Computational Science Practice A1

計算科学演習A1

2017年4月13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、横川三津夫、臼井英之、坪倉誠

中村匡秀、谷口隆晴、三宅洋平、坂本 尚久

TA: 大羽秀明、山本晃平

Web page for this class

- 短縮URL　http://goo.gl/7TPqHY

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

Contact

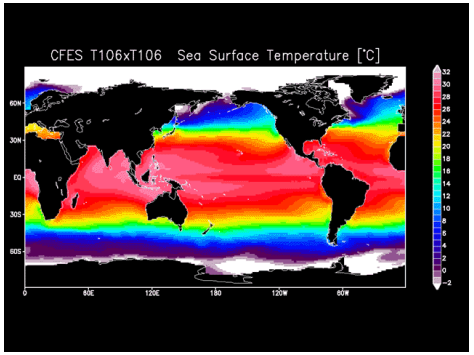
- 陰山 聡（計算科学専攻）
- Akira Kageyama (Dep. Comput. Sci.)
- Email： kage@port.kobe-u.ac.jp

Objective of this class

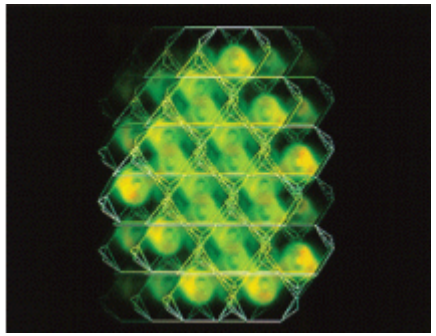
- To develop the knowledge and skills of computational science, including parallel programming (with MPI and OpenMP) data, visualization, and programming techniques using Fortran90/95.
- 計算機シミュレーションを行うために不可欠な下記の技法を，演習を通じて学ぶ
  - スーパーコンピュータの利用方法
  - 並列化の概念・手法
  - 並列プログラミング
  - データ可視化

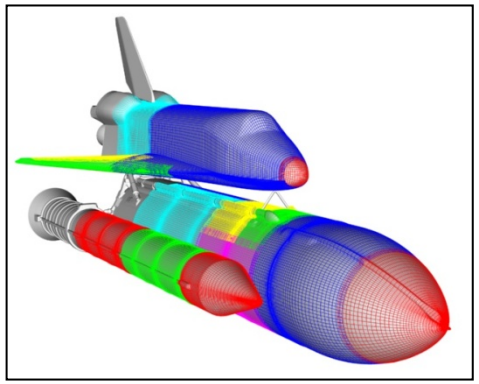
Importance of Computer Simulations

CFD (Computational Fluid Dynamics)



Computational chemistry



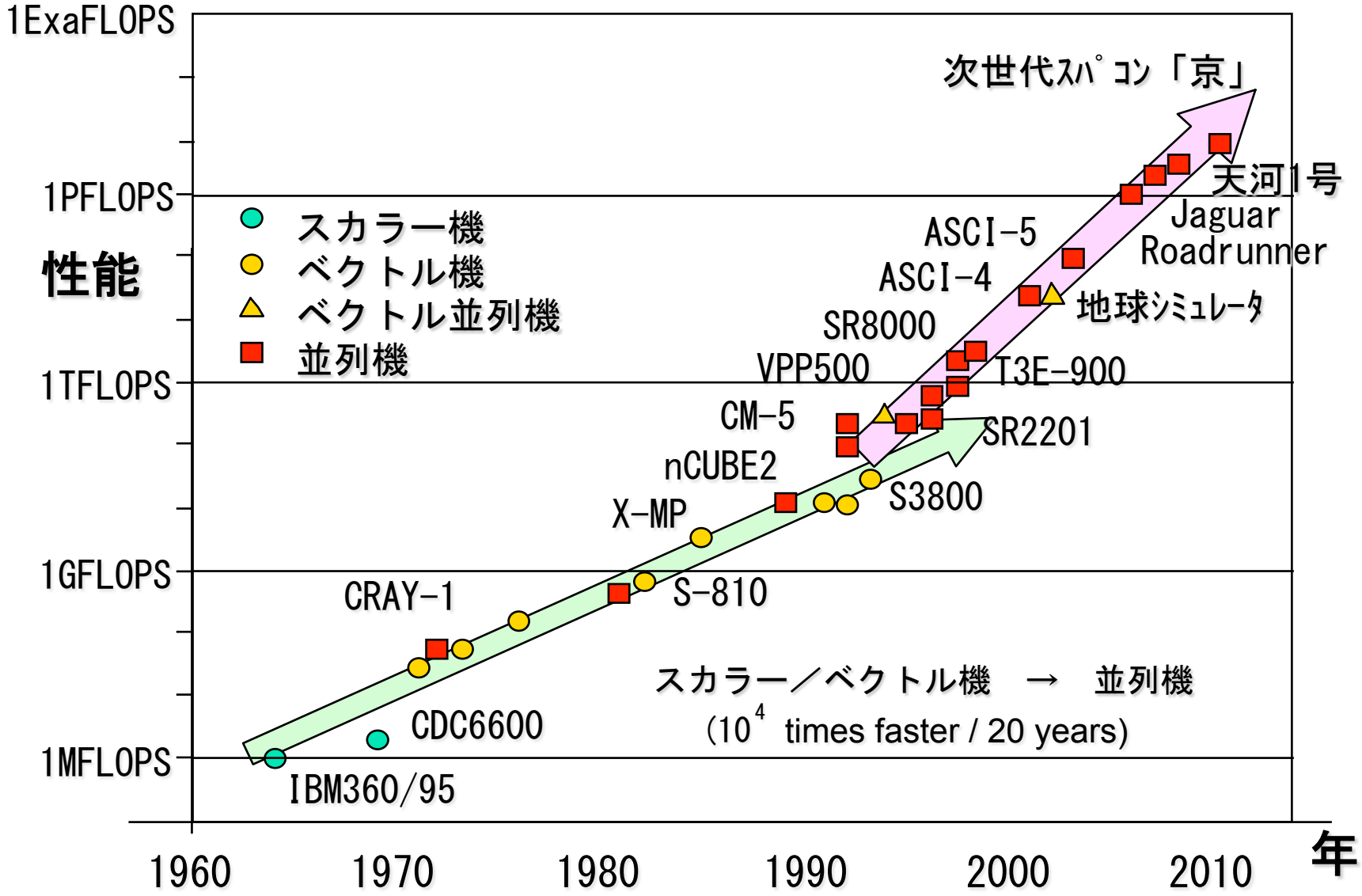


CAE (Computer Aided Engineering)

- 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

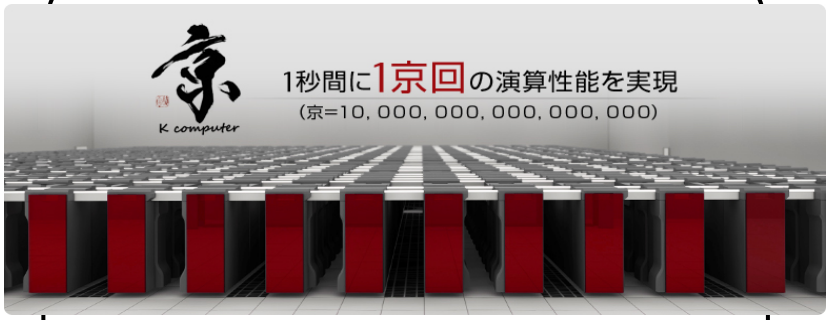
様々なスパコン

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）

授業の構成　1st Q

01 | 4/13 | オリエンテーション（陰山）
UNIX の復習 I（臼井）

02 | 4/20 | UNIX の復習 II（陰山）

03 | 4/27 | データ可視化 I（坂本）

04 | 5/11 | Fortran 90/95 入門 I（坪倉）

05 | 5/18 | Fortran 90/95 入門 II（坪倉）

06 | 5/25 | 休講

07 | 6/01 | 並列計算とは、OpenMP（臼井）

08 | 6/08 | OpenMP を用いた並列計算 II(三宅)

授業の構成 2nd Q

01	6/15	MPI を用いた並列計算 I（谷口）
02	6/22	MPI を用いた並列計算 II（谷口）
03	6/29	MPI を用いた並列計算 III（横川）
04	7/06	MPI を用いた並列計算 IV（横川）
05	7/13	データ可視化 II（坂本）
06	7/20	実践編 I（陰山）
07	7/27	実践編 II（陰山）
08	8/03	（予備日）

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。
  - レポート提出の確認方法は各教員ごとに異なる。
- 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

注意事項 Caution

B4生の参加について

- 本来はM1向けの講義だが，計算科学専攻の研究室に配属されたB4生も（指導教員が認めた場合）参加可能
- 定員（40名）を超えた場合は，M1を優先
- 4年生は履修登録は不要
- 今年の成績（単位）は修士に持ち込み可能
  - ただし、修士入学後に履修登録すること（次ページ）

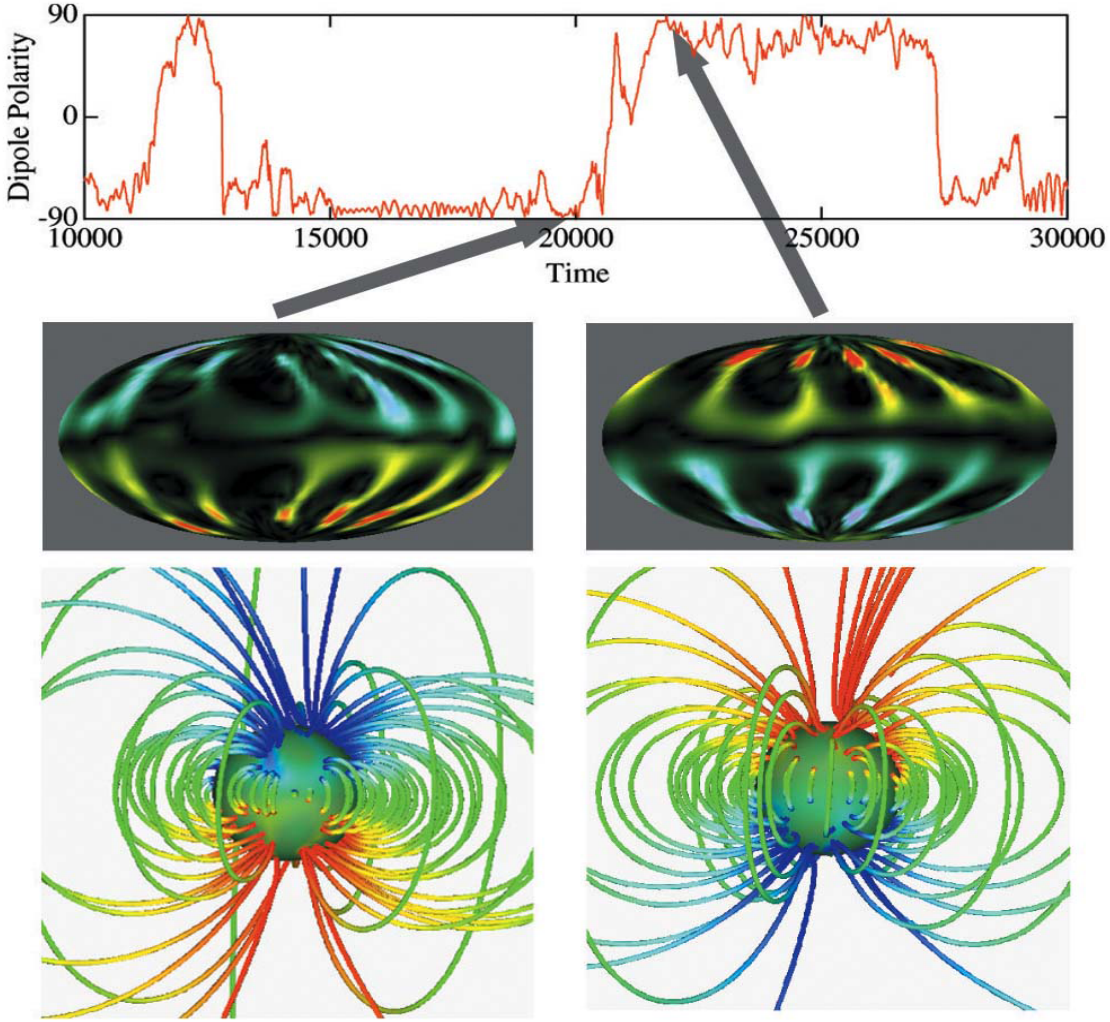
B4生の単位持ち越しについて

- レポートと出欠の条件を満たした場合，4年生の段階では単位が出ないが，修士課程入学後、履修登録すれば（出席なしに）単位を出す。
- ただし、M1向け講義（第2クォーター）
  「システム運用論」と「計算科学演習A2」
  は時間割が重複している。
- 「計算科学演習A2」の単位が必要ならばM2で履修登録すること。

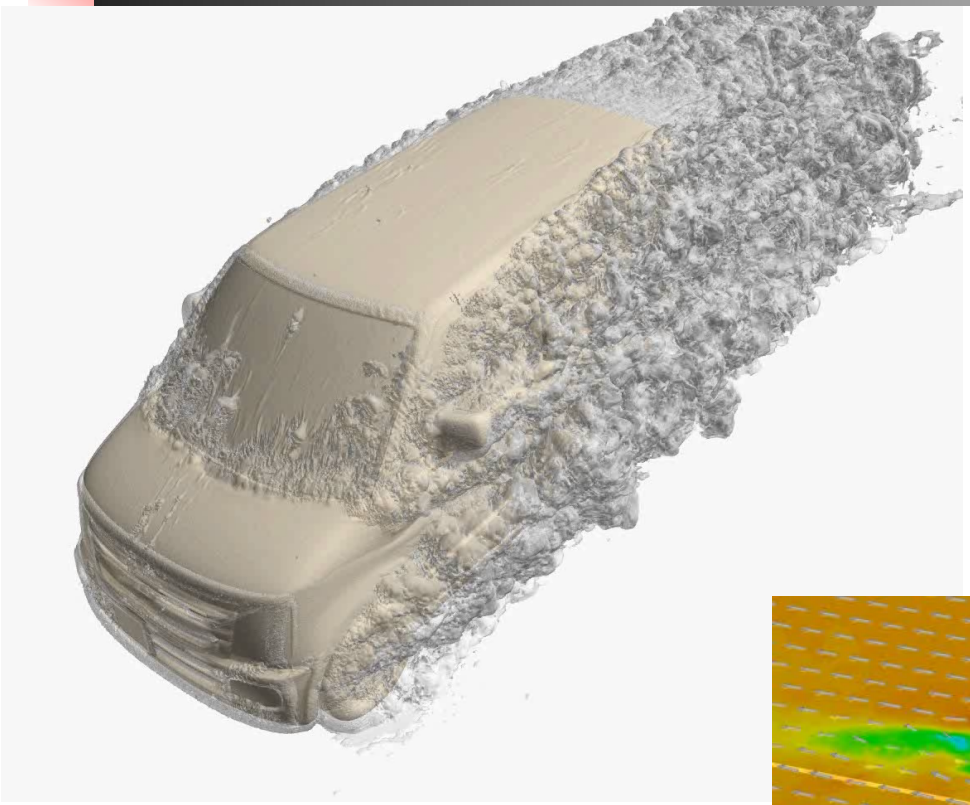
- 以下 削除したスライド

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

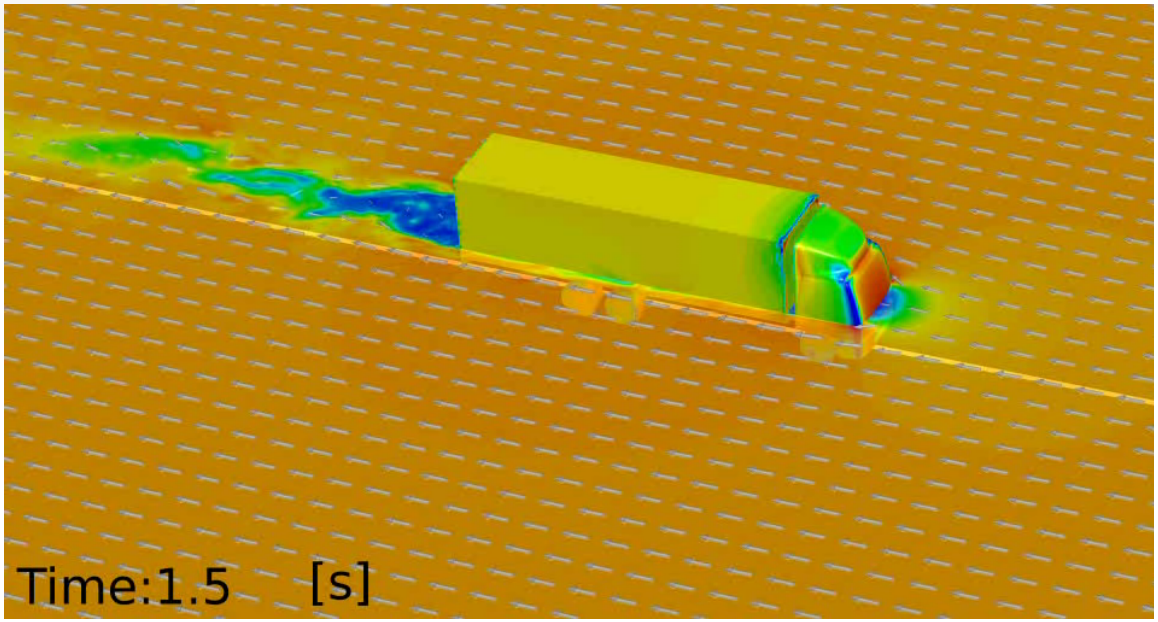


超並列流体シミュレーションによる次世代空力解析（坪倉）

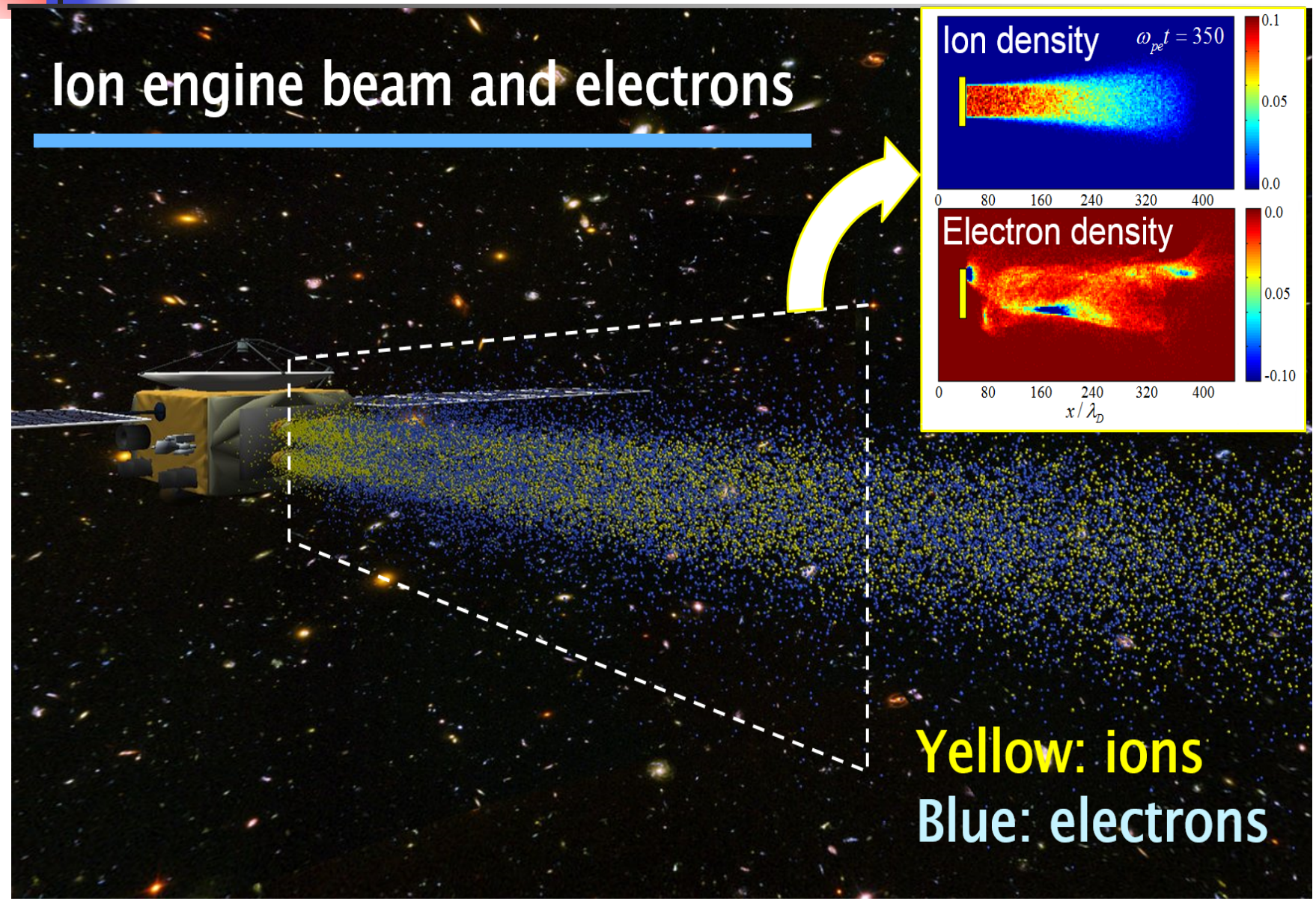


京スパコン（32,000コア並列）の活用により、自動車空気抵抗を、風洞実験値誤差2%で予測

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



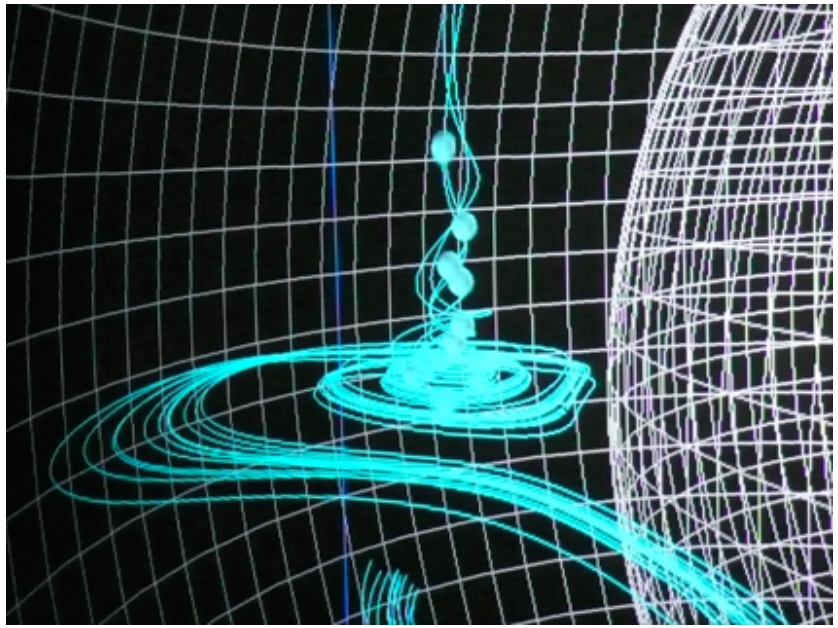
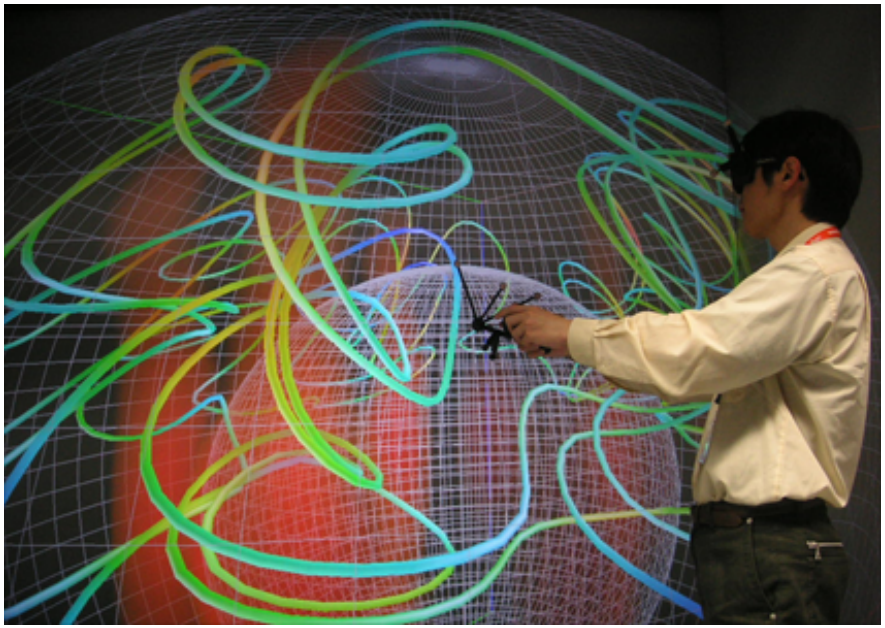
大規模シミュレーションの例（臼井）



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