

[2005]九州大学情報基盤センター年報 : 2005年度

<https://doi.org/10.15017/1467612>

出版情報 : 九州大学情報基盤センター年報. 2005, 2006. 九州大学情報基盤センター
バージョン :
権利関係 :

第5章 イベント紹介

5.1 全国共同利用計算機システムに関する研究支援活動

5.1.1 計算機利用講習会

本センターでは、全国共同利用計算機システムに関する講習会を毎年 20 件程度開催している。年間の受講者数は、のべ 300 名程度である。また、遠方からの受講者でも参加しやすいように、希望者には旅費を支給している。



本年度、新たに始めた試みは以下の 2 点である。

- 他大学での講習会開催
- 英語による留学生向け講習会開催

他大学での講習会は、九州大学以外の利用者に対する研究支援強化策として、福岡大学、佐賀大学、長崎大学および琉球大学において開催した。開催に当たっては、端末の提供や事前の広報活動など、各大学の計算機センターに協力して頂き、いずれも盛況であった。さらに各大学の研究者と事前に連絡を取ることで、実際の利用に即した内容とすることができた。

一方英語による留学生向け講習会は、留学生の多い研究室からの要望に応える形で実施したが、開催してみると予想外に多くの受講者が参加し、実施後のアンケートでも熱心な意見が書かれており、需要の高さをあらためて認識した。

本年度実施した講習会は次ページの通りである。

講習会名	開催日	参加人数	特記事項
高性能演算サーバ利用	4月 25日	20名	福岡大学
UNIX 初級	5月 6日	28名	
UNIX 初級	5月 9日	24名	
プログラミング言語利用	5月 13日	16名	
プログラミング言語利用	5月 16日	15名	
UNIX 中級	5月 20日	20名	
UNIX 中級	5月 24日	15名	
並列プログラミング (OpenMP)	6月 2～3日	13名	
並列プログラミング (MPI)	6月 7日	18名	
高性能演算サーバ利用	6月 23日	30名	福岡大学
可視化システム AVS	7月 13～14日	14名	
物性・構造解析システム MASPHYC	7月 15日	2名	
3次元流体解析システム -FLOW	7月 26日	11名	
汎用有限要素法解析プログラム MSC.Marc, MSC.Mentat	8月 24日	7名	
汎用構造解析プログラム MSC.Nastran, MSC.Patran	8月 25日	3名	
分子軌道計算プログラム Gaussian03	8月 26日	10名	
動的構造解析ソフトウェア LS-DYNA	8月 30日	2名	
高性能演算サーバ利用	9月 7日	6名	福岡大学
高性能演算サーバ利用	9月 12日	52名	福岡大学
高性能演算サーバ利用	9月 14日	24名	福岡大学
高性能演算サーバ利用	10月 28日	15名	
数値計算ライブラリ利用	10月 28日	18名	
留学生のための高性能演算サーバ利用	11月 2日	13名	英語で実施
Gaussian03 サポート編	11月 25日	9名	

5.1.2 高性能演算サーバセミナー（利用情報交換会）

2005 年 5 月 12 日（木）に，2005 年 4 月から正式運用を開始した IBM 社製 IBM eServer p5 サーバを用いて得られた成果や感想，要望などの利用情報を交換する場として，標記セミナーを開催しました．

参加者は 49 名で，IBM 技術スタッフ，センター運用関係者も出席し，p5 利用者同士の情報交換だけでなく，Q&A や利用方法改善の場として，熱心な質疑応答が交わされました．

（セミナープログラム）

高性能演算サーバセミナー（利用情報交換会）

日時： 2005 年 5 月 12 日（木）13 時～17 時

場所： 九州大学情報基盤センター第一会議室（5 階）

挨拶

第 1 部 13 時 10 分～14 時 40 分

話題提供（講演 10 分・質疑応答 5 分）

- 宗藤 伸治（九州大学大学院工学研究院材料工学部門）
「マテリアルサイエンスにおける計算科学の応用」
- 神崎 亮（九州大学大学院理学研究院化学部門）
「Gaussian 03 を用いた分子軌道計算の実際」
- 伊藤 英一（東北大学情報シナジーセンター）
「p5 体験（記）」
- 中野 博生（兵庫県立大学大学院物質理学研究科）
「強相関電子系に対する厳密対角化の並列計算」
- 石原 大輔（九州工業大学情報工学部機械情報工学科）
「高性能演算サーバによる並列流体／流体構造連成解析」

休憩 （coffee break）

第 2 部 15 時 00 分～16 時 30 分

話題提供（講演 10 分・質疑応答 5 分）

- 澤田 瑞樹（電気通信大学電気通信学研究科機械制御工学専攻）
「eServer p5 の板材弾塑性解析への試用報告」
- 三浦 慎一郎（東京都立工業高等専門学校機械工学科）
「有限要素法による乱流解析
— PC クラスタ，ベクトル計算機，スカラ並列計算機の利用 —」
- 古川 雅人（九州大学大学院工学研究院機械科学部門）
「スカラ並列機 IBM eServer p5 とベクトル並列機 VPP5000 の性能比較」
- 富来 礼次（大分大学ベンチャービジネスラボラトリー）
「反復法を適用した有限要素室内音場解析への IBM eServer p5 モデル 595 の利用」
- 鈴木 厚（九州大学大学院数理学研究院数理科学部門）
「Orphan 指示文を用いた粗粒度 OpenMP 並列プログラム」

第 3 部 16 時 30 分～17 時 00 分

センター・IBM からの話題提供，自由討論

5.1.3 ユーザ会（計算科学事例フォーラム）

2005年9月30日（金）に、スーパーコンピュータ FUJITSU VPP5000/64，高性能演算サーバ IBM eServer p5 をはじめとする最新のハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) システムを用いて得られた成果や感想，要望などの利用情報を交換する場として，ユーザ会（計算科学事例フォーラム）を開催しました．参加者は合計 36 名です．

ユーザ会には，利用者をはじめ，センター技術スタッフ，センター運用関係者，ベンダーの方々の他に，これまでセンターの研究用計算機システムを使われたことがない方や，計算科学に興味をお持ちの方の参加も出席され，活発な質疑応答がなされました．

利用者同士の情報交換だけでなく，Q&A や今後の利用方法改善の場にもなり得たものと考えています．

（ユーザ会プログラム）

九州大学情報基盤センターユーザ会 計算科学事例フォーラム

日時: 2005年9月30日（金）9時40分～17時30分

場所: 九州大学情報基盤センター 多目的講習室（3階）

開会の挨拶

セッション 1

- 9:45–10:00 与賀田 隆史（九州大学大学院工学府都市環境システム工学専攻）
「黄河の水利用・管理の高持続性化」
- 10:00–10:15 李 聖旭（九州大学大学院工学府海洋システム専攻）
「3次元離散渦法による球周りの流れについて」
- 10:15–10:30 Lorene L. Abella（九州大学大学院工学府エネルギー量子工学専攻）
「プラチナ触媒によるメタノール電気酸化反応経路」
- 10:30–10:45 中村 武史（九州大学大学院理学府地球惑星科学専攻）
「断層周辺における地震波動伝播シミュレーション」

（休憩）

セッション 2

- 10:55–11:20 高山 峯夫（福岡大学工学部建築学科）
「建築物の耐震設計と地震時応答の評価」
- 11:20–11:45 三浦 慎一郎（東京都立工業高等専門学校機械工学科）
「高次要素有限要素法を用いた流体計算」

（昼食）

セッション 3

- 12:45–13:00 岡田 浩幸（九州大学大学院理学府分子科学専攻）
「**ab initio** 計算を用いた内分泌攪乱化学物質リスク評価の試み」
- 13:00–13:25 廣川 昭二（九州大学大学院工学研究院応用化学部門）
「ダイオキシン類の理論化学的研究：分子特性，電子スペクトル，および生化学的活性・毒性」
- 13:25–13:50 酒井 健（九州大学大学院理学研究院化学部門）
「白金原子上における水素原子活性化メカニズムの考察」
- 13:50–14:15 今石 宣之・李 凱（九州大学先導物質化学研究所）
石 万元（九州大学大学院総合理工学府）
「表面張力対流のシミュレーション - 結晶成長プロセスとの関連 - 」

（休憩）

セッション 4

- 14:40–15:05 山本 有作（名古屋大学大学院工学研究科計算理工学専攻）
「キャッシュマシン向け固有値解法の **Power5** 上での性能評価」
- 15:05–15:30 中島 研吾（東京大学大学院理学系研究科地球惑星科学専攻）
「**Flat-MPI** と **Hybrid** 並列プログラミングモデルの性能比較」
- 15:30–15:55 塚原 隆裕（東京理科大学大学院理工学研究科機械工学専攻）
「平行平板間クエット乱流の世界最大規模直接数値シミュレーション」

（休憩）

セッション 5

- 16:15–16:40 広瀬 直毅（九州大学応用力学研究所）
「日本海環境予測システムの構築」
- 16:40–17:05 西垣 肇（大分大学教育福祉科学部） 三寺 史夫（北海道大学低温科学研究所）
「黒潮・親潮合流域における海流の力学についての数値実験」
- 16:05–17:30 矢本 史治（九州大学大学院理学府地球惑星科学専攻）
「**MAC** 法を用いた原始惑星系円盤内ダスト層における重力不安定の軸対称 2 次元数値シミュレーション」

5.2 情報処理教育研究集会

5.2.1 概要

情報処理教育研究集会は、国立大学情報教育センター協議会を組織している12大学（北海道大学、室蘭工業大学、東北大学、東京大学、名古屋大学、名古屋工業大学、京都大学、大阪大学、和歌山大学、広島大学、九州工業大学、九州大学）の情報教育系センターの持ち回りにより各担当大学の主催（一昨年度まで文部科学省との共催）で開催される全国規模の情報教育に関する研究会である。本研究集会は、「国公立大学等の教員の参加を求め、教育内容、教育方法等について研究協議する機会を与え、もって大学等教員の資質の向上と教育の充実を図ること」を主な目的としている。

第18回目となる今年度は九州大学が担当し、11月4日と5日の二日間にわたって開催した。

5.2.2 全体会

初日の11月4日は、梶山九州大学総長と文部科学省高等教育局専門教育課メディア教育係の江村係長の挨拶の後、メディア教育開発センターの清水理事長により『e-Learningの共有化と国際連携における日本の役割』と題した基調講演が行われた。また特別講演として、熊本大学総合情報基盤センターの宇佐川センター長による『インターネット時代の教育を切り拓く大学 熊本大学「教授システム学専攻」平成18年度設置予定』、東京工業大学学術国際情報センターの馬越教授による『日本OCW連絡会 東京工業大学のケース 参加の経緯と波及効果、今後の問題点について』、東京大学情報基盤センターの岡部センター長による『情報教育の現状と将来』、広島大学情報メディア教育センターの中村教授による『国立大学情報教育センター協議会教育用コンテンツ開発 WG 製作 情報倫理ビデオ教材2』が行われた。



5.2.3 分科会

11月5日は、7つの分科会場とポスター会場に分かれて200件近い発表が行われた。分科会では、『現代的教育ニーズ取組支援プログラムと特色ある大学教育支援プログラム』と「初等・中等教育における情報教育と高等教育への接続」の二つの特別セッションが併設され、活発な意見交換が行われた。



5.3 分子科学計算推進室の設置

5.3.1 分子科学計算推進室の設置経緯と役割について

昨年 4 月に、大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 分子科学研究所から情報基盤センターに赴任いたしました南部です。どうぞよろしくお願いいたします。分子研時代は、もっぱら分子科学計算のためのスーパーコンピュータ環境の運用および関連した科学の研究を行って参りました。そこで、今まで培った経験を生かし活用する場として、様々な方の助言を頂き、本センター内に分子科学計算推進室の設置を行うことが出来ました。この場をお借りして、お礼を申し上げます。

さて、この分子科学計算推進室とは「何ぞや？」となるのですが、近年、利用者の多様化とともに計算環境も多様化しさらには、一人の研究者では把握しきれない分野と分野の境目のような境界領域に新たな科学が出現しています。生物と情報、物理と化学、生物と化学、生物と物理という境界領域です。あるいは、一対一ではなく、生物と情報と化学と物理という輪が、分子というキーワードで結びついているように感じられます。まるで、DNA のように、分子がらせん構造を持ちながら繋がっているように、複雑です。そのため、ある現象のメカニズムを把握するために突如、分子科学計算が必要になってしまっているような利用者が見受けられます。そこで、そのような研究をある意味、共同研究も含めて、専門分野の視点からサポートしようという試みを始めました。つまり、「分子科学」分野に関連するソフトウェアの開発及びアプリケーションプログラムの個別サポートを積極的に行うというのが主な趣旨です。

一方、九大の情報基盤センターの計算機利用者の統計を見ますと、高性能演算サーバーにおいて、全 CPU 時間の約 24% 程度を量子化学計算プログラムとして世界的に有名な Gaussian 社のソフトが費やしております。なぜこのように多いかですが、このソフトの優れているところは、比較的容易に「正確な答えを第一原理計算に基づき、得ることができる」という点です。つまり、得られる値は、物理定数さえ変えなければ、誰がやっても同じ答えにならなくてならず、信頼の高い結果を得ることができるからです。それは、同じ非経験的分子軌道法に基づいたプログラムを個人で作ったとしても、同様です。化学者のみならず様々な方が、実験的にその理論結果を再現し、Gaussian プログラムの作者である John Anthony Pople 博士が 1998 年にノーベル賞を獲得しました。ちなみに、この分野において日本人は、実はパイオニアであり、福井謙一博士が既にノーベル賞を 1981 年に授与されております。

さて、この 24%CPU 時間は多いようで実は少ないかもしれません。昨年の秋、機会を得て、年に一度、米国で開催される「高性能計算、通信、データ保管および解析に関する国際会議 (SC2005)」に参加することができました。大々的な参加者はもちろん米国の大企業であるマイクロソフト等の出展する巨大なブースなどですが、面白いのは米国のみならず日本、英、ドイツ、フランスの大学や研究所の方々が出展する「手作り」ブースでの意見交換の場があることです。英国で有名な



Daresbury 研究所の研究者と意見交換

Daresbury 研究所や米国イリノイ州にある Argonne 国立研究所も出展しております。Argonne 国立研究所は皆さんご存じである MPICH ライブラリーの開発もととなります。このような出展の中で、よく目立つのはやはり分子科学関連のパネルやポスターがかなりあることです。Texas A & M 大学のスーパーコンピュータ部門の責任者と話をすると、70%のジョブが Gaussian だということでした。ちなみにコンピュータの性能は合計で約 900GFLOPS です(2003 年に導入)。一方、日本での研究は、主に PC クラスタを利用した研究が中心だと話すと、管理に無駄な能力を割いているのではないかな等の議論を出ておりました。確かに、科研費の傾斜配分が、このような事態を招いた感もあるように思えます。当の本人も PC クラスタでの計算をよくやっています。理由は、うまく行くか分からない計算をすぐスーパーコンピュータ利用へ持って行くのは、あまりにもリスクが大きいためだと考えております。そこで、本推進室では、PC クラスタで出来る計算は個々の研究者が所有する PC クラスタで行って頂き、一方、明らかに計算が困難な巨大分子を、如何に戦略的に研究を行うかという視点に立って、分子科学計算のサポートを行いたいと考えております。後で示しますが、PC クラスタは確かに速く、費用の面でも経済的なことも明白です。利用者はその時々に応じて使い分けのような目安の提示もしていこうと考えております。

以上が分子科学計算推進室の設置経緯と役割となります。最後に蛇足ですが、SC2005 で得た情報に、次世代計算である Field Programmable Gate Array (FPGA) 基盤技術の紹介がありました。これは、プログラムすることができる LSI のことで、皆さんご存じの東工大に導入された ClearSpeed 等がその例です。この ClearSpeed (<http://www.clearspeed.com/>) はあるソフトを介して、LSI のアルゴリズムをプログラムし直して様々なライブラリー、例えばフーリエ変換などの擬専用ボードを作ることが可能になります。一方、このような技術の登場は、別に新しいことはありません。実は我々世代より上の方々は身をもって実感されているはずです。それは、ベクトルプロセッサの出現に対応し、日本のコンピュータが世界を席巻した時代と類似する可能性を秘めています。ベクトルの時代は、速いメモリーを使い比較的少数の演算器を高速で回したのが日本の技術だったと思われませんが、今は、膨大な

量の遅いメモリーと沢山の演算器を並列に一度に計算する方向へ進んでいるとのこと。そしてその代表がFPGA基盤技術となります。仮にこの技術が、ベクトル演算器が世界を席卷したときのような可能性を秘めているのであれば、分子科学計算の分野もそこへ向かって進むべきと思われる今日この頃です。

5.3.2 三ヶ月間の活動報告

前置きが長くなりましたが、10月末に分子科学計算推進室が設置された後、最初の活動として昨年11月25日に上記でも有名なプログラムに関し、「Gaussian 03 講習会(サポート編)」というタイトルにて講習会を実施しました。目標は利用者のスキルアップです。今までの本センターの講習会は、企業の方がされていたようですが、一步踏み込んだ講習会を行いました。そのため利用者から講習会の約一ヶ月前までに以下の二つの項目に関し、事前に電子メールにて提出をお願い致しました。

1. 研究されている系の説明と入力ファイル、また、その入力の問題点を明記してください。
2. どのような講習会を希望するかを率直にお知らせください。

このアンケートで分かったことは、Gaussian 利用者の研究領域の広さを再認識させられたことと、量子化学計算の理論に対する理解度にかなり広がりがあることでした。当日の状況は、約9名の参加があり、内訳は、九大所属の方が9名、福大所属の方が1名となりました。そして、これらの方々は、大別すると二つのグループが存在するよう思われました。一つのグループは、使い込んでいる方々で、溶液中での反応や安定構造の計算において予想もしないような計算エラーを生じ、それをどのように対処すべきか？という問題に対峙している方々です。もう一つのグループは、Gaussian というよりは、量子化学計算の理論に対する理解度がまだ不十分な感じ



Gaussian03 講習会(サポート編)の様子

の方々です。そこで、前者の方々に後者の方々を引っ張っていただくような講習会ができな

いかと思いました。これは、小生が大学生の時に研究室の先輩方に、輪講等でいつも牽引して頂いた経験から、そのような雰囲気を作りたいと思ったからです。現在は、電子メールで意見等のやりとりすることが増えてきましたが、顔突き合わせた議論の良さを取り戻したく、思っております。馬鹿な質問を先輩に投げかけ、「アホだなあ、こうやるんだよ。」と教わる楽しさを知って頂きたいです。一方、面白い現象が、量子化学計算の理論に対する理解度がま

だ不十分な感じの方々に現れました。それはまず、ほぼどの方も Gaussian03 の Windows 版を利用していました。そして、その方々の研究テーマに限って、とてもパソコンでは計算の出来ないような系でありさらに、小生から見てもとても魅力的なテーマをお持ちだったことです。長く量子化学計算に携わっておりますと、自ずと計算可能な枠を作り、分子の大きさを制限しているようなところがあったのでしょうか。今回参加された方々は多分そのような色眼鏡がないため、そのままの研究対象だったのでしょうか。そこが実に印象深く、勉強になり、まだまだ勉強中となっています。一方、理解度の不十分な方々もじきに使い込んだ方々と同様な問題に出くわし、Gaussian は手軽に出来るように思われがちですが、実は大変難しいことを認識されると思われます。さて、このような利用者に対し、理解度の不十分な方には、原子軌道線形結合の話や水素分子の HF 計算およびポスト HF 計算である CI 計算等を簡単に説明致しました。多分、普通の 4 年の学生が 1 年近く輪講等を行い、学ぶものですが、利用のみという視点に立った計算上の留意点を（不十分になるとは分かっていたのですが、）説明したつもりです。9 名の内、8 名が入力データを持参し、2 名の問題は、ほぼ解決し、残り 6 名は、継続してサポートをしております。その後もほぼ全員と連絡を取り、ずっとサポートしている状態です。一方、問題点としては一人でのサポートですので、遅れ気味な状態があるかもしれません、お許しください。これ以上増える可能性がありますと、サポート側の増員が不可欠になると思われます。

今後の活動は、以下の通りです。

- 扱う化学物質によっては、プログラムコードを他の GAMESS（一般化学）、MOLPRO（物理化学）、VASP（結晶、工学）、Amber（生物学）などのコードへ変えるべき系も見受けられる。そこで、これらのプログラムの新規導入と講習会を検討する。
- 分子科学計算に特化したフォーラムを 2006 年 3 月中に行う。特に、新発足に伴うパイロット的な意味合いの研究会とし、皆様のご意見、ご要望を伺うことを目的とする。

5.4 国際会議 SC05 での研究展示

SC は、毎年米国で行われている計算機とネットワーク技術に関する国際会議であり、特に近年は出席者数が 5000～7000 人と、この分野としては非常に規模が大きく、最新技術の情報交換を行う貴重な場となっている。扱われるトピックは多岐にわたるが、最も重点がおかれているのは、大規模科学技術計算のための高性能計算機に関する話題である。会期中の主な行事は研究発表と企業や研究機関による Exhibit(展示) であり、他に計算機の最新技術に関する講習 (チュートリアル) やパネルディスカッション、招待講演等も行われる。



2005 年開催の SC05 は 11 月に米国シアトル市で開催された。本センターからも、会場の展示ブースを借りて研究活動に関する展示を行い、世界の企業や研究機関からの参加者と情報を交換した。研究展示は以下の 5 つのテーマで行った。

- Shaping the Future with Computational Scientists in Japan
- Grid-enabled Fragment-MO by GridRPC
- The Advanced Campus Network
- Web Mining and Data Engineering
- Peta-scale System Interconnect Project

5.4.1 Shaping the Future with Computational Scientists in Japan

Shaping the Future with Computational Scientists in Japan

Computing and Communications Center, Kyushu University

Mission

In modern science and technology, large-scale numerical computation plays a vital role in various situations such as virtually reconstructing extreme phenomena which are impossible in an experiment, and estimating the durability of a product without destroying it.

To carry out this kind of advanced research with numerical computation, a vast number of floating-point operations must be performed. To achieve more accuracy in such analysis or simulation, more and more calculations are required. Therefore, throughout the history of science and engineering involving numerical computation, people have always demanded fast computers—the fastest available at the time.

The Computing and Communications Center offers computing services on a supercomputer system and high-performance computing servers to academic researchers all over Japan. Our services contribute to various academic research fields such as fluid dynamics, geophysics, structural mechanics, nuclear physics, molecular science, and materials engineering.

To accomplish this mission, our teaching, technical and administration staff have focused their efforts to design the most useful and reliable computer systems with the latest hardware, to provide users with the most friendly software environment, to maintain the systems to their best of the performance 24 hours a day, and to keep up with the ever-growing computer technology.

Machines

Vector-Parallel Supercomputer: Fujitsu VPP5000/64

- Started services in January 2001
- Replacement scheduled in May 2007
- 9 × 8 GFLOPS × 64 nodes
- 48GB Memory: 40 Node
- 16GB Memory: 24 Node
- 64 GFLOPS, 70GB Memory in total
- × 57TB RAID
- 1.18 billion yen / year (approx. US\$ 10 million / year)

Since this machine can achieve a computing speed close to the theoretical peak in many problems, this machine can still exhibit a great strength in scientific computation after these 5 years of its operations.

Scalar-Parallel Computer: IBM eServer p5 595

- Started services in March 2005
- POWER5 1.9GHz
- (64CPU, 512GB): 1 node
- (64CPU, 256GB): 5 nodes
- (32CPU, 128GB): 1 node
- 416 CPU - 3.16 TFLOPS, 1.9TB Memory in total
- × 50TB RAID
- 285 million yen / year (approx. US\$ 2.4 million / year)

This vast computing resource is the key to our new user-friendly services: flat rate plans and exclusive resource plans.

Computing and Communications Center
Kyushu University
Hakozaki, Higashi, Fukuoka 812-8581 Japan
<http://www.cc.kyushu-u.ac.jp/>

Showcase of Cutting-Edge Results

Our primary mission is to support leading computational scientists through our large-scale computing services. Now, let's peek at a preview of the future -- the future being shaped by our users!

The first image (right) shows propagation of seismic waves inside the Earth. It is an example of how supercomputing makes us "see" the inside of our planet without dissecting it. This simulation was carried out on our p5 system.

Simulation of Seismic Waves Propagating inside the Earth
(by courtesy of Prof. Hiroshi Takemura, Kyushu University)

The next example (left) is the three dimensional analysis of a half melted silicon. This illustrates how we can analyze the distribution of a physical quantity in a resolution so high that we cannot place the sensors in the experiment. This simulation was carried out on our VPP5000 system.

Three Dimensional Steady Marangoni Flow in a Half Liquid Bridge of Silicon Melt
(by courtesy of Prof. Hirokazu Inada, Kyushu University)

The last example (left) shows how we can now achieve a world's largest direct numerical simulation by modeling the physical equation directly and simulating it on a very fine-grained grid.

Recent development of computers has enabled us to simulate complex turbulent flows by solving the fundamental equations directly. In the present calculation, a series of direct numerical simulations has been made for the turbulent Couette flow with using the largest computational domain ever employed.

As a consequence, the quasi-coherent large scale structure emerging in the turbulent Couette flow has been successfully captured at the first time. This simulation was carried out on our VPP5000 system.

Direct Numerical Simulation (DNS) of Turbulent Couette Flow with a Large Computational Domain
(by courtesy of Prof. Hiroshi Kawamura et al., Tokyo Univ. of Science)

R&D Division

To bridge the gap between computational science and computer science, we have the Research Division consisting of computational scientists and computer scientists working together. The unique collaboration of these two types of experts is the key to our cutting edge to assist our users to carve out the future.

Computing and Communications Center
Kyushu University
Hakozaki, Higashi, Fukuoka 812-8581 Japan
<http://www.cc.kyushu-u.ac.jp/>

5.4.2 Grid-enabled Fragment-MO by GridRPC

Grid-enabled Fragment-MO by GridRPC

[Collaboration with Grid Technology Research Center, AIST]

J. Maki, T. Takami, R. Takano, J. Ooba, H. Watanabe, R. Nogita, S. Iwakiri, N. Sakai, Y. Shibus, Y. Nakagawa, M. Aoyagi

Overview

Thanks to the recent developments on the computational chemistry and the parallel computing environments, we can perform large-scale electronic structure calculations of biomolecules. One of the efficient methods is the Fragment-MO calculation developed by Dr. Kitaura, et al. Our aim here is to establish a strategy for grid-enabling of such a large application so that we can stably execute in grid computational environments. To this end, we have developed the loosely-coupled (LC) FMO which can be used to obtain electronic states of molecules with more than 20,000 atoms.

In the actual grid environments over multiple sites, however, the system can be unstable because of the various factors. The next point we must consider is how efficiency and robustness can be satisfied simultaneously in the large-scale simulation on the grid. We are developing GridRPC-based LC-FMO with an effective queuing system. In these panels, we show that our approach can be a candidate to achieve both properties, robustness and efficiency.

Electronic States of Proteins

The target molecule is divided into fragments for which *ab initio* calculation is performed. We can usually divide at Carbon-Carbon single bonds which are easily found in large organic molecules.

Fragmentation of molecule

Algorithm of FMO

Many classical and empirical methods, e.g., molecular dynamics, studies, Monte-Carlo calculations, semi-empirical quantum methods, etc., are mainly used to study large molecules. When we study functions of molecules, however, some of the properties on chemical reactions, responses of electrons, etc., cannot be obtained unless we have detailed information of the electronic states. In order to obtain such information precisely, *ab initio* MO calculations are used.

Loosely-Coupled Fragment-MO Method

Developed by Kyushu University and Fujitsu Kyushu System Engineering Limited (2004)

In order to realize large-scale computations in grid environments, we have developed loosely-coupled FMO in which the original GAMESS program is divided into several modules executing relatively large granularity tasks.

- The modules are coupled each other through input/output file transfers.
- This innovative structure of each module enables us to control tasks corresponding to real-time change of cluster environments.
- Then, a stable execution on distributed machines, PC clusters, large-scale grids, etc., is realized.

We have also developed an initial value database of fragment electron density to reduce the SCF loop counts and the total MO calculation with the grid visualization functionality.

Computing and Communications Center
Kyushu University
6-10-1 Hakozaki, Higashi-ku, Fukuoka 812-8581 Japan
<http://www.cc.kyushu-u.ac.jp/>

National Research Grid Initiative
Work Package 6 (WP6)
Leader: Mutsumi Aoyagi
http://www.naregi.org/research/wp06_e.html

Effective Execution of Nano-Applications

In the actual execution of FMO, rearranging computational tasks is necessary if we require high performance computing. Here, we show efficiency of the parallel execution on cluster machines where a FMO calculation of Lysozyme (1961 atoms, 125 residues, 69 fragments) was performed on 35 CPUs in AIST Super Cluster and NAREGI Grid System.

The left figures show a host-based timeline data of the calculation, where red points are plotted when the host works. It can be seen the white areas, representing idling states, occupy a certain amount of the total elapsed time. Thus, it admits of the further efficient execution. In the right figures, we plot the same data for each fragment, where each connected red line corresponds to a single task. It is shown that the inefficient execution is due to the widely-distributed task granularity. If we use the scheduler which can manage granularity information of each task, the total efficiency of the execution will be improved.

Grid-enabled LC-FMO by Ninf-G

There are several scenarios for grid-enabling of a given application: (1) description and execution of the program by the use of workflow tools (e.g., NAREGI Workflow Tool with Super Scheduler, for more details, see booth #1127 of NAREGI project), (2) parallelization by Grid MPI, (3) Grid RPC based reconstruction of the application, etc. In general, which scheme should be chosen depends on the actual properties of the granularity and the communication pattern of each task. The job execution using the workflow engine could be a powerful tool if an effective scheduler were given. MPI is generally used in the several types of parallel programs, e.g., SPMD or Master-Worker type models. While, on the grid environment, GridMPI can be used to grid-enable all the kinds of MPI programs, where synchronized communications across multiple sites are supported with the help of an MPI server, it is difficult to realize effective executions when tasks are widely distributed shown in the figures above. In view of the flow pattern of the FMO modules, e.g. Fragment and Frag. Pair modules, it is clear that the task-flow is similar to that of the Master-Worker model. Since the synchronized execution of each module is not necessary in the LC-FMO, we adopt the GridRPC by Ninf-G2 running on Globus.

Execution on Grid Environment

Chicken egg white cysatin: 1CEW
1701 atoms, 106 fragments

Elapsed Time

Ninf-LC-FMO orig. FMO	
Initial guess	37s 4s
Monomer	1h11m 59m
Dimer	2h16m 2h11m
Energy	4s < 1s
Total	3h28m 3h10m

Xeon 3GHz 16CPUs in NAREGI Grid with Ninf-G2.4.0 on QT1.8.1
MO Basis set: 3-21G
20 monomer iterations until convergence

Conclusion

The stable execution of a large application on grid environments often takes an extra time to acquire robustness. In our approach, however, the actual time consumption by the GridRPC-based loosely-coupled FMO is comparable to the original FMO. Thus, the grid-enabling procedure is successfully applied by the use of GridRPC with an effective queuing system. In general, our approach to construct grid-enabled applications will be one of effective candidates in order to realize robustness and efficiency in the grid computing environments.

Computing and Communications Center
Kyushu University
6-10-1 Hakozaki, Higashi-ku, Fukuoka 812-8581 Japan
<http://www.cc.kyushu-u.ac.jp/>

National Research Grid Initiative
Work Package 6 (WP6)
Leader: Mutsumi Aoyagi
http://www.naregi.org/research/wp06_e.html

5.4.3 The Advanced Campus Network

The Advanced Campus Network

Koji OKAMURA

Main Functions

High-Speed Campus Backbones and the Connection of Remote Facilities

We offer gigabit class backbones within each of the six major campuses located in Fukuoka City and surrounding areas, and a "star-shaped, gigabit class high-speed, inter-campus backbone among them. In particular, the newest campus is connected to the core of the "star" by a 10Gbps link. To establish this connection, we have chosen Hitachi GS4000/GS3000 and Allied Telesyn CentreCom924, both renowned for their stable IPv6 support.

We have also integrated the LANs of the other remote facilities distributed all over Japan into a single campus network by the local IP network services provided by commercial communication companies and the VPN technology.

九州大学総合情報伝達システム (KITE) ネットワーク構成図 (2005年10月現在)

The New Campus Network

The new campus started its service this October. The new campus network installed in this campus provides advanced technologies to support the advanced research and education here. Major features of the new campus network are: 10Gbps-10Gbps connection to the main campus, native IPv6 readiness and IP Multicast availability on all network segments with satisfactory quality. This presentation introduces the methods for supporting IPv6 and IP Multicast functionalities to the users. First of all, as an infrastructure of the network, the optical fibers are connected from all buildings to the main Core NOC (Network Operation Center). In addition to that, from all floors of the buildings, optical fibers are connected to the NOC of the building. As for Layer 2 data-link, Gigabit Ethernet is adopted. By using 802.3Q VLAN, the network segments of Layer 2 are completely independent from the physical topology of the optical fibers over the campus.

Computing and Communications Center
Kyushu University
Hakozaki, Higashi, Fukuoka 812-8581 Japan
<http://www.cc.kyushu-u.ac.jp/>

Main Routing Switches

As the core router, we chose GS4000 (320E) from Hitachi Incorporated. And as the core switch of each building and the switch of each floor, we chose GS4000 or GS3000 from Hitachi and AT9924 from Allied Telesyn Incorporated, respectively.

These switches can support IPv6 and IP Multicast very speedily and efficiently.

Practical IP Multicast Support on all over the Campus

IP Multicast is an essential feature for the large group communication tools such as Access GRID. But its process is so complicated that it is difficult to tune the network equipment for enabling IP Multicast with practical quality. To satisfy users to use IP Multicast, not only the protocol decision of the Layer 3, but also the choice of Layer 2 equipment with sufficient capabilities is important. Because Gigabit Ethernet is "shared" media, every communication reaches to every terminal regardless of whether it is attending the group communication or not. Therefore, to enable practical group communication, we need some technologies to block packets before reaching the terminals that are not in the group. AT9924 from Allied Telesyn Incorporated, which is installed as a switch of each floor of the new campus, satisfies this demand with technologies of IGMP snooping and MLD snooping. With these technologies, the switch can transmit Multicast data only for the terminals that are attending the group communication. In this way, practical IP Multicast is enabled with both IPv4 and IPv6. Now, in the new campus, a huge number of multi-media conferences, such as Access Grid, can be held at the same time, by using this IP Multicast technology.

Computing and Communications Center
Kyushu University
Hakozaki, Higashi, Fukuoka 812-8581 Japan
<http://www.cc.kyushu-u.ac.jp/>

5.4.4 Web Mining and Data Engineering

Web Mining and Data Engineering

Sachio HIROKAWA¹, Eisuke ITOH², Noriko SUGIMOTO³, Hirofumi KAI⁴, Yoshihiro SHIMOUJI⁵, Yuji YASUMOTO⁶
^{1,2} : {hirokaw, itoh, sugimoto}@cc.kyushu-u.ac.jp
^{3,4,5,6} : {h-kai, y-shimo, y-yasu}@i.kyushu-u.ac.jp

Mission

Web is a new frontier of human beings in 21st century. Web mining is distinguished from traditional information retrieval by the characteristics of link-structure, semi-structure and dynamic progress. Deep analysis of such huge amount of web data and development of practical system is our goal.

High quality contents-mining with link information and semi-structure of Web data

The purpose of this project is semi-automatic construct knowledge base from web. For this purpose, we considered 4 steps: discovery, collection, extraction, and integration.

Results:
 [Discovery] Repetition pattern discovery algorithms, automatic wrapper generation using discovered pattern, are proposed.
 [Collection] A smart topic crawler is developed. We implemented a smart link selection strategy to reach topic pages as fast as possible, and also implemented replaceable topic judge modules to increase precision. Further more, the crawler can learn topic words and link structure.
 [Extraction] Record extraction algorithms from a series of web documents are developed. A series of web documents have same appearance when a user views them with a browser, such as recipes, real estates, hotels.
 [Integration] An XML Database system is developed. It can manage various structured data.

[Application] For concrete application, we try to construct the Japanese web syllabi DB.

Data Analysis Tools : Data Matrix

Data matrix is one of facet analysis tools for structured documents such as XML data. Traditional IR (Information retrieval) system has only one axis for results listing. For example, Google returns ranked list of Web pages for user's query words. On the other hand, this matrix system has two axes for listing. User not only enter query words, but also select 2 attributes from structure elements of data. The system retrieves document files which are related query words, but it doesn't search whole document, only searches selected attribute parts of document. After that, the system clusters retrieved documents along with 2 attributes, and maps documents into matrix.

Further more, the system is implemented query expansion function. By clicking [zoom] button, you can easily to zooming your query. This system is powerful for complicated information retrieve, such as patent data search, financial analysis.

(This system is powered by GETA. <http://geta.cc.kyushu-u.ac.jp/>)

Computing and Communications Center
Kyushu University
Hakozaki, Higashi, Fukuoka 812-8581, Japan
<http://www.cc.kyushu-u.ac.jp/>

Web Mining and Data Engineering group
Kyushu University
Hakozaki, Higashi, Fukuoka 812-8581, Japan
<http://matu.cc.kyushu-u.ac.jp/>

Data Analysis Tools : Concept Graph

Concept Graph Construction from document files
 Given a document set D .

The **Concept Graph** shows dependency of terms in a given document set. The system uses traditional IR techniques at first. Given a document set D , the system scans all documents, picks up terms from each document, and counts frequency of each term. And then, the system calculates dependency of each terms according to dependency definition.

The Concept Graph is powerful for understanding relation between terms, and for discovering hidden relations.

A music recommendation system using playlists

A music recommendation system based on
 Assumption: "Songs in a playlist are closely related."

It is possible to assume that songs or artists in a playlist have some close relationship, because playlist creator may select songs along with a theme.

We focus on playlists and use them as the data mining resources for a music recommendation system. We have retrieved about 13,000 playlists, and analyzed the frequency of artists/songs and the co-occurrence of artists/songs in the playlists.

We developed a prototype of music recommendation system as an application of **Concept Graph**. The concept-graph shows dependency of terms in documents. In this case, dependency of songs or artists will be illustrated in the graph. So, a song or artist recommendation system will be realized using this graph.

XDES: An eXtensible Data Entry System

System Overview

XDES is a heterogeneous eXtensible Data Entry System for XML data. Operational flexibility for adding, deleting, and modifying data schema is implemented by separating COI programs from the data schema, which is described as "data macro". Any combination of data items are allowed for realizing faceted classification and are described as "content macro" files from which data entry web pages are created automatically.

XDES is being used in Kyushu University since 2003 as a data entry system for 2,300 researchers, who are required to keep filling out 753 kinds of forms for the university evaluation. (<http://hydra.cc.kyushu-u.ac.jp/secure/>)

A trial for ID Federation

System Overview

We try to implement a prototype of ID-Federation system using XDES as the backend DB system.

- User Agent attempts to access some record resource at the Service Provider.
- At the Service Provider, Access Controller performs a security check. If a valid security context at the Service Provider doesn't exist, the Access Controller redirects the client to the IDP Discovery Service.
- The client informs the Service Provider of the location of an endpoint at an Identity Provider through the IDP Discovery Service.
- IDP Discovery Service redirects the client to the SSO/SLO Service at the Identity Provider.
- The user is identified by the SSO/SLO Service by some means.
- The Identity Provider creates a "security pass" and transfer it to the Service Provider. Based on the "security pass" identifying the user, the Service Provider returns the resource.

Computing and Communications Center
Kyushu University
Hakozaki, Higashi, Fukuoka 812-8581, Japan
<http://www.cc.kyushu-u.ac.jp/>

Web Mining and Data Engineering group
Kyushu University
Hakozaki, Higashi, Fukuoka 812-8581, Japan
<http://matu.cc.kyushu-u.ac.jp/>

5.4.5 Peta-scale System Interconnect Project

Cutting the Edge of a Petascale Computing World ~ Overview of Petascale System Interconnect (PSI) Project ~

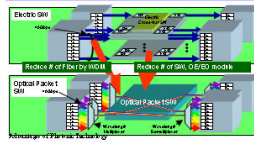
Kyushu Univ., Fujitsu Limited, Fukuoka IST and ISIT Kyushu

Vision and Mission

PSI (Petascale System Interconnect) project is one of the national projects on "Fundamental Technologies for the Next Generation Supercomputing" of MEXT (Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology), Japan. The duration of the project is three fiscal years 2005-2007. The goal of PSI project is to develop technologies enabling petascale supercomputing systems with hundreds of thousands of computing nodes.

To achieve ten times higher cost/performance ratio, the project tackles with the following three fundamental technologies: (1) small and efficient optical packet switches, (2) low-cost, high-performance MPI communications, and (3) methodologies for evaluating and estimating the performance of petascale systems.

Ultra-High Speed Opto-Electrical Hybrid Interconnect



Optical Packet Interconnect Switch System
Optical packet interconnect systems using Terabit class large-bandwidth interconnection by WDM and high-speed optical switch technology will be studied and developed to reduce the number of interconnect cables and switch elements.

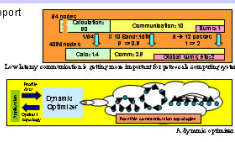
Compact O/E Array Module Technology
Compact and reliable parallel optical-interconnect modules are mandatory to realize the large-bandwidth board-to-board interconnection. The target size of our prototype modules is less than 1/10 compared with conventional XFP (10 Gbit/s Small Form-factor Pluggable) optical modules.

Hardware and Software for High-Speed MPI

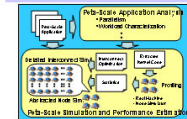
Interconnect network with collective communication support. An overhead for the collective communication is being dominant as the number of processing nodes increases. The goal of this research is to develop an intelligent switch architecture which dramatically reduces the overheads by hardware support of collective communications.

Adaptive approach for MPI communication

Dynamic optimizing technologies that use profile data to decide the optimal way of communication at runtime will be studied. Those technologies enable the efficient use of petascale computers by multiple users.



Peta-Scale System Evaluation Methodology

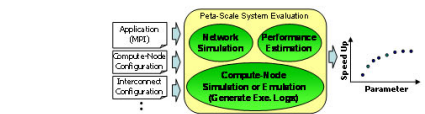


The goal of this theme is to develop a performance evaluation environment for petascale system network designs. It is essential to explore the design space of system interconnection in order to show the potential ability of massively parallel computing. To reach the goal, we tackle the following four challenges:

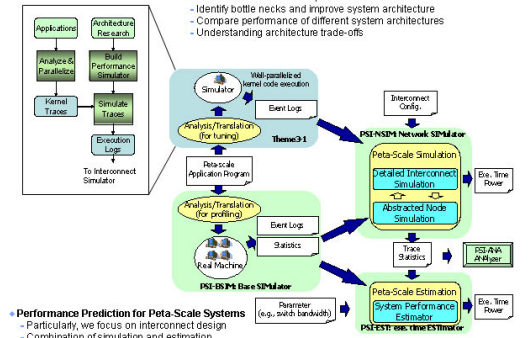
- Analyze petascale applications to extract the potential of parallelism.
- Make a fast, capable processor simulator to explore node architecture.
- Develop a fast, accurate petascale simulator to predict system performance.
- Construct an evaluation environment to explore interconnect design space by means of combining simulation and estimation.

Peta-Scale System Evaluation Methodology

Peta-Scale System Evaluation Methodology for Interconnect Design



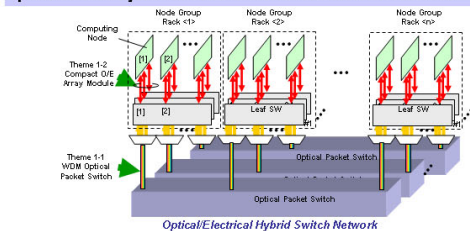
- Gain knowledge about Massive parallelization of important applications
 - Identify system requirements
 - Knowledge for future automatic massive parallelization
- Research Peta-Scale system architecture
 - Simulate Kernel codes for performance evaluation
 - Identify bottle necks and improve system architecture
 - Compare performance of different system architectures
 - Understanding architecture trade-offs



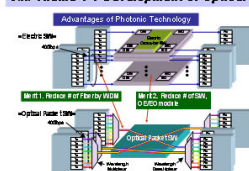
- Performance Prediction for Peta-Scale Systems
 - Particularly, we focus on interconnect design
 - Combination of simulation and estimation
- Support for Analyzing Interconnect Performance
 - Visualization tools
 - Analyzer for interconnect states

Ultra-High Capacity Interconnection by Photonic Switching Technology

Optical/Electrical Hybrid Switch Network for Peta-scale Interconnection



Sub Theme 1-1 Development of Optical Packet Interconnect Switch System



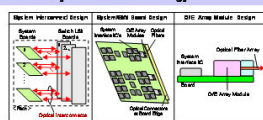
One of the big issues for the realization of petascale interconnect system is the huge amount of interconnect elements (e.g. cable, switch). We are developing optical packet interconnect systems, which use Terabit class large-bandwidth interconnection by WDM (Wavelength Division Multiplexing) and high-speed optical switch technology to reduce the number of interconnect cables and switch elements.

Prototype optical packet switch system will be developed by the end of 2007.

Sub Theme 1-2 Development of Compact O/E Array Module Technology

Compact and reliable parallel optical-interconnect modules are mandatory to realize the large-bandwidth board-to-board interconnection. Higher-density packaging and easy-handling on system boards (or switch boards) are key issues in optical interconnect modules for the deployment of petascale systems.

The target size of our prototype modules is less than 1/10 compared with conventional XFP (10 Gbit/s Small Form-factor Pluggable) optical modules.



Hardware and Software for High-Speed MPI

Background

Communication cost is a major factor on the performance of Peta-FLOPS computers that consists 10,000 to 100,000 nodes. Theme 2 works on research and development of technologies for implementing high-speed MPI (Message Passing Interface). MPI is a standard communication library for parallel programming. Especially, in Theme 2, collective communications of MPI are studied intensively.

Collective communication is a type of communication such as Barrier, Broadcast, Gather, Scatter and Reduction, that involves a group of nodes. The effect of cost for collective communications become significant as the number of node increases. Theme 2 tackles to reduce this cost with following technologies:

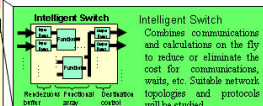
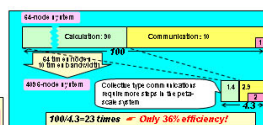
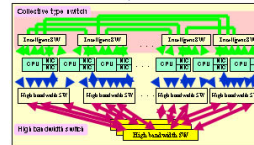
- Intelligent switch with collective communication support
- Adaptive approach for MPI Communication

Interconnect Network with Collective Communication Support

An overhead for the collective communication is being dominant as the number of processing nodes increases.

The goal of this research is to develop an intelligent switch architecture which dramatically reduces the overheads by hardware support of collective communications.

Dedicated no search for communication pattern



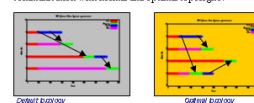
Adaptive Approach for MPI Communication

Optimal topology for collective communication depends on the status of the parallel machine at runtime, such as the load-balance on each node or network collisions by other parallel programs. Therefore, technologies for performance profiling and dynamic optimization will be studied to reduce communication cost as much as possible.



Effect of the adaptive optimization of topologies

Following figure shows the simulated time of broadcast communication with normal and optimal topologies.



Study algorithms for dynamic optimization

Using a sample simulator to study algorithms for extracting critical path in communications and improving total communication time.

