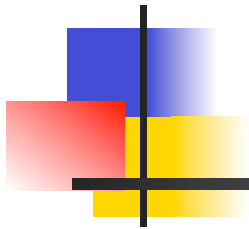


Computational Science Practice A1

計算科学演習A1



2016年4月17日

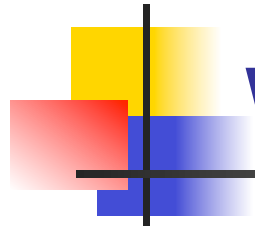
神戸大学大学院システム情報学研究科 計算科学専攻

陰山聡、臼井英之、横川三津夫、坪倉誠

谷口隆晴、中村匡秀、三宅洋平

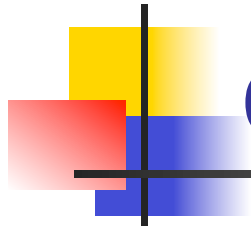
坂本 尚久、森下 浩二

TA: 上原 彰太、吉成 耕平



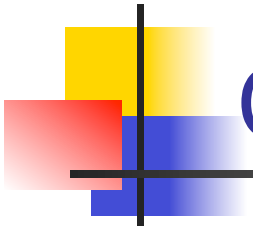
Web page for this class

- http://exp.cs.kobe-u.ac.jp/wiki/comp_practice/



Contact

- 陰山 聡（計算科学専攻）
- Akira Kageyama (Dept. Comput. Sci.)
- Email: kage@port.kobe-u.ac.jp



Objective of this class 授業の目標

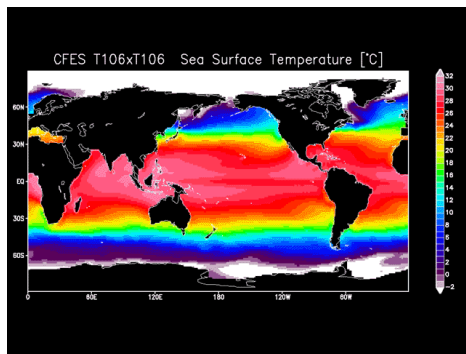
- To develop the knowledge and skills of computational science, including parallel programming (with MPI and OpenMP) data, visualization, and programming techniques using Fortran90/95.
- 計算機シミュレーションを行うために不可欠な下記の技法を、演習を通じて学ぶ
 - スーパーコンピュータの利用方法
 - 並列化の概念・手法
 - 並列プログラミング
 - データ可視化

Importance of Computer Simulations

科学・工学におけるシミュレーションの重要性

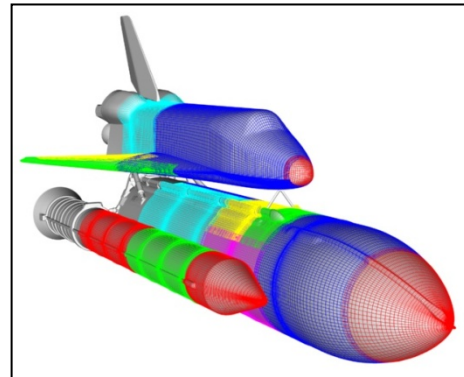
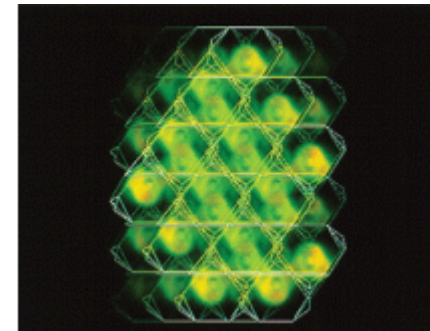
CFD (Computational Fluid Dynamics)

流体計算力学



Computational chemistry

計算化学



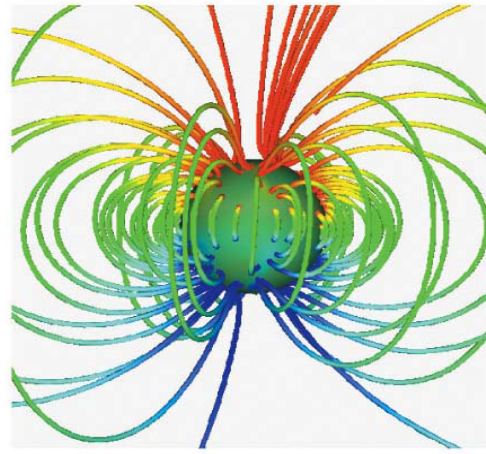
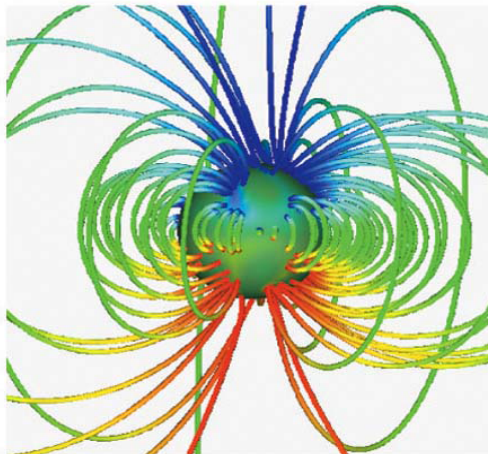
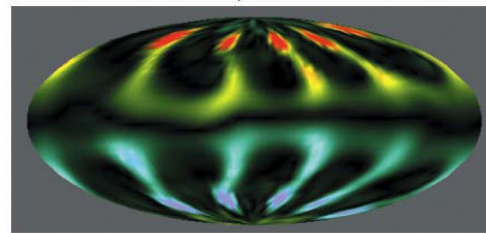
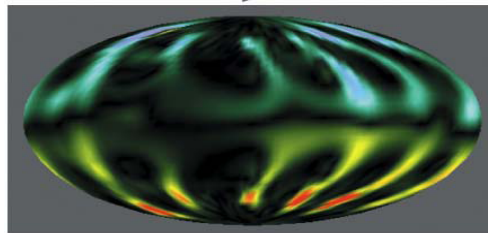
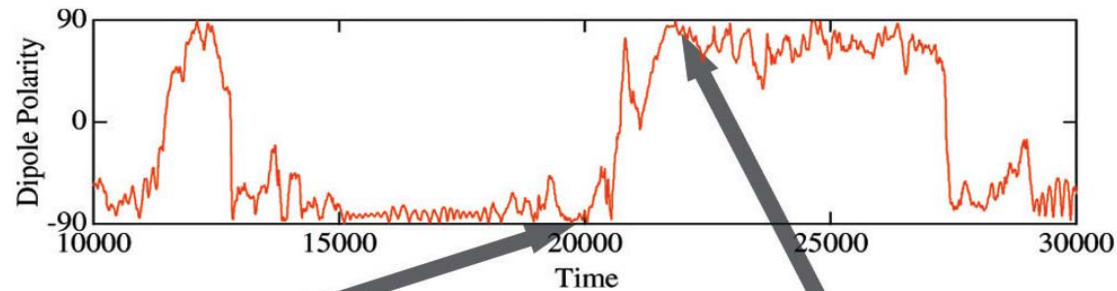
CAE (Computer Aided Engineering)

計算機支援工学

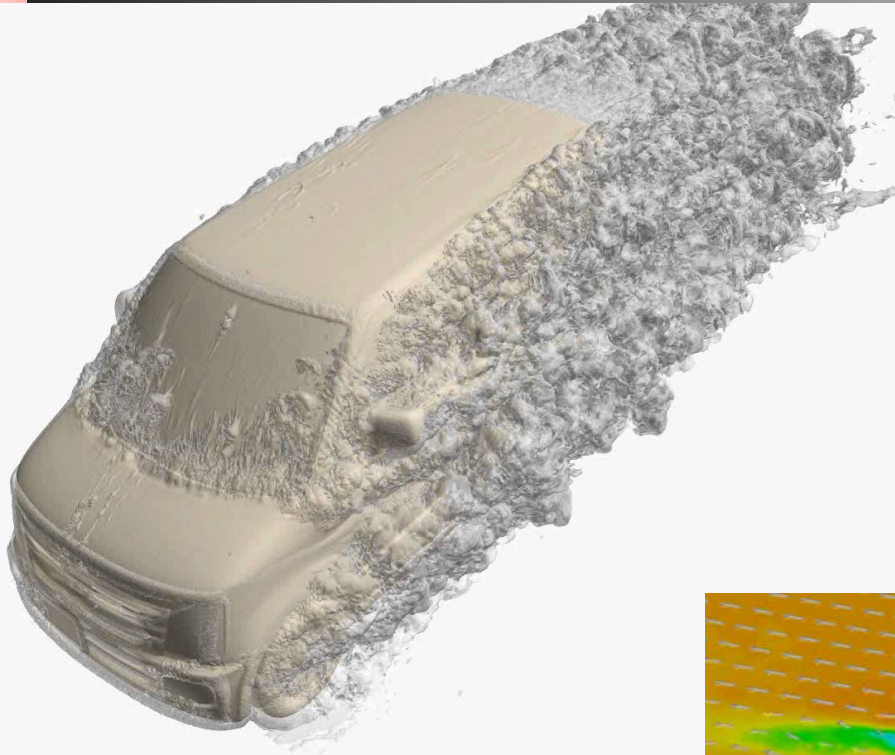
- 実験が困難な現象
 - 観測が困難な現象
- ⇒ シミュレーションによる解析が必須

大規模シミュレーションの例(陰山)

■ 地磁気の形成と逆転現象の再現

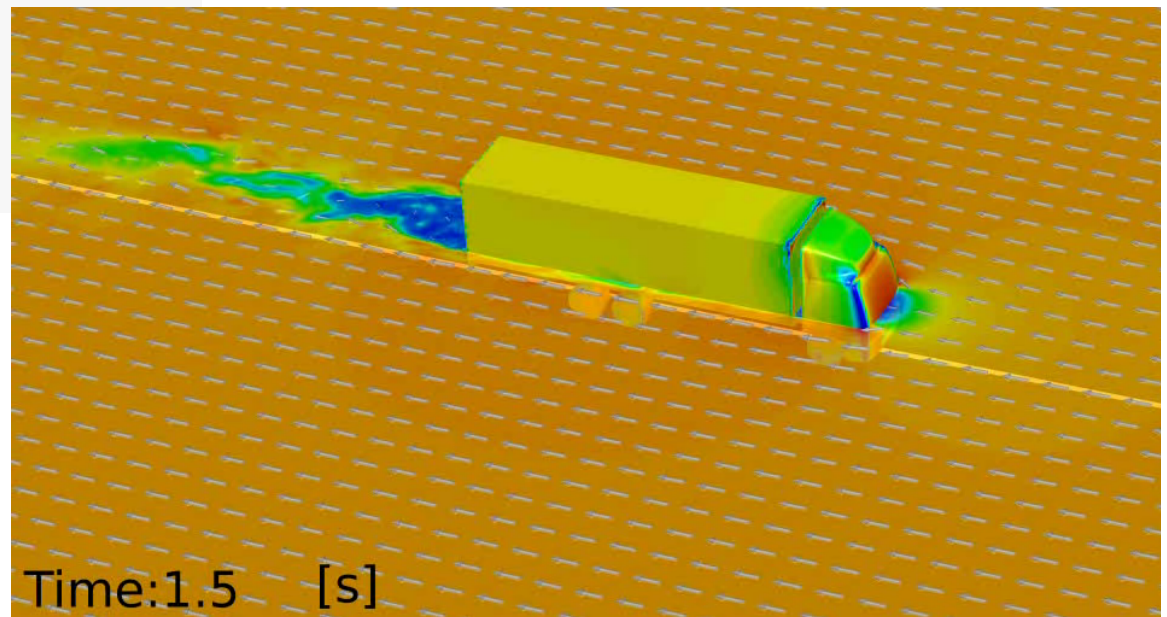


超並列流体シミュレーションによる次世代空力解析 (坪倉)



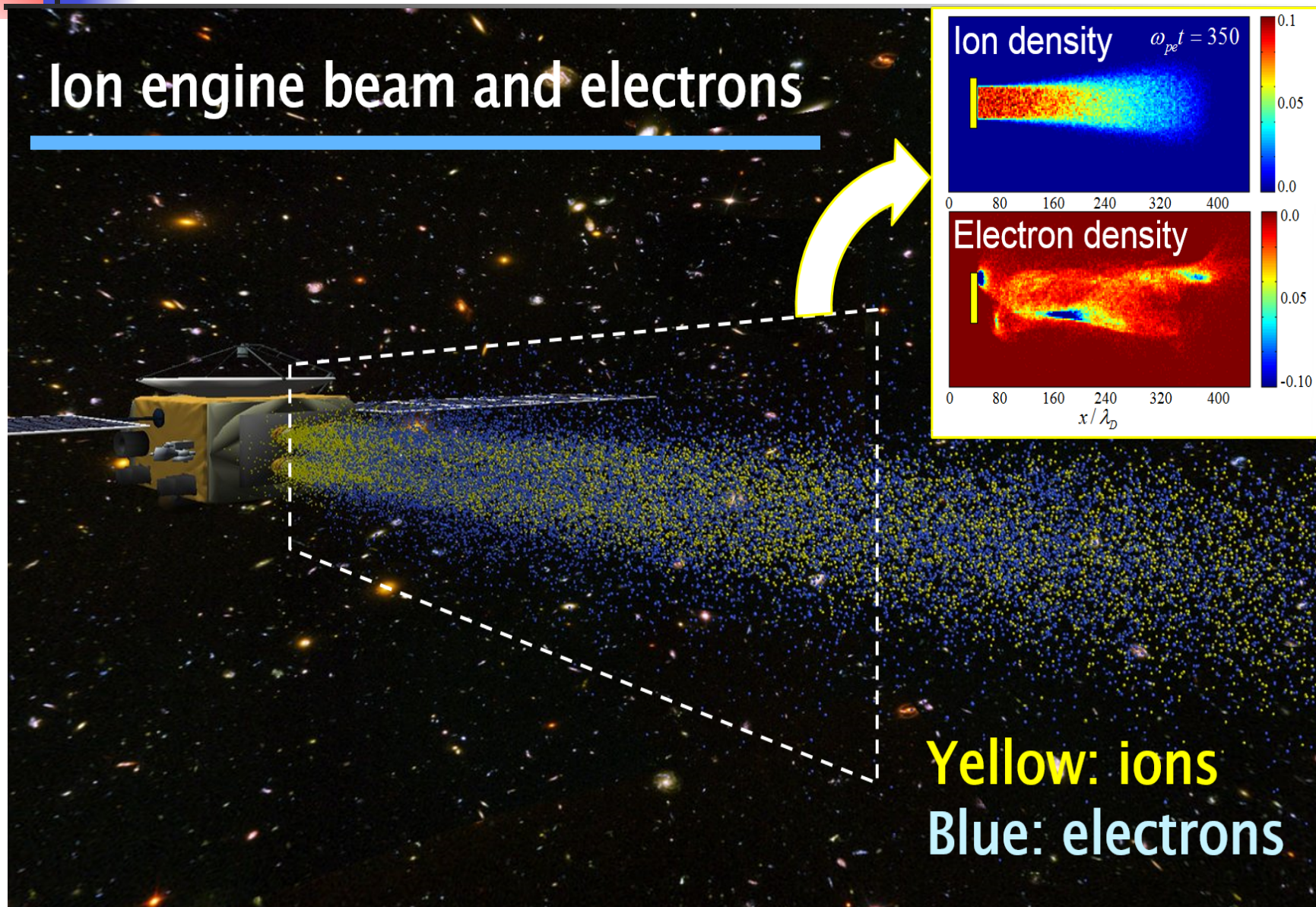
京スパコン(32,000コア並列)の活用により、自動車空気抵抗を、風洞実験値誤差2%で予測

車両運動空力連成解析により、突風時の自動車運動挙動を予測

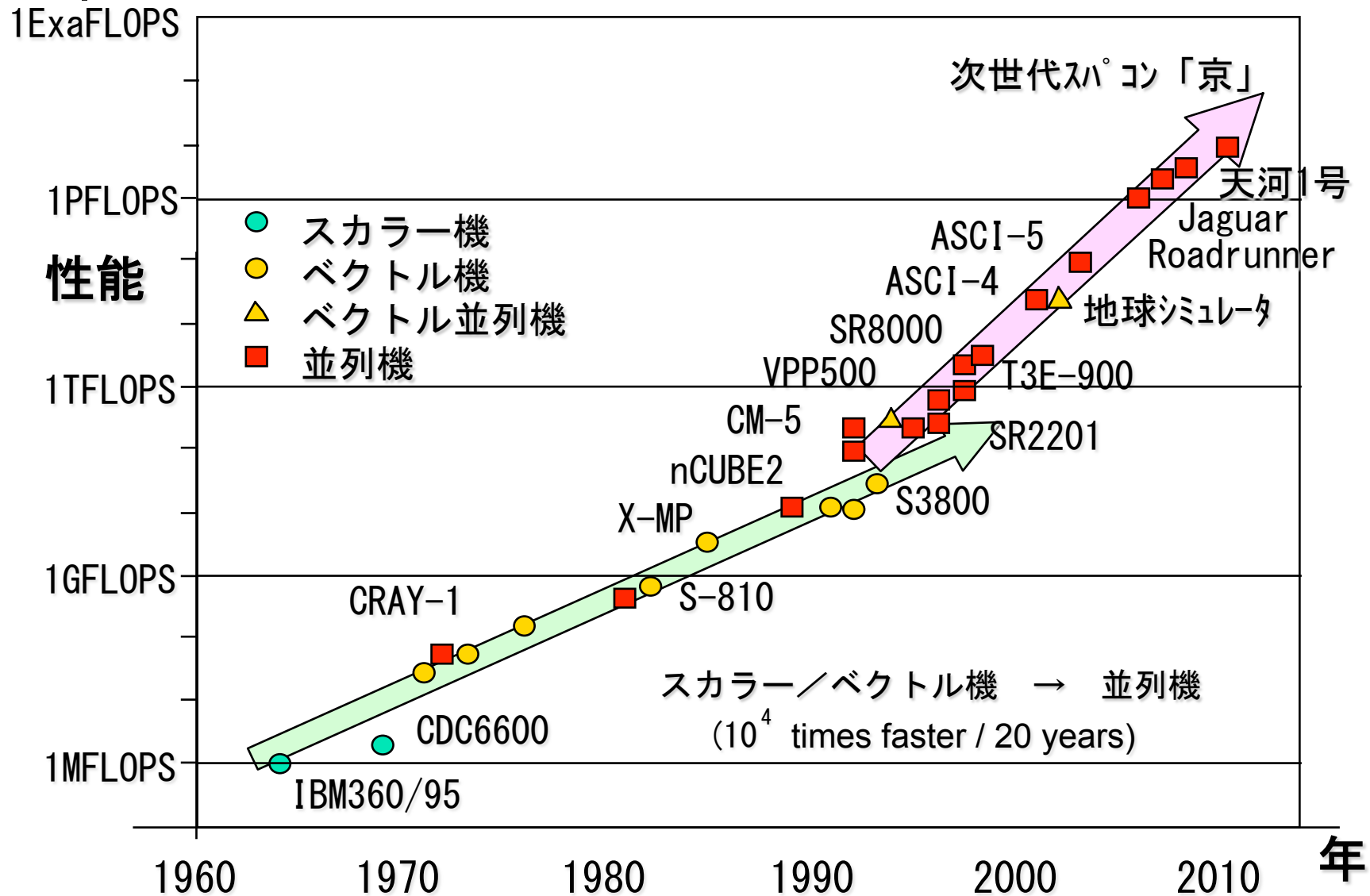


大規模シミュレーションの例(臼井)

Ion engine beam and electrons



大規模計算を支えるスーパーコンピュータ



科学技術計算のための並列処理

- 研究室レベルのPCクラスタからスーパーコンピュータに至るまで、様々な並列計算機が科学技術計算に活用されている

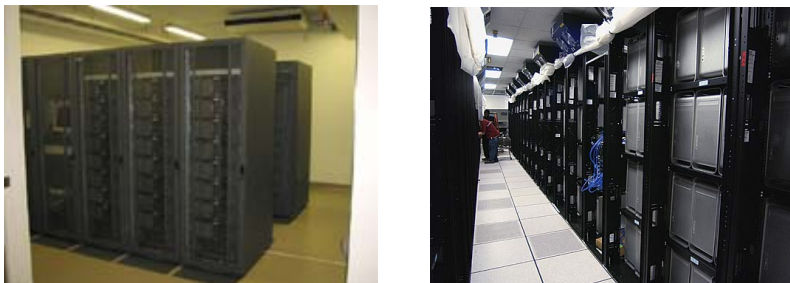
様々なスパコン



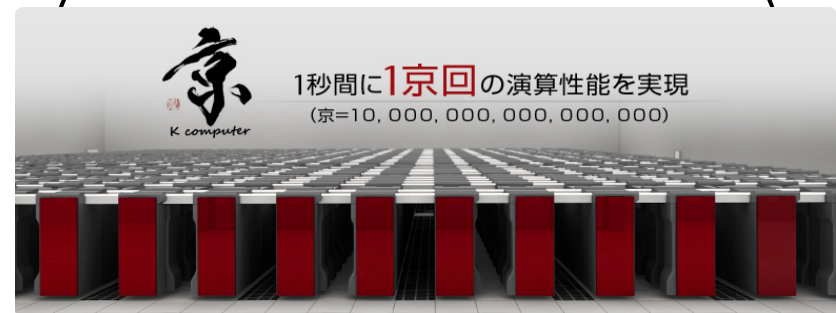
天河2号

Titan

PCクラスタ



「京」コンピュータ



「京」本体

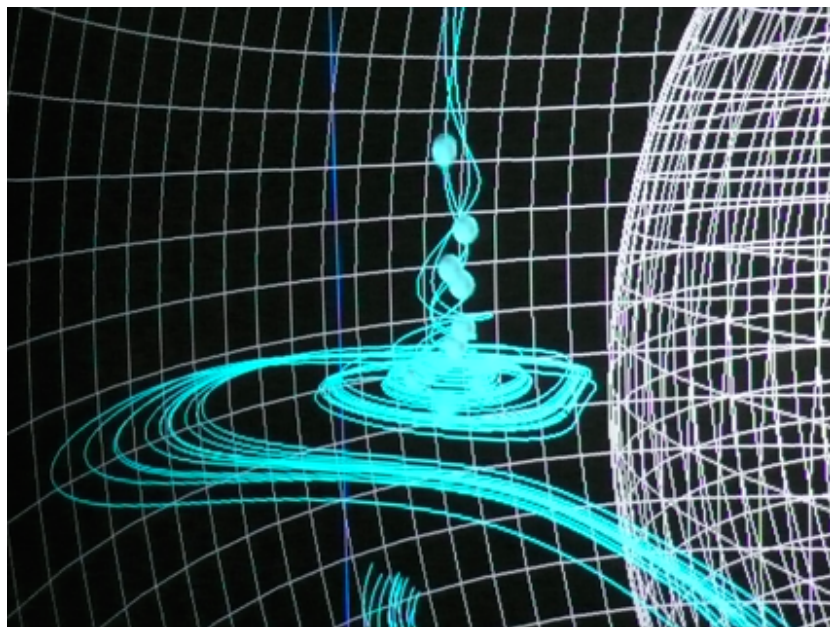


建屋(ポートアイランド)

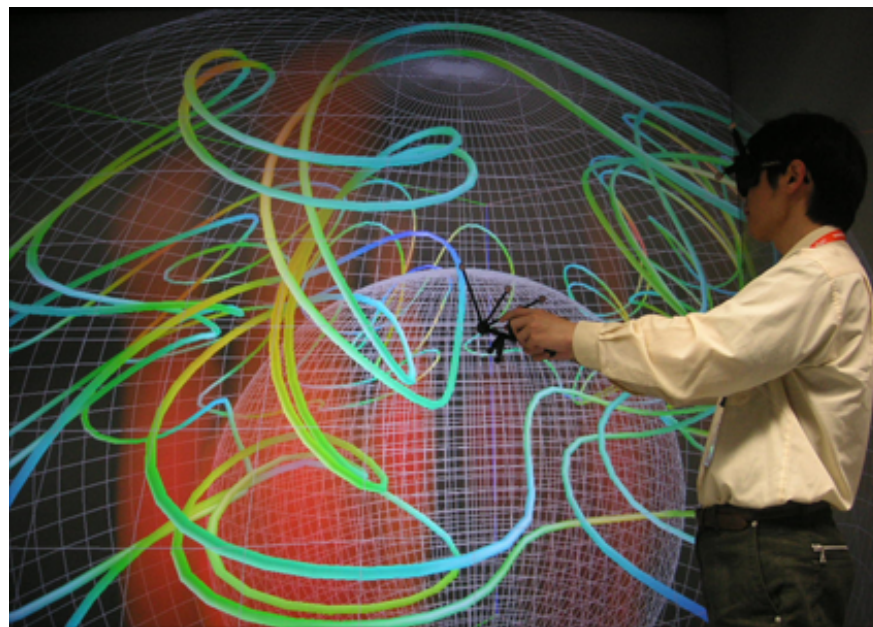
可視化による現象理解

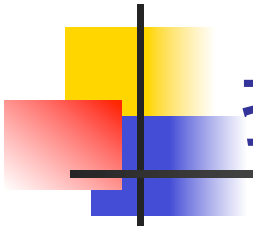
- 膨大な計算結果から人間にとって意味のある情報を取り出すには、可視化技術が重要

トレーサー粒子による流れの可視化



VR技術を応用した3次元可視化





授業の構成

- 1st Q

W01 | 4/14 | オリエンテーション (陰山)
UNIX の復習 I (臼井)

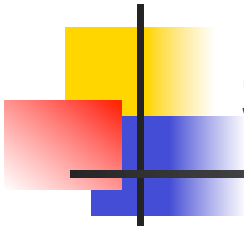
W02 | 4/21 | UNIX の復習 II (陰山)

W03 | 4/28 | データ可視化 I (坂本)

W04 | 5/12 | Fortran 90/95 入門 I (坪倉)

W05 | 5/19 | Fortran 90/95 入門 II (坪倉)

W06 | 5/26 | 「並列計算とは」
OpenMP を用いた並列計算 I (臼井)



授業の構成

- 2nd Q

W01 | 6/16 | OpenMP を用いた並列計算 II(三宅)

W02 | 6/23 | MPI を用いた並列計算 I(谷口)

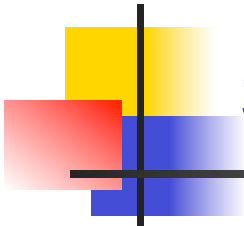
W03 | 6/30 | MPI を用いた並列計算 II(横川)

W04 | 7/07 | MPI を用いた並列計算 III(横川)

W05 | 7/14 | データ可視化 II(坂本)

W06 | 7/21 | 実践編 I(陰山)

W07 | 7/28 | 実践編 II(坂本)



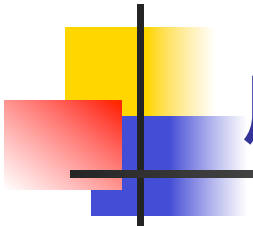
授業の進め方

- 授業形式

- 演習形式で進める
- 毎回レポート課題を出し、時間内あるいは次週までに提出する。

- 授業のwebページ

- http://exp.cs.kobe-u.ac.jp/wiki/comp_practice/
- 授業で使うスライドを掲載するので、授業中に適宜参照すること



成績評価

- レポートの点数により評価を行う
- 毎回出席を取る
 - pi-computerへのログイン
- 4回以上欠席した場合は、単位を与えない