研究テーマ：計算グリッド上での大規模マテリアルシミュレーション（1/2）

（プロジェクト番号　JGN2-A17004）

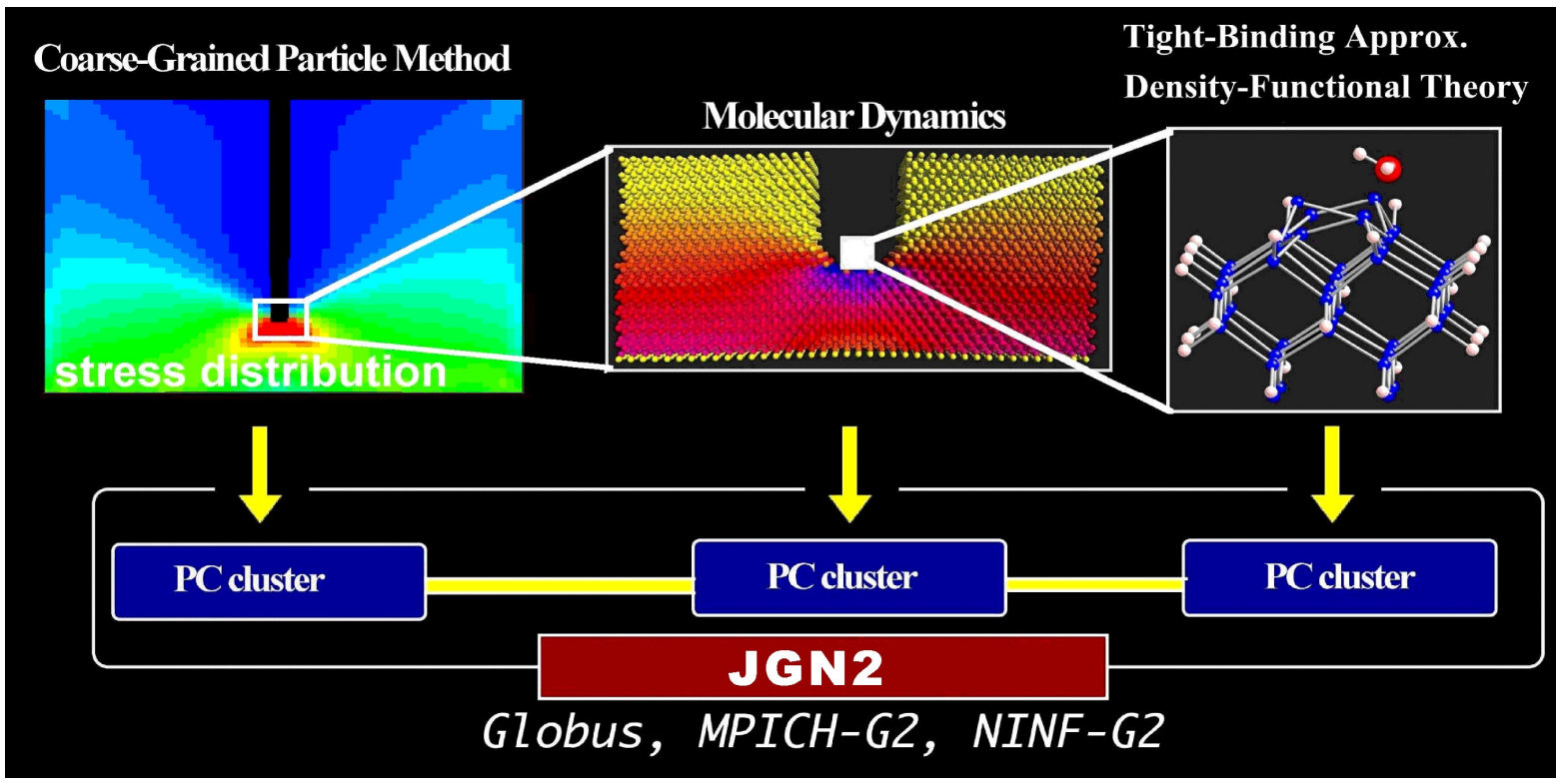
研究機関：　名古屋工業大学大学院工学研究科、新潟大学理学部、
岡山大学大学院自然科学研究科

研究の概要：

粗視化粒子法，分子動力学法，電子密度汎関数法等の様々な物理計算手法をハイブリッド化し，実際的規模のナノスケール材料に直接適用可能としたマルチスケールシミュレーションコードを，JGN2を用いて構築したグリッド計算環境において効率良く運用するための実験を行う．

研究の目的：

我々が開発したハイブリッドコードは，異なる計算手法を実行するノード同士で必要となるデータ転送量が，同一計算手法を実行するノード同士での場合に比べて大変少ないという特徴を持つ．このためJGN2を用いて構築したグリッド計算環境を活用することで，実際的規模のナノ材料に対する大規模シミュレーションが実行可能になると期待できる．本研究はその実証実験を行い，問題点等を明らかにすることを目的とする．



実験機器構成：

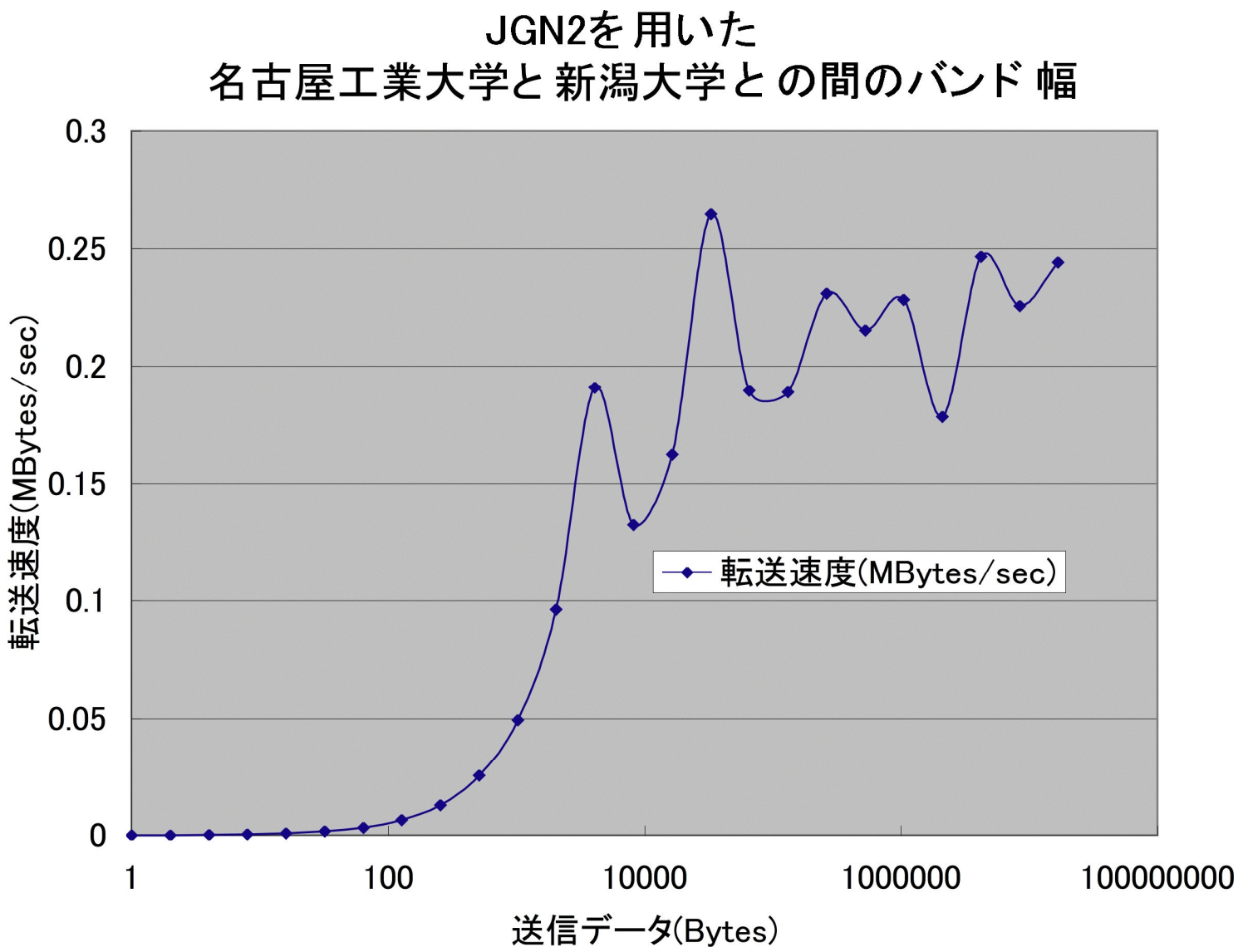
各研究機関の研究室に構築した数十台規模のPCクラスター群が主な実験機器である．PCクラスター群は，JGN2により構築したVLANを通じて計算グリッドを形成する．

研究テーマ：計算グリッド上での大規模マテリアルシミュレーション（2/2）
（プロジェクト番号　JGN2-A17004）

研究機関：　名古屋工業大学大学院工学研究科、新潟大学理学部、
岡山大学大学院自然科学研究科

研究開発成果：

例えばJGN2にDVTSによる動画データをUDP方式で流した場合，サイト間のバンド幅は理論性能（12.5MBytes/sec）の60%程度以上となり満足できるが，Message Passing Interface（MPI）standardを用いたサイト間のTCP実測バンド幅測定では図のように理論性能の2%程度しか得られず本プロジェクトでのアプリケーション運用が困難であることが判明した.



プロジェクトのアピールポイント：

本研究によりグリッド計算環境を活用する大規模材料シミュレーションの実行が実証できると，これまでスーパーコンピューターを利用できなかった研究者に新しい大規模シミュレーション環境を提案することにつながる．しかし，JGN2でのTCP実効バンド幅が大変狭く現時ではそのメドが経っていない.

プロジェクトの自己評価：

TCP 実効バンド幅という基本的な点で見込みが甘く，計画の遂行が停滞した.