

## 分子シミュレーションとネットワーク環境

○林 治尚<sup>1</sup>、佐々和洋<sup>2</sup>、中野英彦<sup>2</sup>

<sup>1</sup>兵庫県立大学 学術総合情報センター

<sup>2</sup>兵庫県立大学大学院 工学研究科 物質系工学専攻  
(〒671-2280 兵庫県姫路市書写2167)

### はじめに

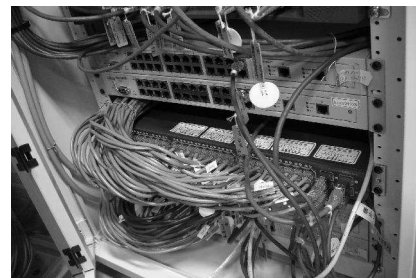
大学組織等の研究・教育機関では、限られた予算の中で、大規模シミュレーションなどの先端的研究に供する計算資源を確保するために、教育用PC端末をHPC用の資源要素として、その空き時間を活用したキャンパスグリッドシステムの構築が注目されている<sup>[1]</sup>。このようなシステムは、新規設置やリプレイスの際に同時に導入・構築されているのが一般的であるが、2009年度に予定されている本学のリプレイスに向けて、基礎データ取得のために、現有既存のPC端末等の機器類を基本的にそのまま流用して、グリッドシステムを構築した。研究室ベースでの小規模クラスターの構築例とともに、構築面での手法や問題点、シミュレーション計算への適用について紹介・考察する。

### 方法及び結果

兵庫県立大学では、2004年春に情報処理教育システムが更新され、県内各地に分散する主要6キャンパスに○室ある情報処理実習室を中心に、合計○台の教育用PC端末が設置された。2009年春のシステム更新を控え、本学内でのグリッドシステム運用の可能性と問題点を探るべく、そのうちの1室(書写71xx室,PC端末○台)にシステムを構築した。まずは2004年導入時に敷設したcat5ケーブルと10/100Mbpsのスイッチを、cat6ケーブルへ交換し、Catalyst3560Gに置き換えた。さらに、各PC端末は、WindowsXPとRedHatのデュアルブートになっており、これをマルチブート化して、分散並列計算用に、MPIとグリッド、SCore用の専用Linuxを用意した。授業や開放時間帯には誤って起動しないように、曜日や時間帯により、マルチブート時のメニュー(menu)を変更する様に改良した<sup>[2]</sup>。加えて、PC端末のNICが通常のRedHatでのドライバでは、NICドライバの改善を行なった。これら詳細は当日発表する。



71xx教室(PC○○台)



Catalyst3560G

### 参考文献

- [1] 庄司文由, “教育用PC端末群のPCクラスターの利用とその運用について”, 情報処理学会 2004-DSM-34 (2004) 他
- [2] 庄司文由, “教育用PC端末群のPCクラスターの利用とその運用について”, 情報処理学会 2004-DSM-34 (2004) 他