

AICS Spring School 2014
5-7 March, 2014



AICS公開ソフトの紹介

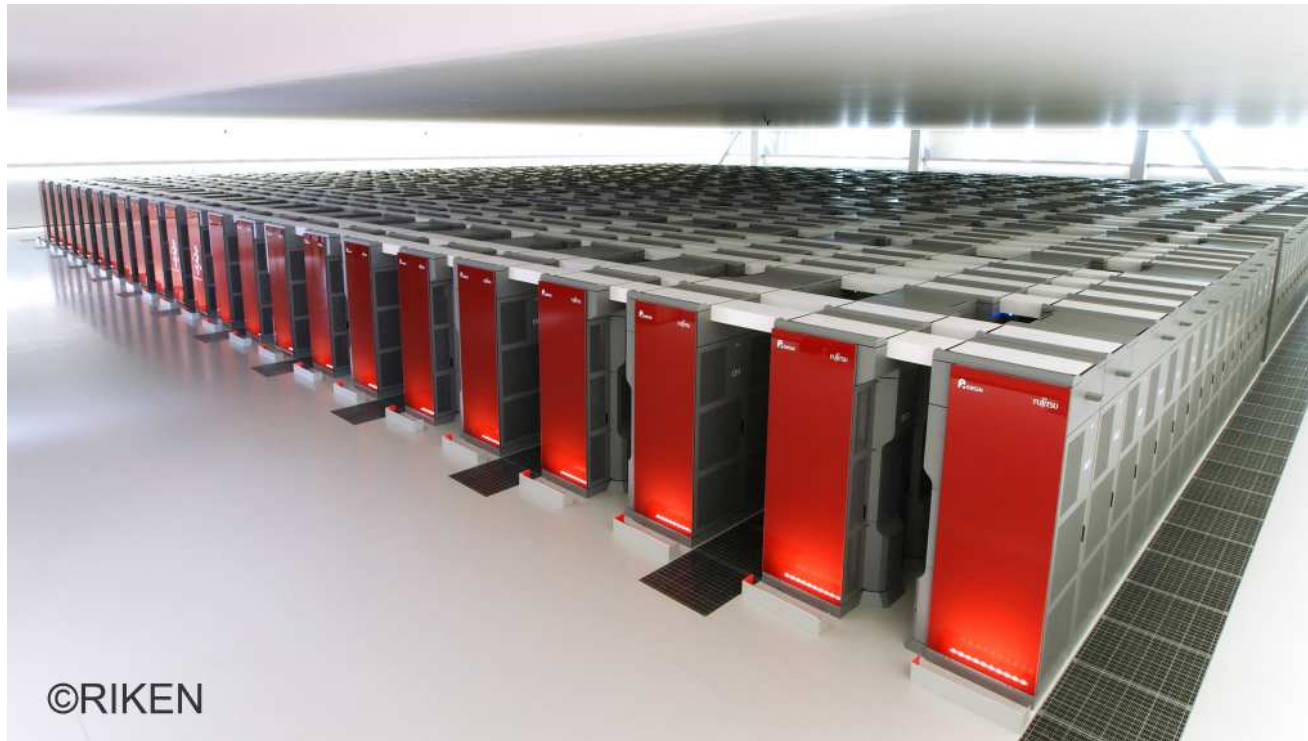
理化学研究所 計算科学研究機構

伊藤 聡

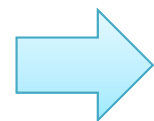
2014年3月7日



実務で「京」を使うとき



世界最高性能級のハードを実務にどう使うか？



ソフトウェアは？

ソフトウェアをどうするか？

1. 使えるものがあれば、使う
2. 使えるものがなければ、作る

- ◆ 商用 (ISV) ソフト
使いやすいユーザーインターフェース、しっかりしたサポート、高い堅牢性、充実したマニュアル
費用負担が大きい、高並列未対応
- ◆ オープンソースソフト
高いユーザーカスタマイズ性、一点に優れる、サポート体制の不備、無保証

プロのプログラマ：『普段はプログラムを書かないが、書けと言われれば、既存のものより優れた（高並列、高速、高精度）ものを書ける』

オープンソースソフトウェア

- ◆「京」での各種オープンソースソフトウェアの動作状況を確認
- ◆「京」の共有領域に搭載

ヘルプデスクによるオープンソースソフトウェア等翻訳・動作確認状況
HPCIポータルサイト

<https://www.hpci-office.jp/materials/k-oss.pdf>

「京」への搭載状況

京ポータルサイト(「京」ID取得者のみアクセス可能)

<https://k.aics.riken.jp/cgi-bin/K.ja/index.cgi>

[京ポータルへ](#)

AICSが開発・移植したソフトウェア

特 徴

- ◆「京」のIDを取得している人はだれでも自由に利用可能
- ◆「京」の/opt/aics/ 以下にオブジェクトをインストール済み
- ◆「京」の能力(高並列性)を十分に発揮できる最新アルゴリズム
- ◆「京」以外のシステムでも利用可能(各ソフトウェアのライセンスを確認のこと)
- ◆ 商用ソフトウェアではカバーできない機能

AICSが開発・移植したソフトウェア(システムツール系)

Omni XcalableMP	
概要	Omni XcalableMP は、Fortran および C の拡張として定義された指示文ベースの並列言語 XcalableMP のコンパイラである。Omni XcalableMP を用いて、並列プログラムを容易に開発することができる。
ウェブページ	http://www.hpcs.cs.tsukuba.ac.jp/omni-compiler/xcalablemp
担当チーム	プログラミング環境研究チーム
サポート	半年ごとのバージョンアップ、随時のバグ修正および質問対応


Netcdf	
概要	NetCDFはプラットフォームに独立なファイルを扱うためのライブラリです。Parallel netCDF, HDF5, Szip のライブラリを含みます。Frontend、シリアル、MPIのそれぞれの環境でSzipありとなしの合計6環境を提供します。
ウェブページ	http://aics-sys.riken.jp/releasedsoftware/ksoftware/pnetcdf.html
担当チーム	システムソフトウェア研究チーム
サポート	バグが報告されて担当者側で再現できて修正できるものは修正。version up で解決する場合は version up することもある。フロントエンド及びプリポストサーバにコンパイラ及び MPIが追加された場合の対応は原則として行わない。

Xcrypt	
概要	Xcrypt は、並列ジョブの制御を容易に行うためのスクリプティング言語です。バッチジョブスケジューラの違いによらない統一的なユーザインターフェイスを提供します。ジョブの制御に有益な機能をモジュールとして作成できるように設計されています（いくつかの機能は組み込みモジュールとして実装されています）。
ウェブページ	http://super.para.media.kyoto-u.ac.jp/xcrypt/index.html
担当チーム	利用高度化研究チーム
サポート	随時のバグ修正及び質問対応

AICSが開発・移植したソフトウェア(システムツール系)

KMR (K Map-Reduce)	
概要	KMR (K Map-Reduce) はポスト処理等のデータ処理を K 上で容易に記述するためのライブラリです。MPI 等より記述が容易でありクラウドでのデータ処理で定評のある map-reduce モデルを K 上で提供します。
ウェブページ	https://mt.aics.riken.jp/kmr
担当チーム	プログラム構成モデル研究チーム
サポート	メンテナンス (バージョンアップ管理)、バグ修正、QA対応に可能な限り対応する

PRDMA(Persistent Remote DMA)	
概要	PRDMA は、Remote DMA (RDMA) が利用可能なインターコネクト上で通信レイテンシや計算と通信の並行処理を改善するため、MPI 標準の永続通信 (Persistent Communication) プリミティブの高速実装を提供するライブラリです。
ウェブページ	http://aics-sys.riken.jp/releasedsoftware/ksoftware/prdma.html
担当チーム	システムソフトウェア研究チーム
サポート	バグ修正 + α (初期のちょっとしたトラブル切り分け)

京を待ちわびて	
概要	ジョブが実行されるまでの予想待ち時間を計算、表示するツール群です。ジョブの予想待ち時間を提供するコマンドを/opt/aics/job/以下のディレクトリに設置しました。k_waittimeはノード数と実行時間からなる待ち時間表を表示します。k_sched_nowlは、今すぐに空いているノード数と実行時間を表示します。k_sched_calcは、与えられたノード数と実行時間から待ち時間を計算し表示します。  第3回「京」ユーザブリーフィング説明資料 (ジョブ待ち時間予測ツール)
ウェブページ	準備中
担当チーム	システム運転技術チーム
サポート	不具合があれば修正する。機能拡張の要望があれば検討する。

「京」で使えるソフトウェア(性能ツール系)

Scalasca	
概要	Scalascaは、MPI、OpenMP、MPI /OpenMPハイブリッドを使ったプログラムや並列プログラミング言語(XcalableMP/C)のプログラムの性能最適化を支援するためのツールです。特に通信や同期でのボトルネックになっているところを特定し、その原因を調査するために使います。
ウェブページ	http://www.scalasca.org/start.html
担当チーム	プログラミング環境研究チーム
サポート	随時のバグ修正 (Scalasca自体の問題はScalascaチームへ修正依頼) および随時の質問対応

K-scope	
概要	K-scopeでは、Fortran 90及びFORTRAN 77コードのチューニングにおいてボトルネックとなり易いループ、分岐、プロシージャ呼び出しに代表されるプログラムの論理構造に特化した可視化を行う。本ツールを用いることで性能改善の最初のステップで必要となるコードの全体把握が容易となる。(本ソフトは「京」上ではなくユーザの端末上で動作する。)
ウェブページ	http://www.aics.riken.jp/ungi/soft/kscope
担当チーム	ソフトウェア技術チーム
サポート	バグ修正の対応はその改修規模に依存するが、軽微なものは行う。

「京」で使えるソフトウェア(数学ライブラリー系)

EigenK	
概要	Eigen-Kは「京」コンピュータのアーキテクチャを意識して開発された標準固有値問題のための固有値計算ライブラリです。密対称行列を対象として大規模並列計算はもちろん小規模問題でも既存の固有値ソルバよりも高速に計算できます。
ウェブページ	http://ccse.jaea.go.jp/ja/download/eigenk.html
担当チーム	大規模並列数値計算技術研究チーム
サポート	バグ修正及び開発元であるJAEAでバージョンアップがあれば対応

EigenExa	
概要	EigenExaはEigenKの後継として「京」コンピュータでの性能チューニングが施された標準固有値問題のための高性能固有値計算ライブラリです。EigenK同様に密対称行列を対象として大規模並列計算はもちろん小規模問題でも既存の固有値ソルバよりも高速に計算できます。
ウェブページ	http://www.aics.riken.jp/labs/lpnctr/EigenExa.html
担当チーム	大規模並列数値計算技術研究チーム
サポート	バグ修正及びバージョンアップのみ

MUMPS(a Multifrontal Massively Parallel sparse direct Solver)	
概要	MUMPSは、連立一次方程式を直接解法で解くライブラリです。本ライブラリは分散並列システムでの動作に対応しています。
ウェブページ	http://graal.ens-lyon.fr/MUMPS
担当チーム	プログラミング環境研究チーム
サポート	Q&A対応のみ

「京」で使えるソフトウェア(可視化ライブラリー系)

Polylib	
概要	物体の形状情報等のライブラリ。シミュレーション入力データ作成および結果の可視化に使用。
ウェブページ	http://vcad-hpsv.riken.jp/jp/release_software/V-Polylib/ ※前のバージョン
担当チーム	可視化技術研究チーム
サポート	原則as is、それ以上は要相談

Cutlib	
概要	Polylibと併用して、シミュレーション入力データ作成および結果の可視化に使用。
ウェブページ	http://vcad-hpsv.riken.jp/jp/release_software/V-Cutlib/ ※前のバージョン
担当チーム	可視化技術研究チーム
サポート	原則as is、それ以上は要相談

CPMLib	
概要	領域分割型のアプリケーションを記述するためのミドルウェア。データ領域確保、並列領域管理、通信などの機能を提供。
ウェブページ	準備中
担当チーム	可視化技術研究チーム
サポート	原則as is、それ以上は要相談

TextParser	
概要	Polylib、Cutlib、CPMLib等のAPI。階層構造のライブラリに対して対応するAPIであり、単体でも動作する。
ウェブページ	準備中
担当チーム	可視化技術研究チーム
サポート	原則as is、それ以上は要相談

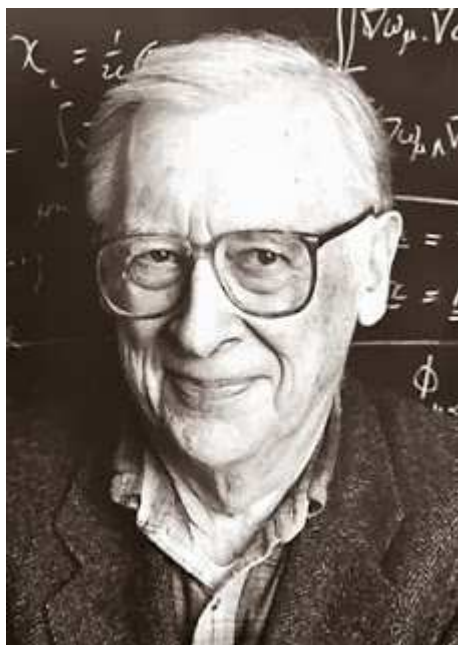
「京」で使えるソフトウェア(アプリ系)

NTChem	
概要	「NTChem」は一から設計をした新しい国産分子科学計算ソフトウェアである。既存ソフトウェアの持つ多くの機能をカバーしつつ、他のプログラムでは利用することのできない多くの量子化学計算法を含んでいる。 「NTChem」の第一版>には数千原子分子系に対する第一原理電子状態計算や数百原子分子系の化学反応過程追跡計算を実現するための分子科学理論が実装されている。さらに、京コンピュータなどのマルチコア超並列クラスタ計算システムの性能を引き出すことが可能な並列>アルゴリズムが実装されている。
ウェブページ	http://labs.aics.riken.jp/nakajimat_top/ntchem_j.html
担当チーム	量子系分子科学研究チーム
サポート	メンテナンス（バージョンアップ管理）、バグ修正、機能の要望対応、QA対応

SCALE	
概要	気象シミュレーション用のライブラリ、およびそれを利用した気象ラージエディシミュレーションモデル。超並列計算機システムで性能を出すよう、計算科学と計算機科学の専門家とのコデザインにより設計されている。
ウェブページ	http://scale.aics.riken.jp/ja/index.html
担当チーム	複合系気候科学研究チーム
サポート	バージョンアップ管理のみ行います。

GENESIS(生体分子向け高並列分子動力学ソフトウェア)【3月公開】

量子化学計算



John Pople
The Nobel Prize in Chemistry 1998

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}, t) = i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t)$$



解析的には解けないので、計算機で解く



ソフトウェアパッケージ Gaussian の開発
(1970)

“for his development of computational
methods in quantum chemistry”

量子化学計算 : NTChem

- 理論分子科学のソフトウェアは物質・生命科学の共通基盤
- ソフトウェアの研究開発は欧米に大きく遅れをとっている

世界中で使われている量子化学プログラム

- Gaussian (Gaussian, Inc.)
- GAMESS (Iowa State Univ.)
- Molpro (Stuttgart, Cardiff)
- Molcas (Lund Univ.)
- NWChem (PNNL)
- Q-Chem (Q-Chem, Inc.)
- TURBOMOLE (GmbH)



- すべてを「われわれ自身の手で」作り上げた日本が世界に誇る
ことのできる分子科学のソフトウェアを開発する

NTChem

開発リーダー : 中嶋隆人



量子化学計算: NTChem

- 汎用分子科学計算ソフトウェア
- 一から設計して作り上げた全く新しいソフトウェア
- 現バージョンでは既存ソフトウェアと比べて、**大規模で複雑な分子系の化学反応**を高速に、かつ高精度にシミュレーションできる
遷移金属を含む数百～数千原子からなる分子
- 既存ソフトウェアの持つ多くの機能をカバーし、既存ソフトウェアでは出来ない独自の方法を含む
- 他のプログラムよりも**高並列化**されている (特に「京」上で)

2013年8月、「京」上で公開



量子化学計算: NTChem

日本発の理論+ソフトウェア+京コンピュータで理論先導の科学, 理論予測から実験への流れを牽引!

HF & DFT

- 閉殻系, 開殻系 (1+2成分)
- 各種汎関数:
LDA, GGA, 混成GGA, LC-GGA
- 各種数値グリッド
- エネルギー微分 (1+2成分)
- 励起状態TDDFT

高速SCF計算

- 積分計算高速化
- 各種収束法:
DIIS, 2次収束, 直接最小化
- 各種SCF技術:
非整数占有数, レベルシフト
- 対角化フリー法 (PDM, 擬対角化)

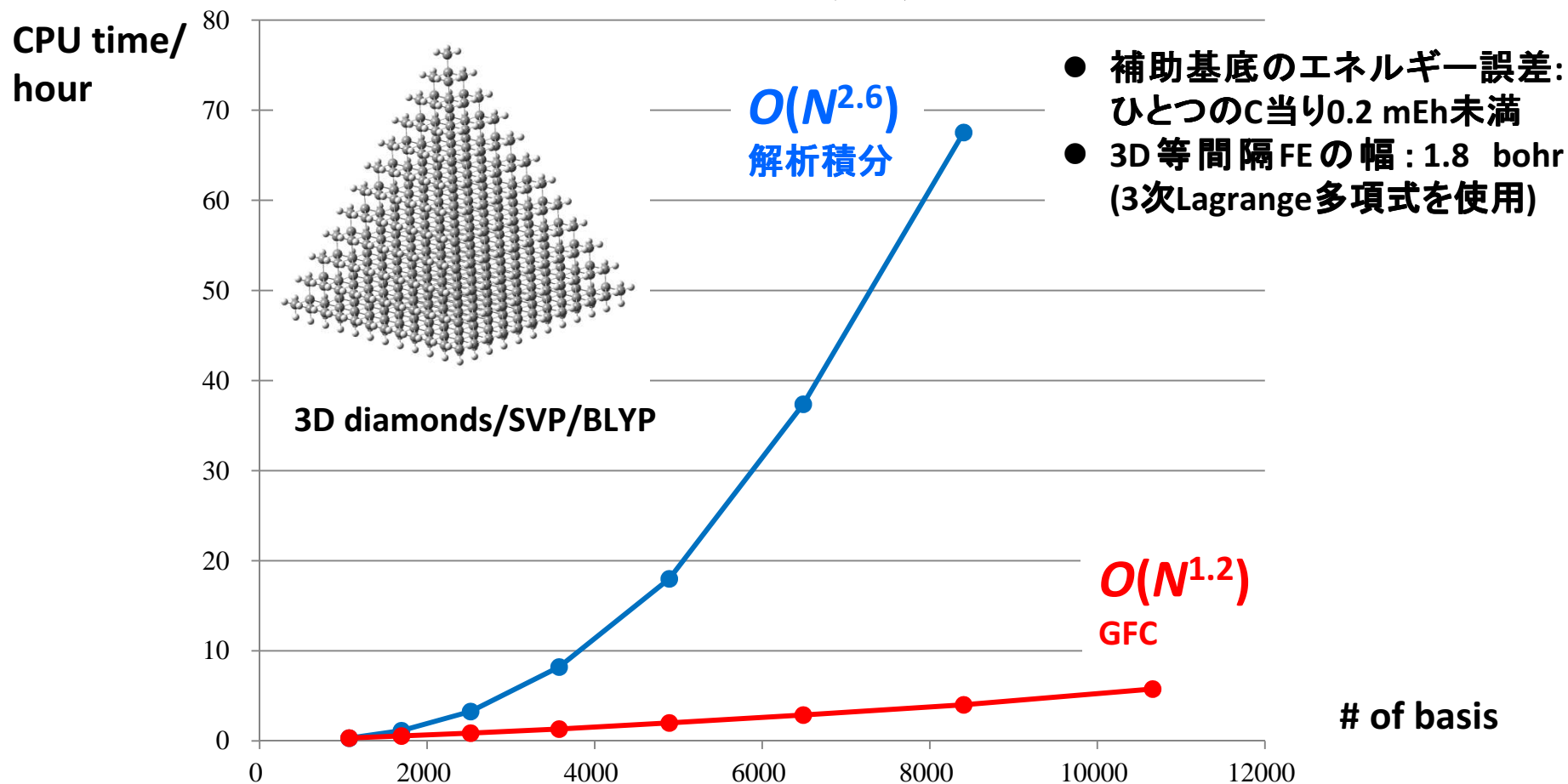
大規模分子計算

- クーロン積分Order-N化(GFC)
- Resolution of Identity(RI)法
- Dual-level DFT
- RI-MP2法
- 領域分割法 (ONIOM, QM/MM)

その他

- 波動関数法 (CC, MP2), QMC
- 擬ポテンシャル (ECP, MCP)
- 各種相対論的方法:
DKn, RESC, RA, スピン軌道効果
- NMR, EPR, 磁化率計算

GFC法



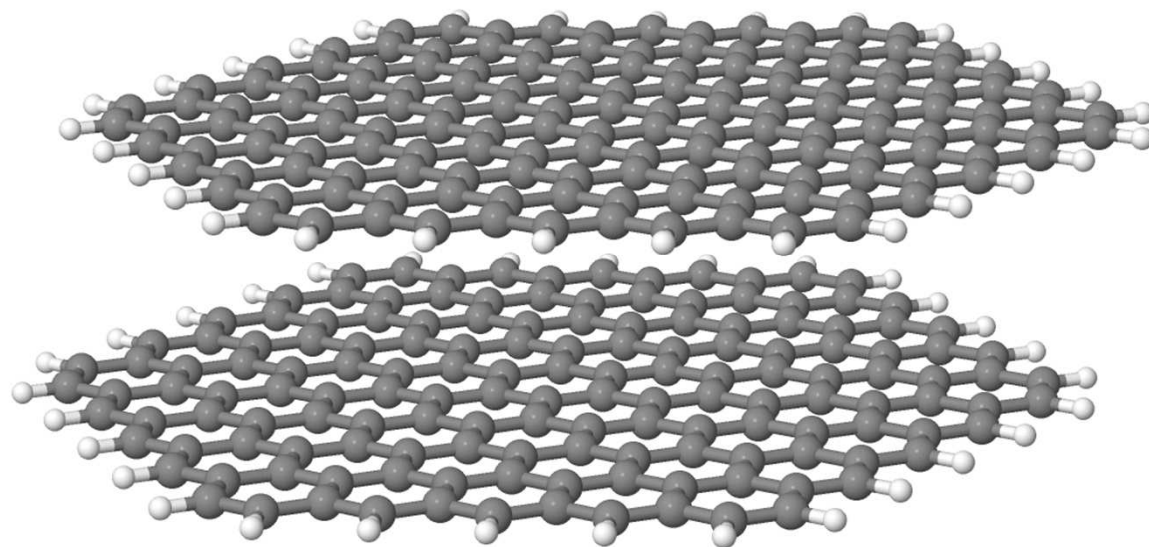
GFC法によって大規模で高速な分子計算ができる！

計算機に頼るだけでなく、新しい理論を開発することで科学の問題に切り込む

RI-MP2: 大規模分子計算

「京」でRI-MP2@NTChemを用いた大きな分子の
計算例: ナノグラフェン二量体 ($C_{150}H_{30}$)₂

360原子 9,840原子軌道 (RI-MP2/cc-pVTZ)



NTChem



世界記録規模のRI-MP2計算を京8,911ノード71,288コアを用いて
実行, 65分で計算終了 (実行効率43.3%)

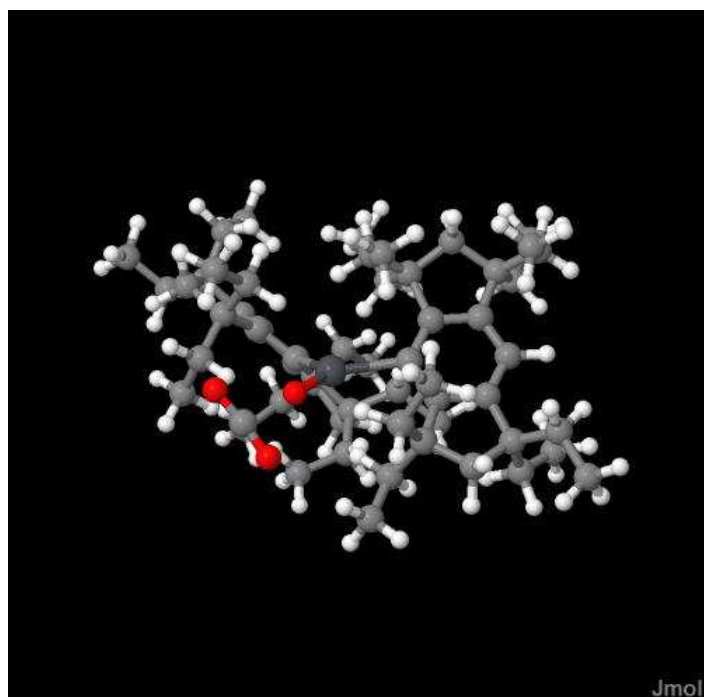
相対論的分子理論を使った化学反応探索

PlumbanoneのPb=O結合へのCO₂挿入の反応経路探索

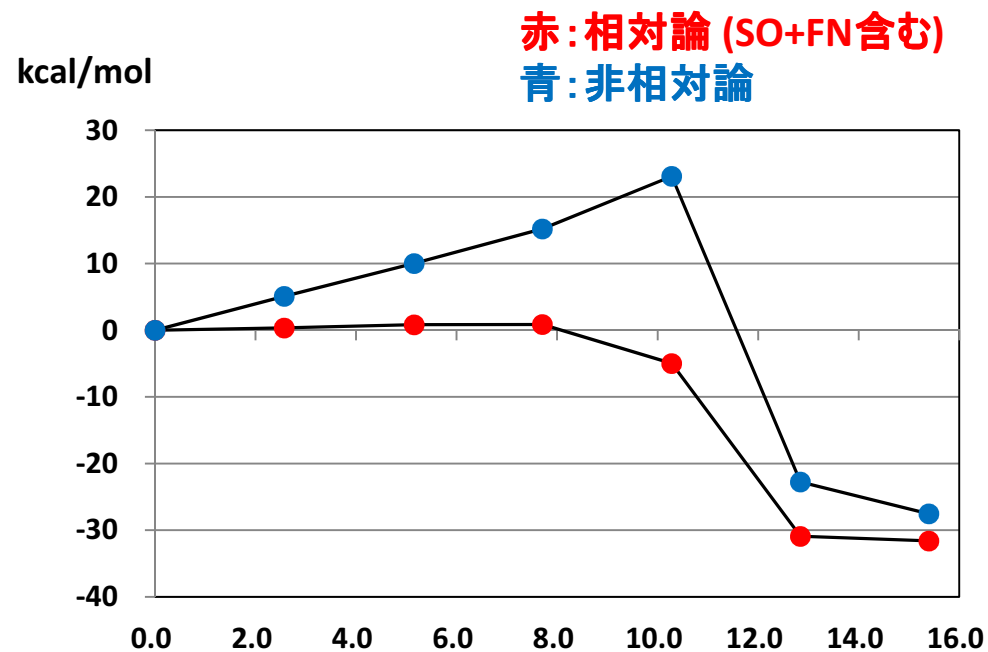
- Geはレアメタル, 同族の重元素である鉛に替えてみよう

Geと比べて相対論効果が大きい

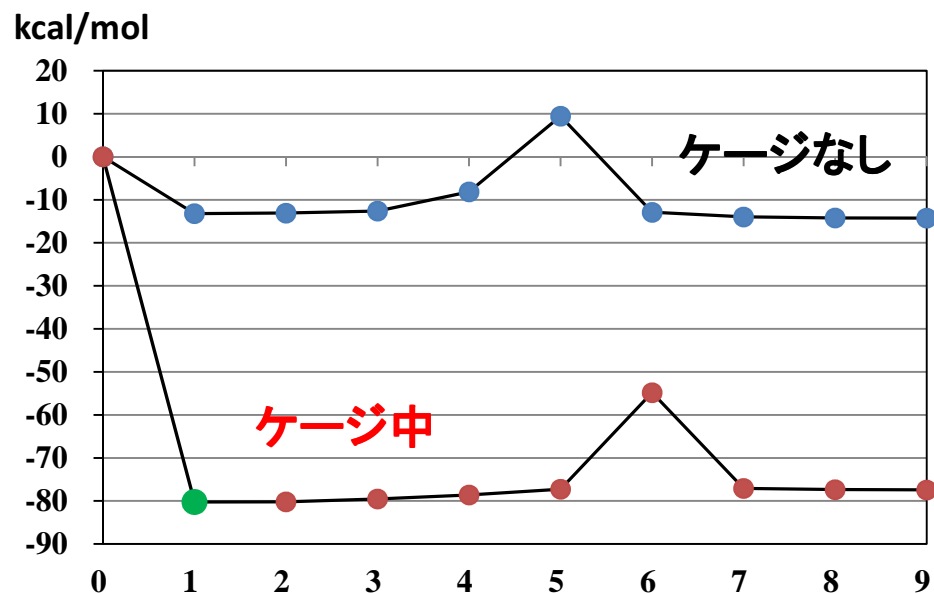
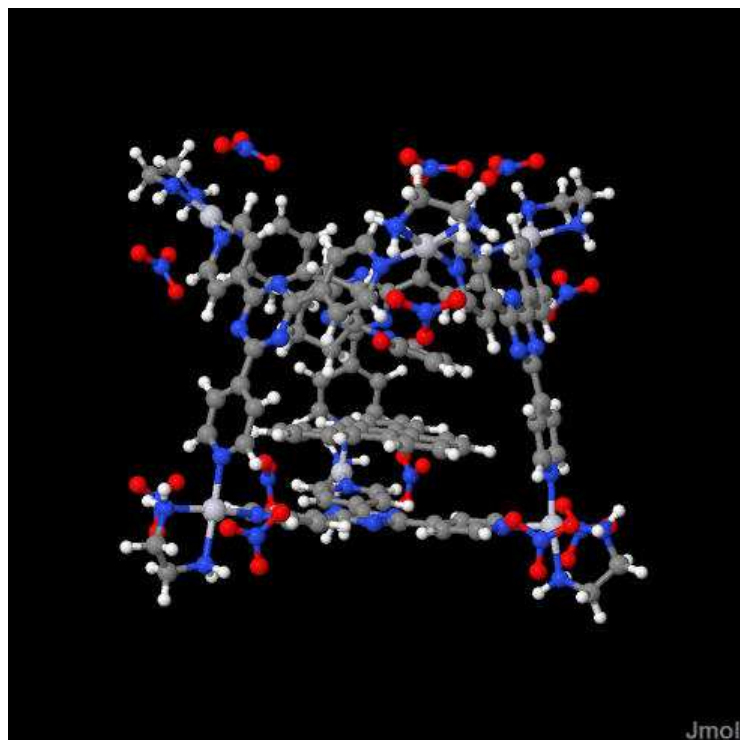
シミュレーションによりGeと同じく高い触媒活性を持つことを示唆



NTChemでしかできない計算

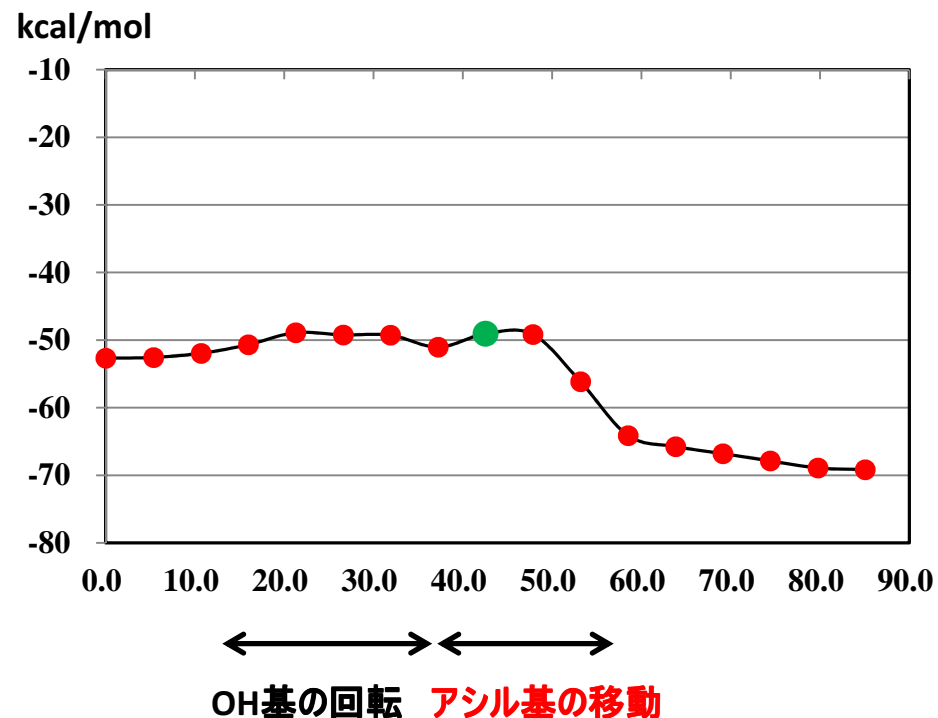
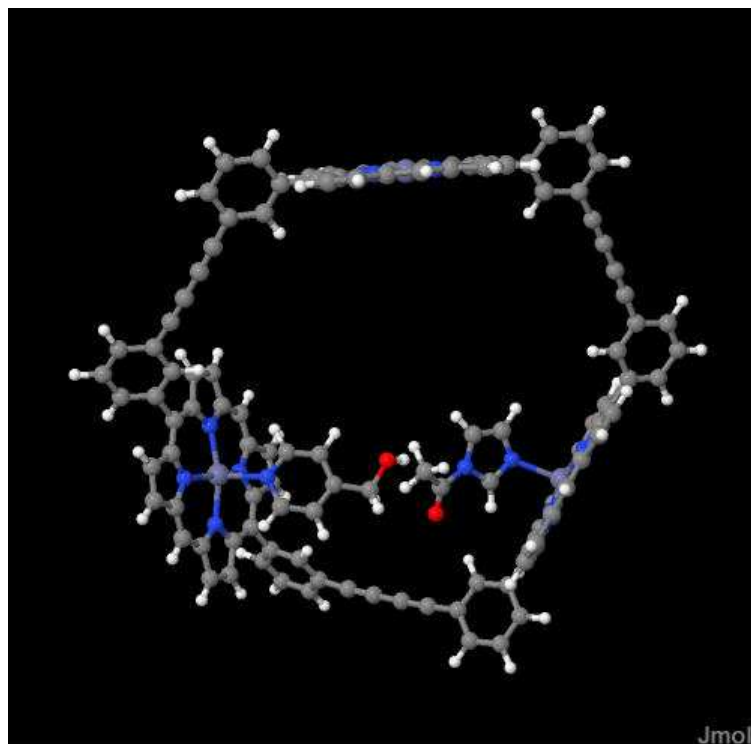


M_6L_4 ケージ超分子中のDiels-Alder反応



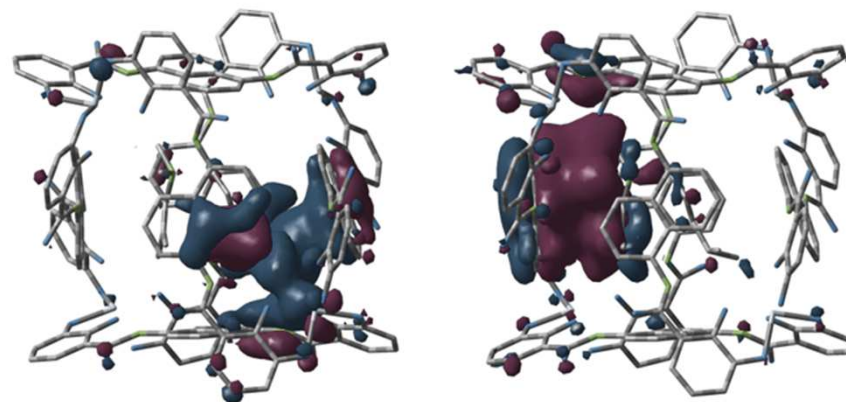
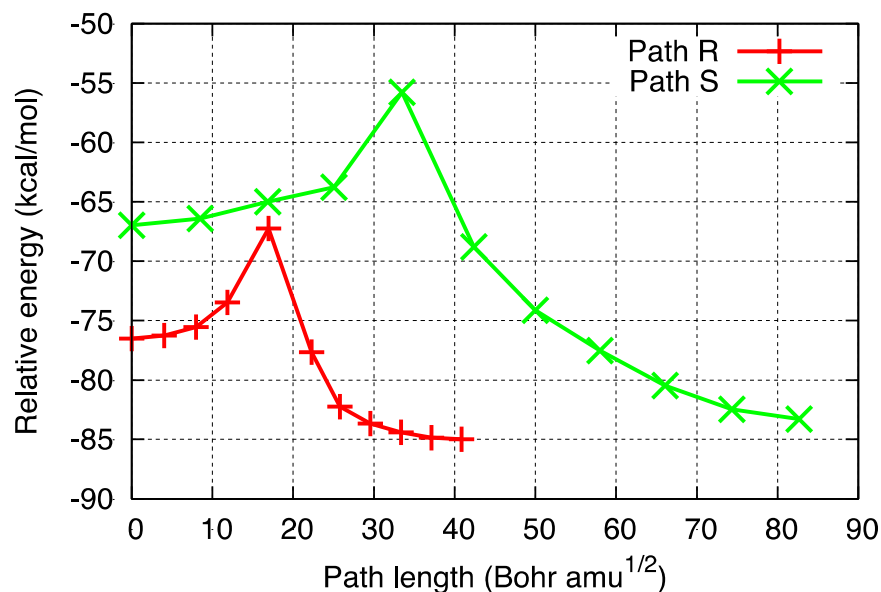
- ケージに内包されることで大きな包接エネルギー (-70kcal/mol) が得られる
- 活性化エネルギーは, ケージがない場合 (22.7kcal/mol) とケージがある場合 (25.4kcal/mol) でほとんど変わらない
- この反応のケージの役割は反応をエンタルピー的に有利に進行させる役割ではなく, 内包により得られた熱を揺らぎに換えてエントロピー的に有利に反応を進行させる役割

Zn(II)ポルフィリンケージ中のアシル移動



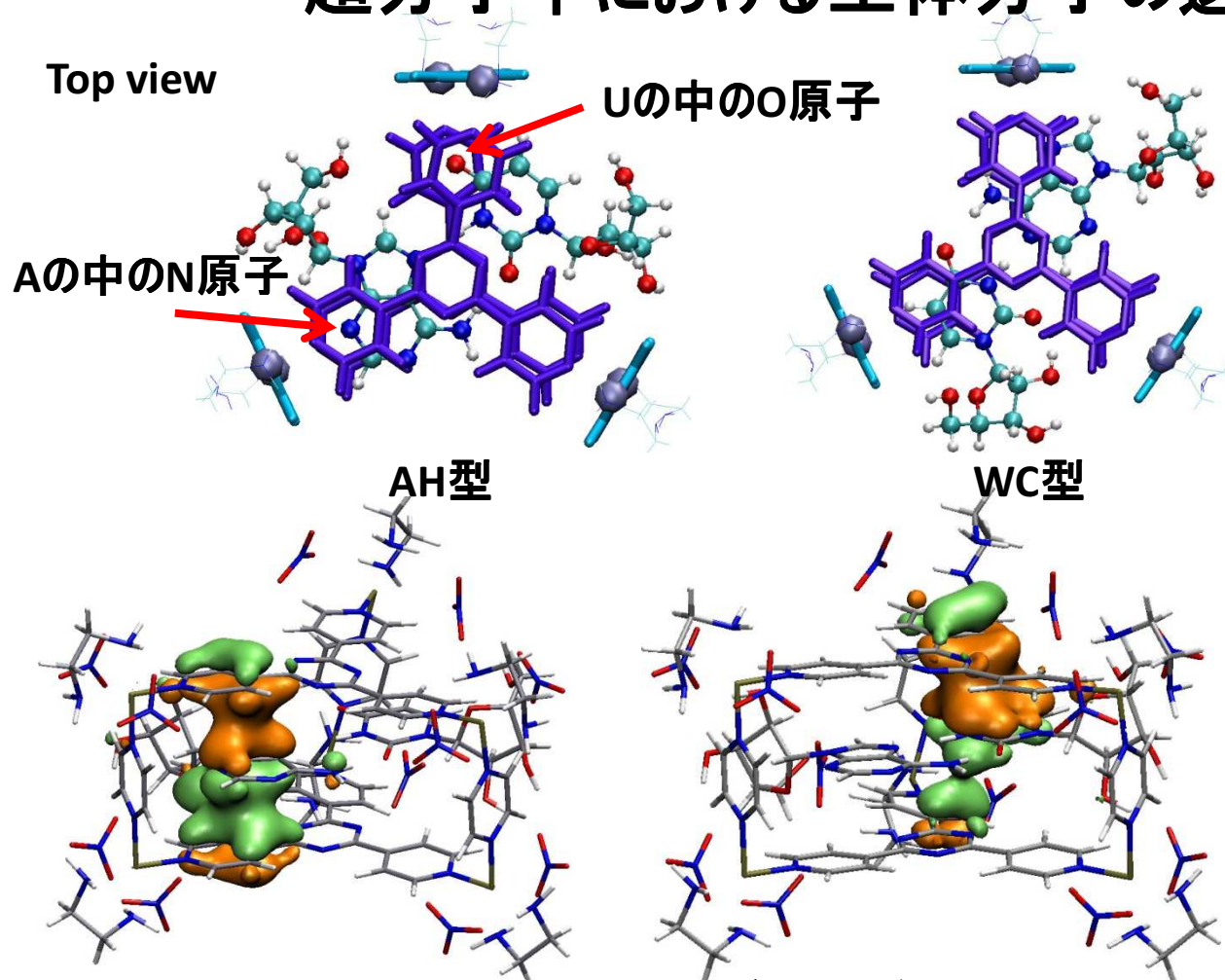
- 低い活性化障壁と大きな反応熱でアシル基転移反応が進行する
- 柔軟なケージの形状変化を伴い、反応が容易に進行する

かご錯体中のエナンチオ選択性 ケージ中のAza-Cope転位の最小エネルギー経路



- 反応の初期段階において、**ケージ中への内包はプロキラル基質を安定化する**; s体のプロキラル基質に比べ、R体のプロキラル基質はより安定化する
- **R体エナンチオマーの生成経路のほうが、s体に比べて安定な最小エネルギー経路に沿って反応が進行する**
- ホストケージへ内包される際のプロキラル基質の安定性の差が、高いエナンチオ選択性の原因となっている

超分子中における生体分子の選択的認識



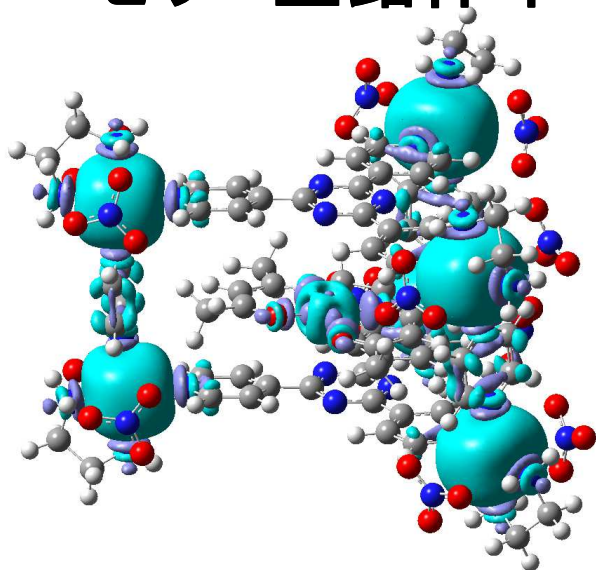
WC塩基ペアに対するAH塩基ペアの相対エネルギー (kcal/mol)

	相対エネルギー
ケージなし	+0.4
ケージ中	-53.0

ケージとAUペアの間の1番強い相互作用と2番目に強い相互作用を表すMIO

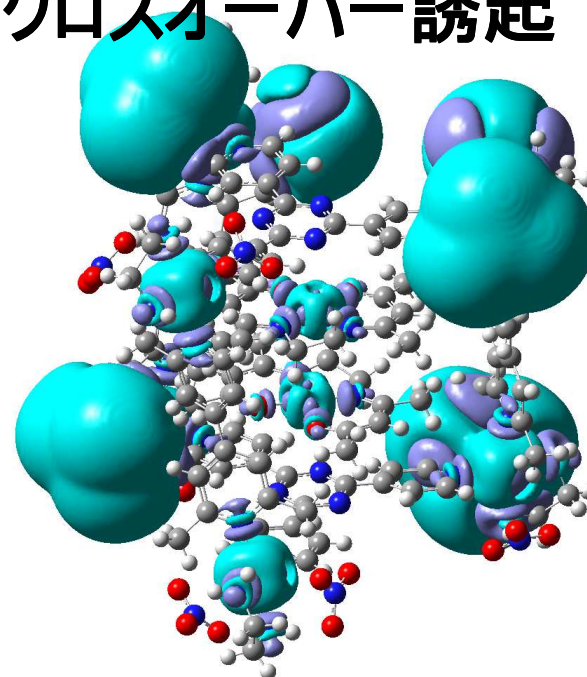
- A中のN原子とU中のO原子がケージの上下のパネルのふたつの芳香族 π 系と強く相互作用することでAH型は安定化; 超分子中ではAH塩基ペアが選択的に形成されて, WC塩基ペアは観測されない

ピラー型錯体中のスピncrossオーバー誘起



Ni錯体単体 + Pt cage

4.3%



Ni錯体二量体 + Pd cage

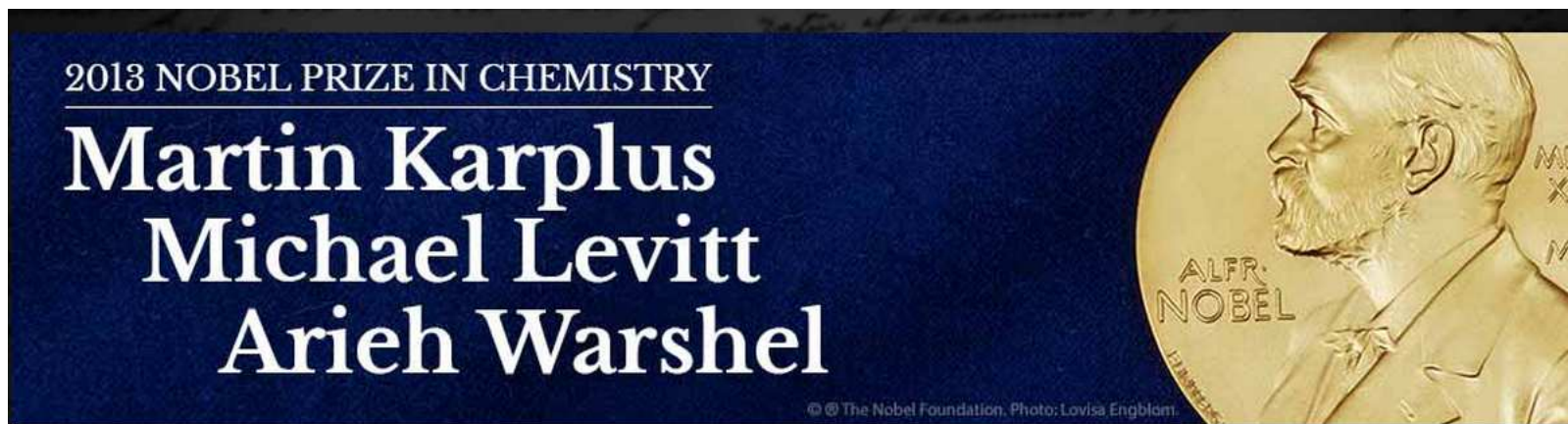
5.5%

スピン-軌道相互作用を考慮した場合としない場合の電子密度の差

- ケージ中のNi錯体単体と二量体のSO波動関数における三重項混合の割合は4.3%と5.5%; Ni錯体だけでは0.5%なのでケージによりスピncrossオーバーが誘起される

$$\Psi_{SO} = c_S \Psi_S + c_{T+1} \Psi_{T+1} + c_{T0} \Psi_{T0} + c_{T-1} \Psi_{T-1}$$

生体物質計算



2013年 ノーベル化学賞

QM/MMによる
生体物質の計算



Taking the Experiment to Cyberspace

Previously, classical physics and quantum chemistry belonged to rivalling worlds. The Nobel Laureates in Chemistry 2013 have opened a gate between those worlds and have brought about a flourishing collaboration.

<http://www.nobelprize.org/>

生体物質計算 : GENESIS

GENESIS
(**Generalized Ensemble Simulation
Systems)**

Computational Biophysics Research Team
(RIKEN Advanced Institute for Computational Science)

March, 2014

All-atom MD simulations of proteins

- **Molecular dynamics simulations.**

- Solve Newton's equation of motion, using potential energy functions (CHARMM, AMBER, OPLS etc.).

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i(t)}{dt^2} = \mathbf{F}_i(t) = - \frac{dU(\mathbf{r}^N)}{d\mathbf{r}_i}$$

$$U(r_1, r_2, \dots, r_N) = \sum_{bonds} K_b (r - r_{eq})^2 + \sum_{angles} K_\theta (\theta - \theta_{eq})^2$$

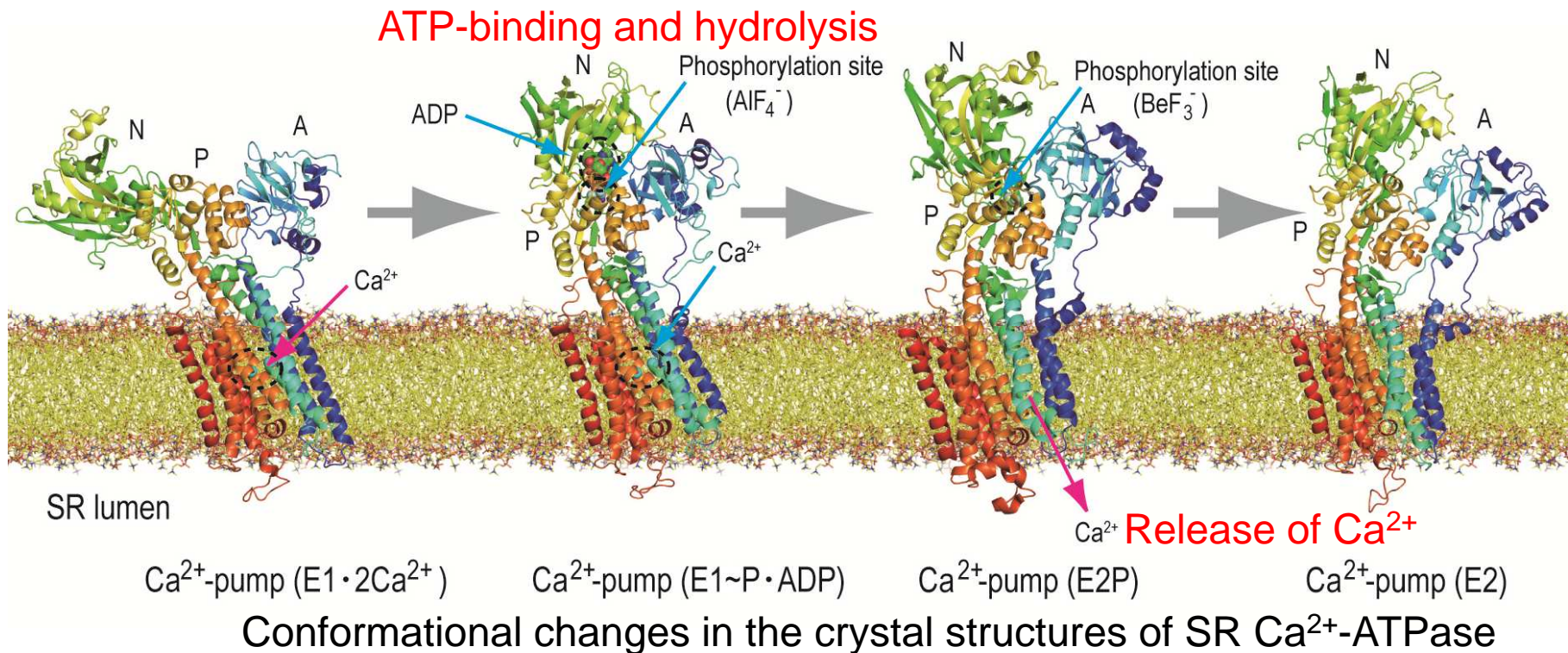
$$+ \sum_{torsions} K_\phi [1 + \cos(n\phi - \delta)] + \sum_{nonbonds} \left\{ \epsilon_{ij} \left[\left(\frac{R_{min}^{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{R_{min}^{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \frac{q_i q_j}{\epsilon r_{ij}} \right\}$$

- **But, MD is a very time-consuming calculation.**

- To simulate protein dynamics for millisecond, we need to solve Newton's equation of motion for 10^{12} times.

Protein Conformational Changes

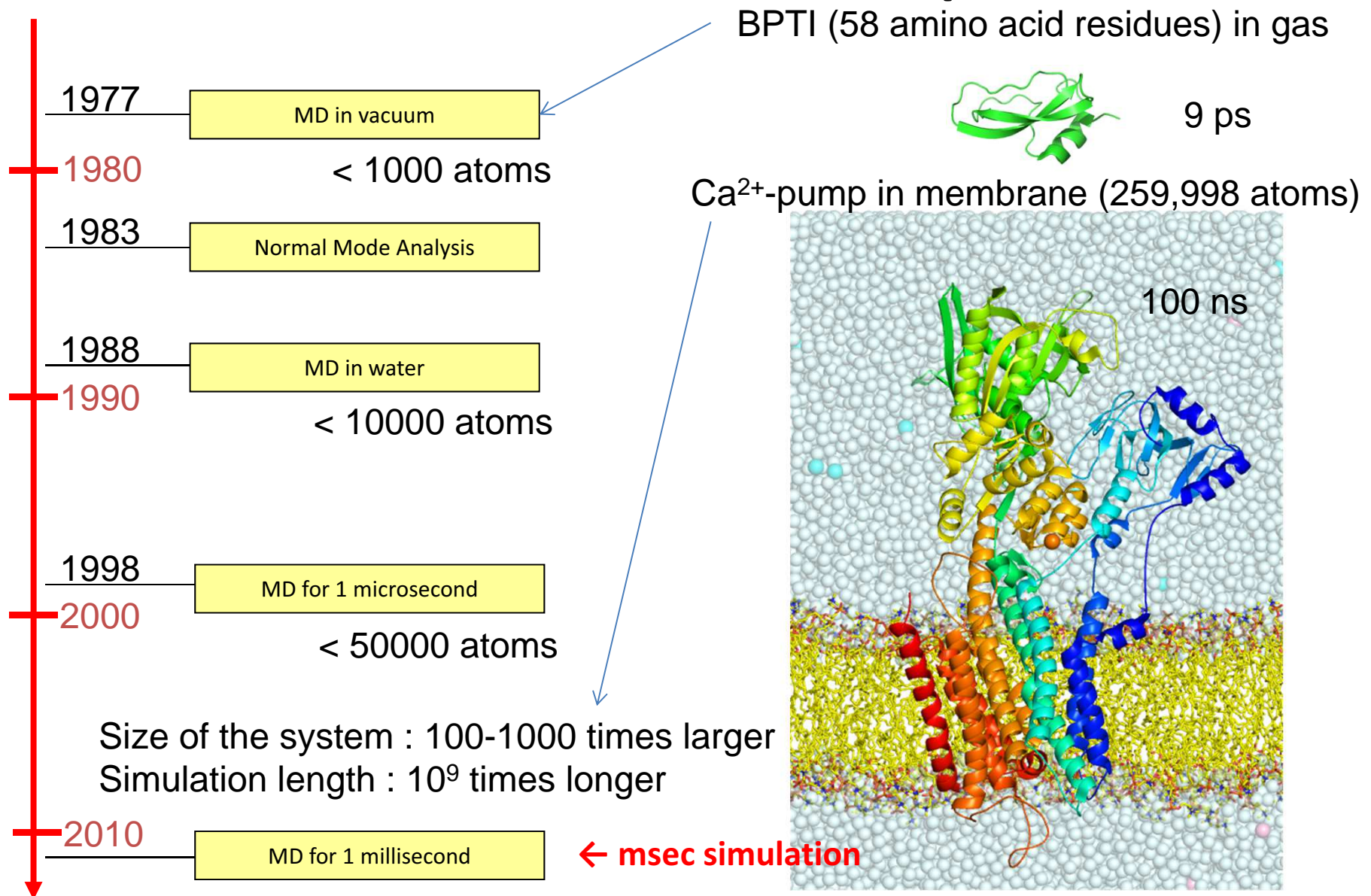
- Protein undergoes large conformational changes to work as a molecular machinery.



Can we simulate such large conformational changes of membrane proteins using supercomputers?

生体物質計算 : GENESIS

All-atom MD simulations of proteins



GENESIS

(Generalized Ensemble Simulation Systems)

1. Aims at developing efficient and accurate methodologies for free-energy calculations in biological systems
2. Efficient Parallelization - Suitable for massively parallel computers, in particular, K
3. Applicability for large scale simulation
4. Algorithms coupled with different molecular models such as coarse-grained, all-atom, and hybrid QM/MM
5. Generalized ensemble with Replica Exchange Molecular Dynamics

GENESIS developers

Project Leader : Yuji Sugita



Main developers: Jaewoon Jung and Takaharu Mori

Developers : Chigusa Kobayashi-Iwahashi

Yasuhiro Matsunaga

Takashi Imai

Takeo Yoda

Norio Takase (Isogo soft)

Molecular Mechanics (Force field)

1. The basic functional form of a force field encapsulates both -
Bonded terms relating to atoms that are linked by covalent bonds
Non-bonded terms describing the long-range electrostatic and van der Waals forces
2. A force field defines a set of parameters for each type of atom.

$$E_{total} =$$

$$\sum_{bonds} \frac{1}{2} k_b (b - b_0)^2 + \sum_{angles} \frac{1}{2} k_a (\theta - \theta_0)^2 + \sum_{torsions} \frac{1}{2} V_n [1 + \cos(n\omega - \gamma)] +$$

Bonded term

$$\sum_{j=1}^{N-1} \sum_{i=j+1}^N \left\{ \varepsilon_{ij} \left[\left(\frac{r_{0ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_{0ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \frac{q_i q_j}{4\pi \varepsilon r_{ij}} \right\}$$

Non-bonded term

Parameters k_b , b_0 , k_a , θ_0 , V_n , γ , ε_{ij} , r_{0ij} , and q_i are defined according to each atom type.

3. The bottleneck of the computation is the non-bonded energy calculation due to $O(N^2)$ computation steps for N particle.

Speed up and high parallelization schemes

Time-consuming operations of non-bonded energy calculation are avoided and parallelized

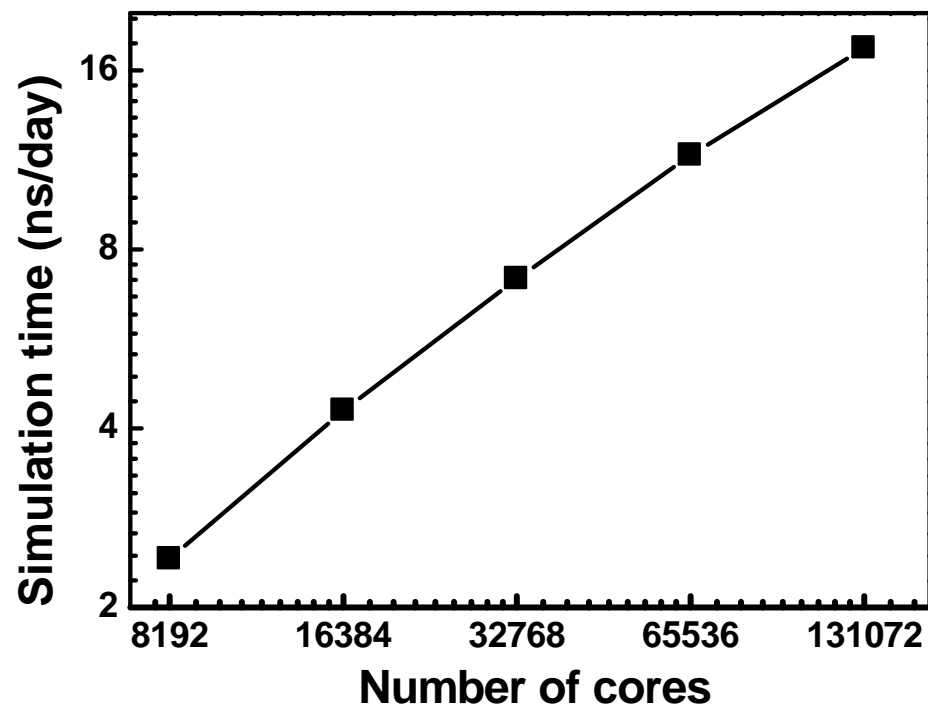
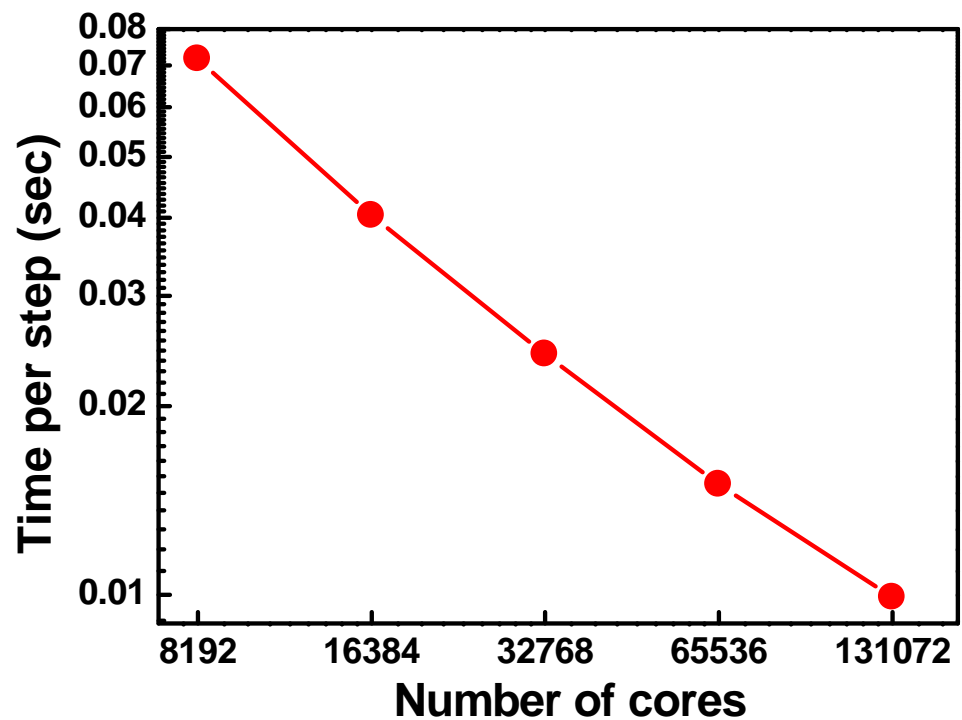
- New lookup table approach (*Jung et al., J. Comput. Chem.*(2013))
- Midpoint cell methods (*Jung et al., (submitted)*)
- Parallelization of FFT (*Jung et al., (in preparation)*)

File I/O are parallelized in order to use huge nodes

- Parallel I/O scheme

生体物質計算 : GENESIS

System : 11.2 M atoms (time step = 2fs)



Capability of GENESIS License: GPL

Generalized Ensemble Methods

- Replica-exchange MD

(Sugita & Okamoto, Chem. Phys. Lett. (1999), Sugita et al., J. Chem. Phys. (2000))

- Surface-tension replica-exchange MD

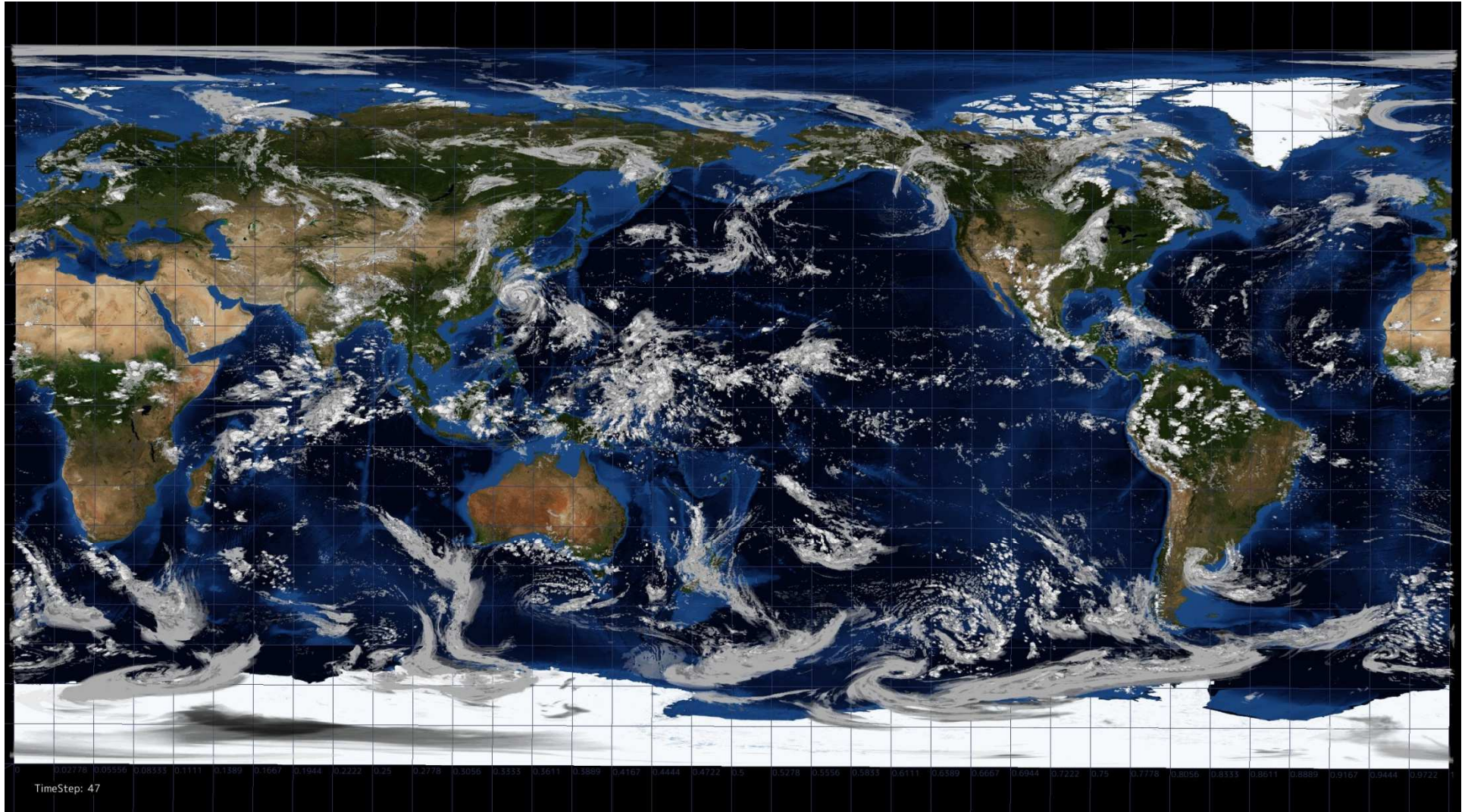
(Mori et al., J. Chem. Theo. Comput.(2013))

All atom model (CHARMM)

Coarse Grained model (C α -GO model)

Coming out in middle of March

気象計算

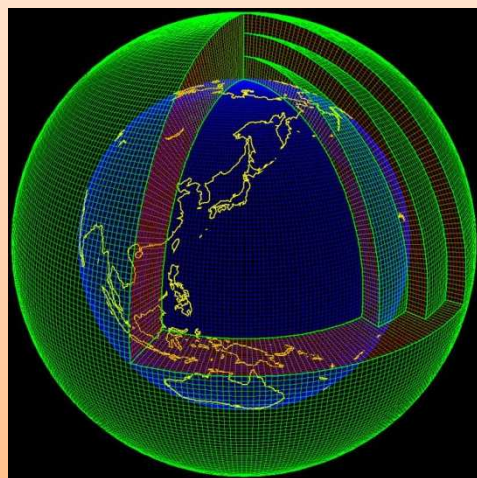


NICAMによる全球計算例

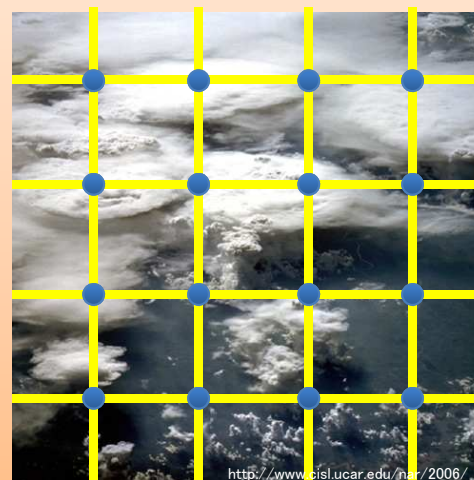
気象計算

地球を格子幅0.87 KMで区切った 世界最高解像度の大気シミュレーション

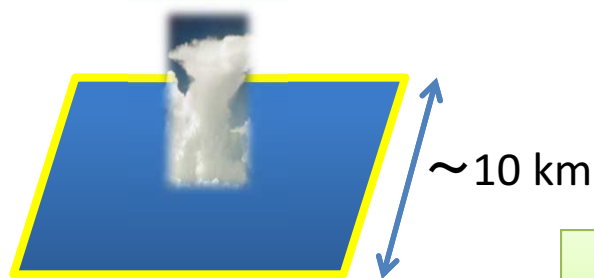
地球大気を計算するには... ⇒空間を格子状に分割



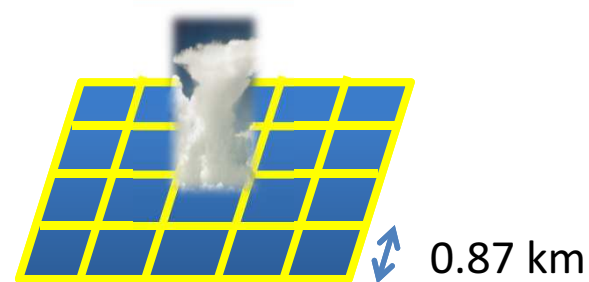
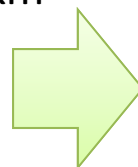
<http://www.nicom->



<http://www.cisl.ucar.edu/nar/2006/>



これまでの世界基準

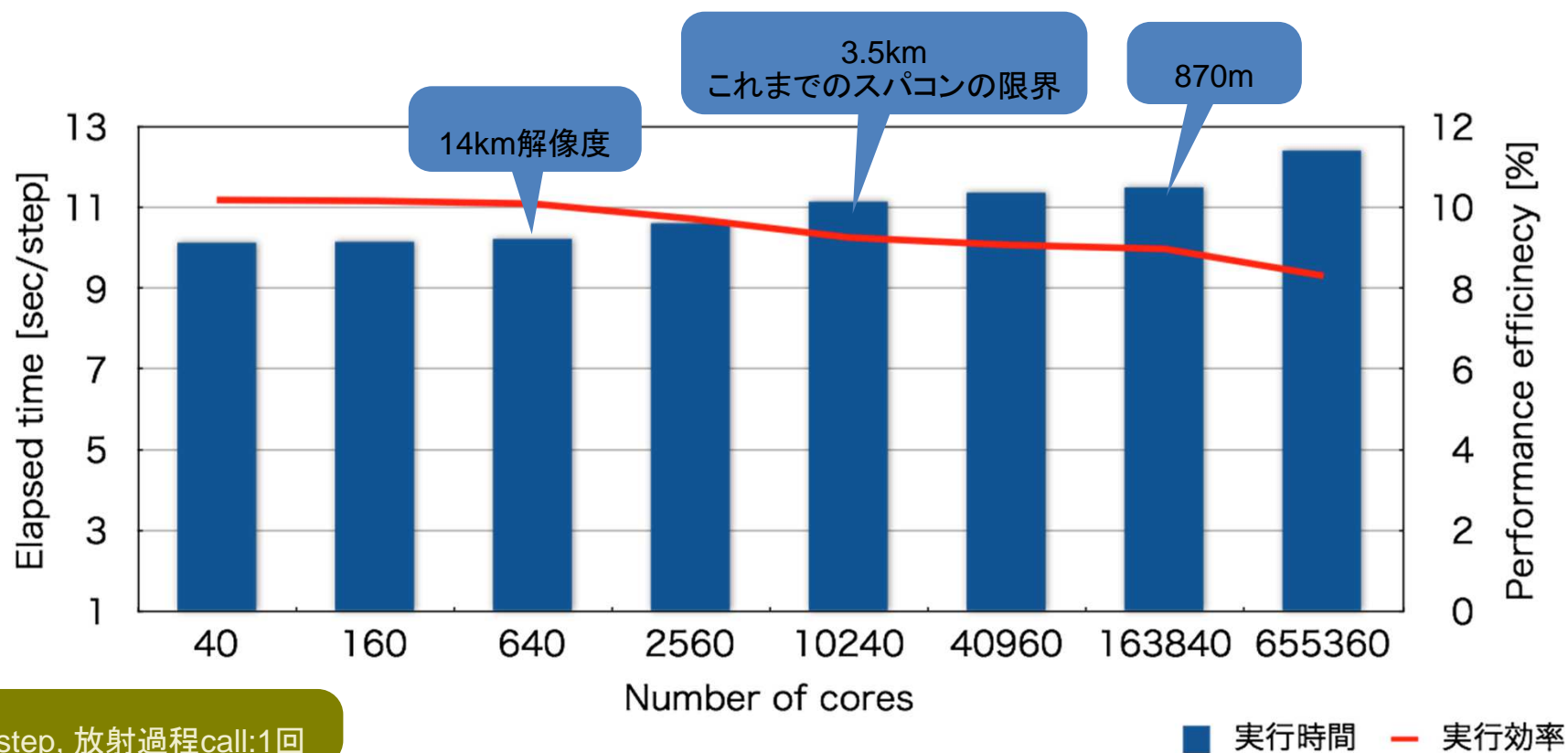


京を駆使すると...

気象計算

Computational performance of NICAM (Non-hydrostatic icosahedral atmospheric model)

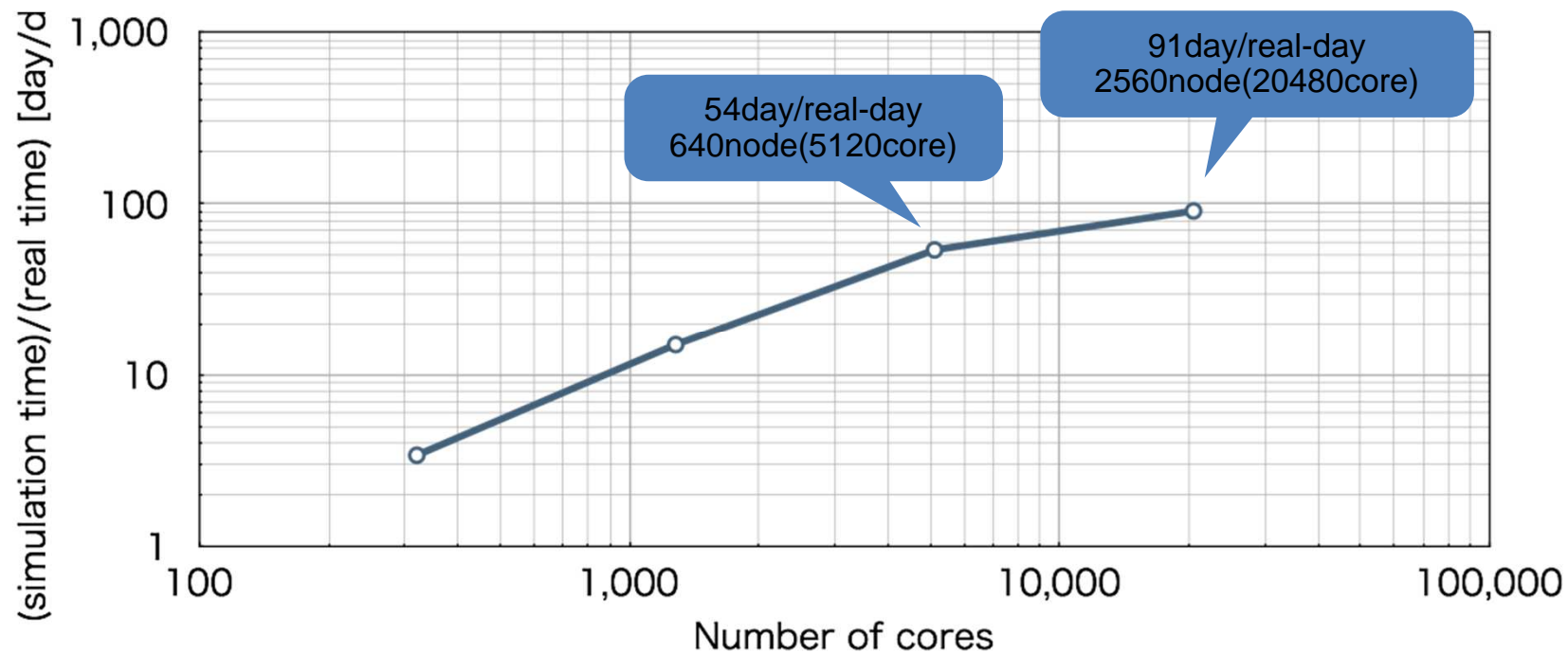
- ウィークスケーリング性能(ノードあたりの格子数を固定)
 - 81920ノード(655360コア)までの良好なスケーリングを達成
 - ノード数が増えるにつれて実行時間は伸びる傾向に



気象計算

Computational performance of NICAM (Non-hydrostatic icosahedral atmospheric model)

- ストロングスケーリング性能(総格子数を固定)
- 1280→5120コアまでは計算性能が保たれている:使っただけ高速化する
- 更にノード数を増やすと性能が落ちてくる
:ノードあたりの格子数(=計算量)が減る→ノード間通信の占める割合が相対的に大きくなる



気象計算: SCALE



SCALE



開発リーダー:
富田浩文

SCALE (Scalable Computing for Advanced Library and Environment)

- 気象気候科学における基盤ライブラリー・環境
- 「京」をはじめ、次世代のスーパーコンピュータから汎用計算機に至る広い範囲の計算機を対象
- 気象・気候科学を専門とする科学者と計算機科学を専門とする科学者が共同して開発(co-design)

気象計算: SCALE

- コンポーネント



- オープンソース (BSD2条項 license)

– web: <http://scale.aics.riken.jp/>

- 計算パフォーマンス

- 京コンピュータでのパフォーマンス

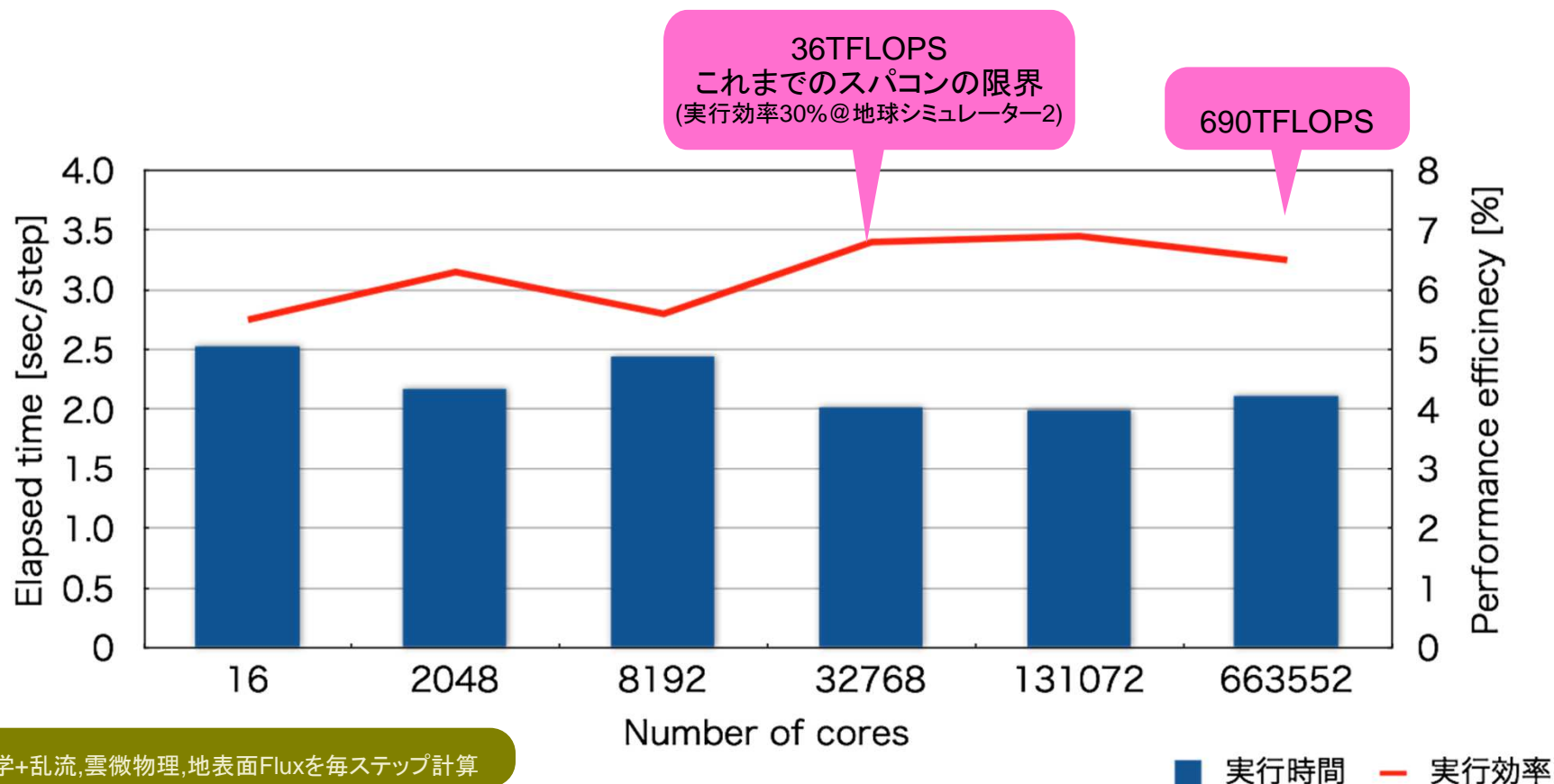
- 演算性能: 10% 強 (流体力学部分), 6.5% (トータル)
 - 弱スケーリング: ~100% (京全系までスケール)

- パフォーマンス向上のための取り組み

- RDMA(Remote Direct Memory Access)の直接利用
 - 通信部分の時間をおよそ 1/3 に縮小
 - メモリアクセスの削減
 - キャッシュブロッキングやループ分割によるキャッシュの有効利用

気象計算: SCALE

- ウィークスケーリング性能(ノードあたりの格子数を固定)
 - 82944ノード(663552コア、京の全計算ノード)までのスケーリングを達成
 - ノード数が少ない時に経過時間が伸びるのは、他のジョブと京を通信網を共有して実行しているため。ノード数が増えると差がなくなる



気象計算: SCALE

- SCALEを利用するメリット
 - 研究者の興味に応じて、必要なコンポーネントを使い、カスタマイズしたシミュレーションコードを構築することが可能
 - 同時開発の気象モデルを使うことで、自分でモデルを構築しなくても気象シミュレーションが実行可能である
 - 同じ素過程を解く計算スキームを複数実装し、それらが同じ形で呼び出すことができるため、相互比較することが容易
 - 多くの素過程でのそれぞれのスキームの組み合わせを試すことが可能
 - 高度に最適化されたコードを利用することが出来る（特に京コンピュータ）
 - 将来のフラグシップマシンにも早期に対応予定
 - 先進的なスキームが利用出来る

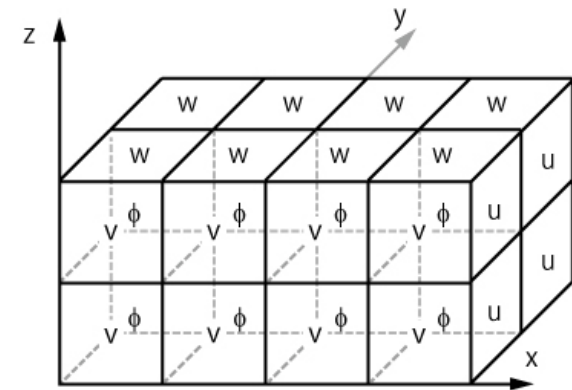
気象計算: SCALE

- SCALE-LES
 - SCALEを利用した気象シミュレーションモデル
 - SCALEの物理パフォーマンスの検証
 - 広領域高解像度気象シミュレーションの実施
 - $O(10-100)$ km四方の領域を $O(1-10)$ m 解像度で
 - メソスケールLES, 将来的には全球LESへ
 - ちなみにNICAM (全球雲解像モデル) での最高解像度は870m (全球シミュレーション)

SCALE-LES モデル概要

参考

- 力学過程:
 - 支配方程式: 3次元完全圧縮
 - 解法: 完全陽解法 (鉛直方向陰解法も実装)
 - 時間積分: 3段RK
 - 空間差分: 4次中央差分
 - ただし、音波に関する項は2次中央差分
 - 格子系: Arakawa-C grid
 - 地形: terrain following
 - 非負保証: FCT
 - 高階数値粘性: 4の倍数次
- 予報変数:
 - 密度, 運動量, 質量重付温位, トレーサー (水蒸気など)
 - ただし、温位は水を含めた全空気の保存量として定義



- 物理過程

- SGS乱流

- Smagorinsky-Lilly type (Brown et al. 1994)
 - ただし、ボックススキューターの効果は入れていない
 - グリッドアスペクト比によって混合長を修正 (Scotti et al. 1993)

- 雲微物理

- バルク法:

- Kessler, 1モーメント6カテゴリ(Tomita 2008), 2モーメント6カテゴリ(Seiki & Nakajima 2013)

- ビン法:

- 1次元1モーメント(Suzuki et al. 2010)

- 放射

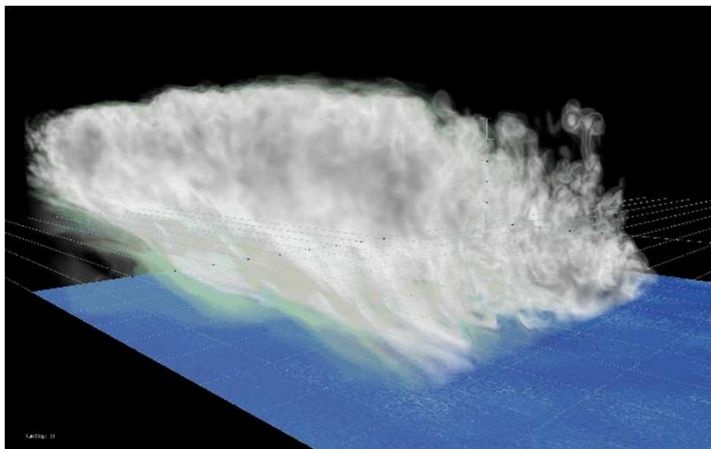
- MSTRN-X (Sekiguchi & Nakajima 2008)

- 地表面フラックス

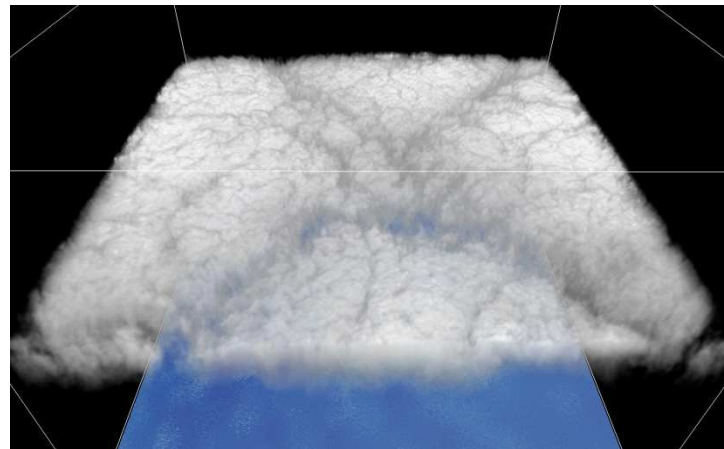
- Louis type (Uno et al. 1995)

気象計算: SCALE

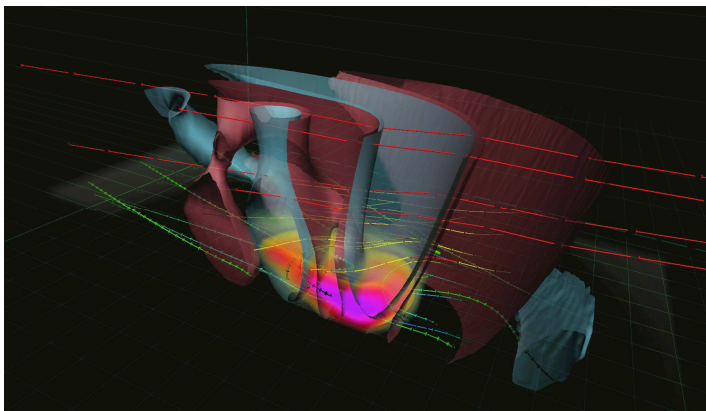
- SCALE-LES 計算事例



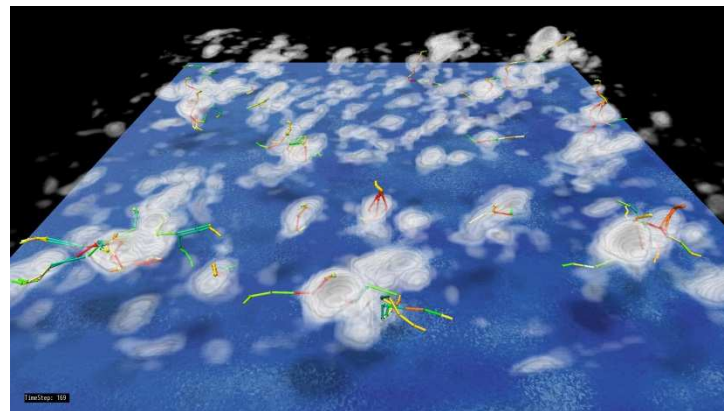
スコールライン: 線状に組織化した積乱雲群。冷気の前線を伴い、強い降水をもたらす。



層積雲: 層状の積雲。太陽放射を反射するなど、地球のエネルギー収支に大きな影響をもたらす。



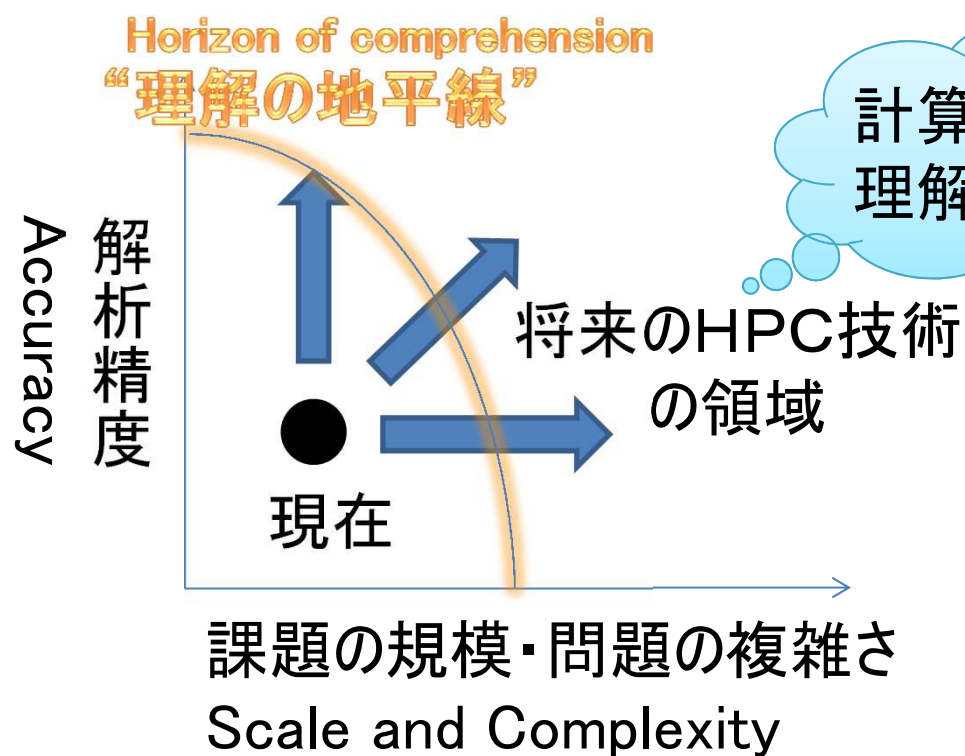
スーパーセル: 回転する強い上昇流を伴う激しい雷雲。激しい降水や突風、竜巻等をもたらす。



境界層積雲: 地表付近の浅い積雲。世界各地でよく見られる。

可視化ツール:

そのシミュレーションからなにが分かりますか？
～ シミュレーション結果の解釈の重要性



可視化による理解

可視化ツール:

可視化技術研究チーム リリースソフトウェア

2014-03-03

keno@riken.jp



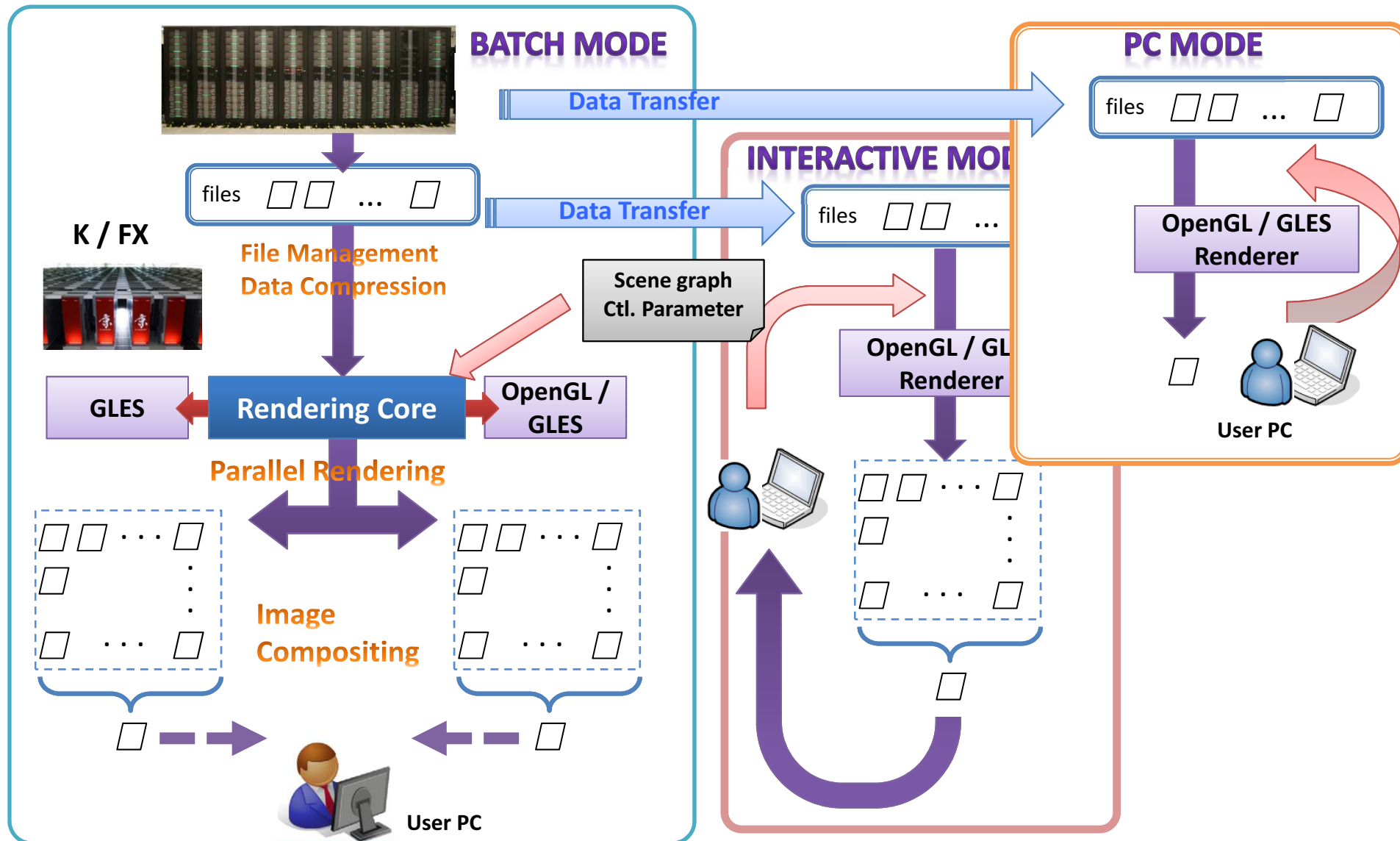
開発リーダー
小野謙二

Release software

- **PMlib**
 - 並列プログラムの性能測定モジュール
- **TextParser**
 - YAML形式のパラメータファイルパーサー
- **CPMlib**
 - 構造格子の領域分割法による並列プログラムのフレームワーク
- **Polylib**
 - ポリゴン情報の並列分散管理ライブラリ
- **Cutlib**
 - ポリゴンと背景直交格子の交点計算ライブラリ
- **CIOLib**
 - 構造データの並列分散ファイル入出力ライブラリ
- **KVTools (仮称)**
 - 大規模分散並列可視化ツール群

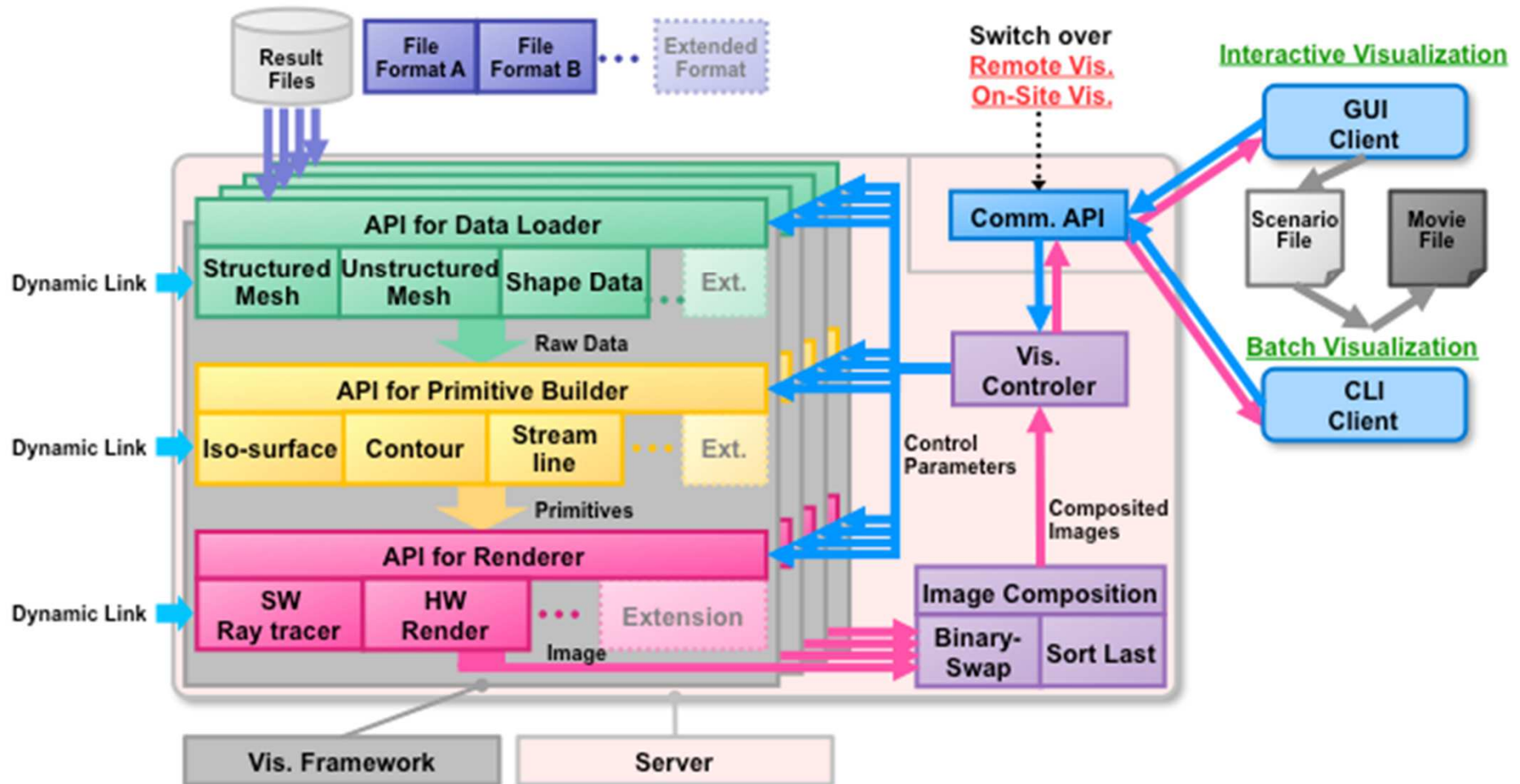
可視化ツール:

シミュレーションからポスト処理まで



可視化ツール:

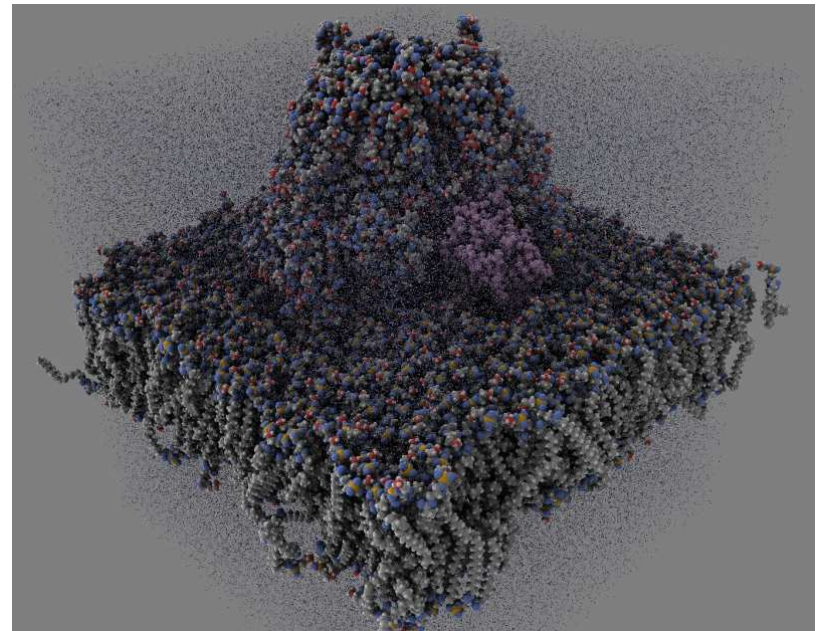
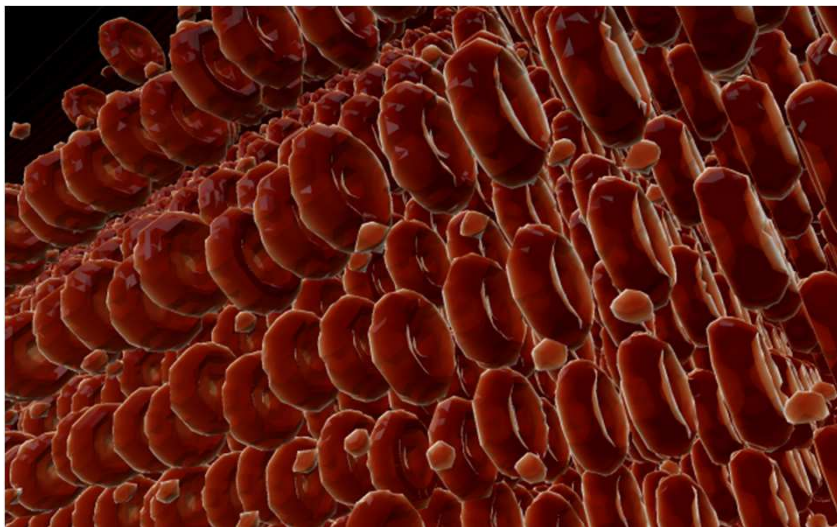
大規模分散並列可視化システム



可視化ツール:

Ray-tracer on K

- Ray-tracer with GLES/GLSL API
 - 2013にプロトタイプ開発
 - クライアントはユーザPC、サーバーはクラスタ、京
 - 京で直接レンダリングが可能
 - Release 2014/9



2014年度講習会計画

●神戸開催(▲は計画中)「京」見学会を同時開催 ●神戸開催(「京」見学会なし) ●東京開催(▲は計画中)

		平成25年度		平成26年度予定											
		3月	3月	4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	12月	1月	2月	3月
RIST主催	HPCプログラミングセミナー (チューニング技法、MPI、OpenMP)				●			●			●		●		
	「京」初級者向け講習会	3/20東京 秋葉原UDX	3/27神戸 キメックセンター	●	●			●			●				▲▲
	「京」中級者向け講習会			●	●			●			●				
	「京」上級者向け講習会 (高速化ワークショップなど)									●		●			
	戦略分野との共催セミナー			5~6回/年を予定(時期や場所は未定)											
AICS主催	TextParser/CIOlib講習会			●							●				
	PMlib講習会				●							●			
	KVTools(仮称)講習会									●					●
	XMP講習会						●		●			●			
	NTChem講習会						●							●	
	K Map Reduce講習会				●							●			
	GENESIS講習会					●									

※予定は変更になる可能性があります。最新の情報はHPCIポータルサイトをご覧ください。<https://www.hpci-office.jp/>

情報提供等

理化学研究所 計算科学研究機構(AICS)

<http://www.aics.riken.jp/>

高度情報科学技術研究機構(RIST)

<https://www.hpci-office.jp/>

問い合わせ先:

- ◆ AICS公開ソフト全体については promo-aicssoft@riken.jp
- ◆ 個々のソフトウェア固有の件に関しては個々の公開サイトの対応方針を参照のこと

お願い

AICS公開ソフトはas isがほとんどですので、“暖かい目”で見てください。開発側も可能な対応を取りますので、ご要望、とくにバグ情報はお知らせください。

コンピュータシミュレーションが 未来をひらく !
Computer simulations create the future !

