Systems* Volume 12, 1996
- [25] Jim Basney and Miron Livny, "Deploying a High Throughput Computing Cluster", in *High Performance Cluster Computing*. Rajkumar Buyya, Editor, Vol. 1, Chapter 5, Prentice Hall PTR, May 1999.
- [26] Stephen F. Altschul, Warren Gish, Webb Miller, Eugene W. Myers, and David J. Lipman, "Basic Local Alignment Search Tool", in *Journal of Molecular Biology*, Vol. 255, pages 403-410, 1990
- [27] "The Grid, Blueprint for a New Computing Infrastructure", Foster & Kesselman, Eds, Morgan Kaufmann Publishers, Inc., 1999