

分子科学VOの推進

分子科学研究所 奥村久士

分子科学VOの概要

全国共同利用の推進

分子科学分野における多様な計算

分子軌道法、分子動力学法、化学反応動力学、統計力学理論



多様な計算機構成

Fujitsu PRIMEQUEST, SGI Altix4700, Hitachi SR16000 (計約14TFlops)



ヘテロ環境の一体的管理 分子科学VO形成



実施計画

- (1) 共同利用マシンのスケジューラと統合したキュー管理
- (2) スーパースケジューラを用いたジョブの実行
- (3) PSE機能を利用した、最適な資源の配分
- (4) 個人参加型のVO形成によるソフトの自動配信

ハイスループットとリアルタイムコラボレーション

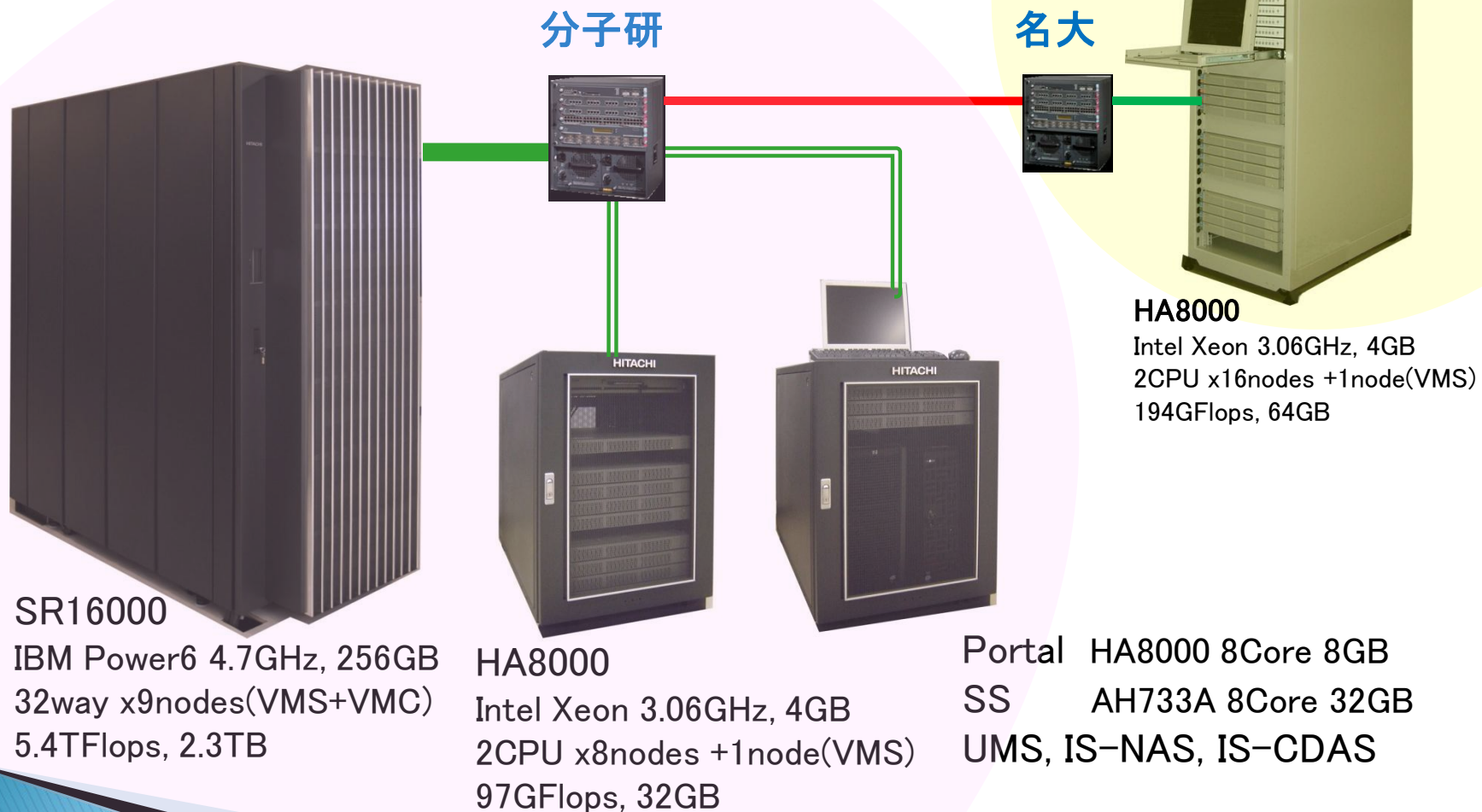
平成21年度

共同利用大型計算機へのNAREGIミドルウェア導入
個人参加型PCをVO集約する方法の検討

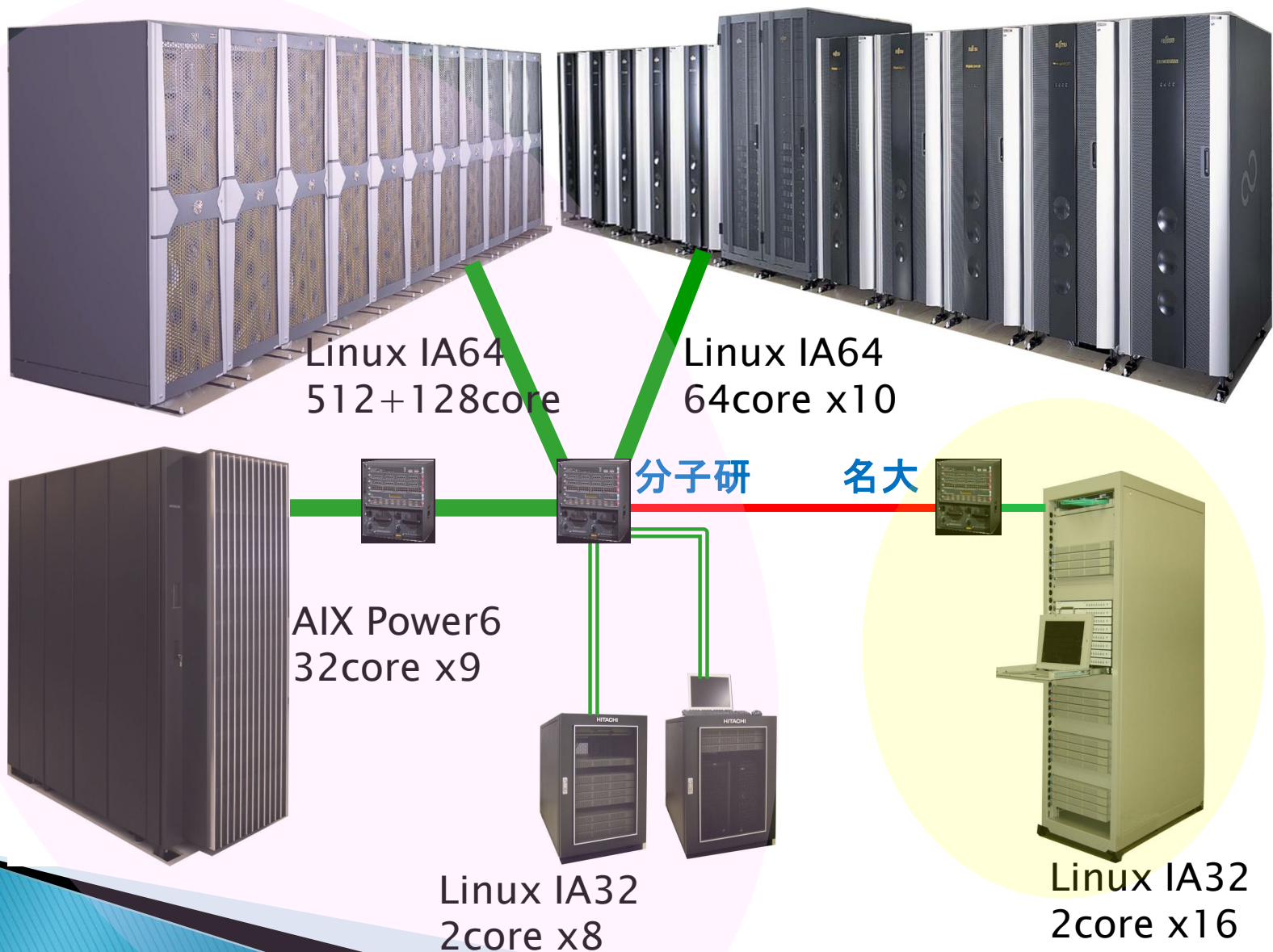
実施内容

- ▶ 既設環境はNAREGI Ver.1.1.2版据え置き
- ▶ 導入実績が無いIA64アーキテクチャへ
最新版NAREGI Ver.1.1.4の導入
- ▶ 共同利用マシンをベースとした分子科学VOを構築
- ▶ 共同利用サービスとの整合性の確認
- ▶ 個人PCにNAREGI環境よりジョブ投入方法の検討

分子科学VO構成図 平成20年度



分子科学VO構成図 平成21年度<



まとめ

- ▶ PBSproを使用しているSGI Altix4700を選択
- ▶ Fujitsu PRIMEQUEST はNQS II の実績もなく保留
- ▶ Altix4700にJava1.6導入後セットアップがほぼ成功
一部認識できておらずジョブ投入まで至らず
- ▶ 個人PC環境用にNAREGIと接続実績があるEz-Grid
を導入し単独環境設置 NAREGI接続はこれから
- ▶ 今後の課題
NAREGI Ver.1.1.5へバージョンアップ
アプリのデプロイ、PSE機能の検証
PALからのジョブ投入を検討