



# OACIS講習会 (session1)

村瀬洋介<sup>1,2</sup> , 内種岳詞<sup>1,2</sup>

1: 理化学研究所, 2: JST CREST

2015/10/21 OACIS公開ソフト講習会



# session構成

- session1
  - 13:00 – 13:20 概要説明
  - 13:20 – 13:50 シミュレーション実行ハンズオン
- session2
  - 14:00 – 14:50 simulator, analyzer, host登録のデモ
- session3
  - 15:00 – 15:50 各自の環境に合わせたOACISのセットアップ（希望者）

- 概要説明 (13:00 – 13:20)
  - 講師紹介
  - OACIS概要
  - 仮想環境について
- シミュレーション実行ハンズオン (13:20 – 13:50)
  - 事前準備の状況確認
  - シミュレーション実行
    - OACIS起動
    - Simulator選択
    - ParameterSetとRun作成
    - 結果確認
      - 出力ファイル
      - plot
      - plotのURLにアクセス
  - OACIS停止

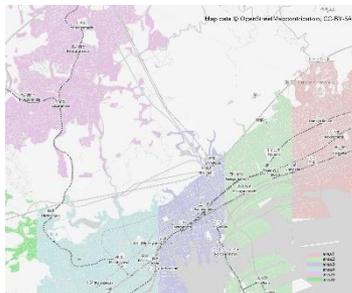
# 概要説明 (13:00 – 13:20)

- 村瀬洋介

- 専門：統計物理（複雑ネットワーク、計算社会科学）
- 2010年3月、東大物理工学専攻で学位取得
- 2013年4月よりAICS離散事象シミュレーションチーム

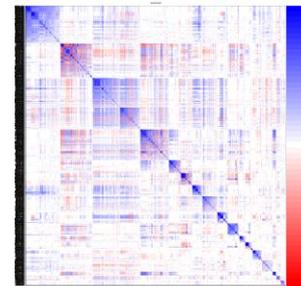
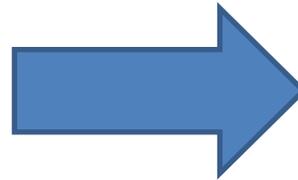
- 内種岳詞

- 自動車交通シミュレーションの分析



神戸三宮周辺の道路地図  
© OpenStreetMap contributors

因子分析



分散共分散行列の  
因子によるソート

# OACIS概要

- 計算科学の研究プロセスにおいて、様々なパラメータで系統的にシミュレーションを実行することが多い

```
observe phenomena()
consider a model()
write a source code()
write a script for analysis()
```

```
while ( necessary ) {
  select a suitable parameter sets()
  execute simulation run using the parameters()
  take a note to remember what I am doing()
  wait for completion of the simulation run()
  transfer the output files to suitable folders()
  keep a note to remember what is done()
  analyze data()
  create a graph()
}
```

```
write a paper()
present in a meeting()
```

## essential in research activities

- 多数の試行錯誤を求められることが多い
- 実行時の記録が手間になる、情報が不完全
- リモートホストのジョブの監視
- 数ヶ月後、結果を見ても思い出せない

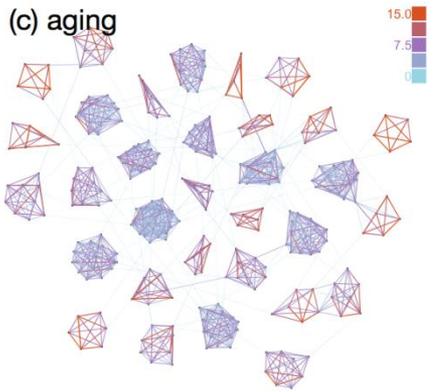
いくら計算リソースがあっても活用しきることが難しい

# OACIS

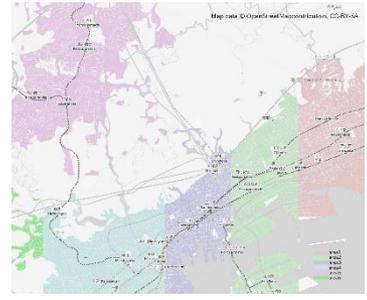
# OACISとは

- OACIS (Organizing Assistant for Comprehensive and Interactive Simulations)
  - ジョブの実行や結果の管理をするツール
- AICSの離散事象シミュレーション研究チーム (Discrete Event Simulation Research Team) で2013年より開発
  - 2014年にversion1をMITライセンスで公開。いくつかのプロジェクトで実運用
  - 仕様が固まってきて2015年10月にメジャーバージョンアップ (v2.0.0)

## 複雑ネットワーク

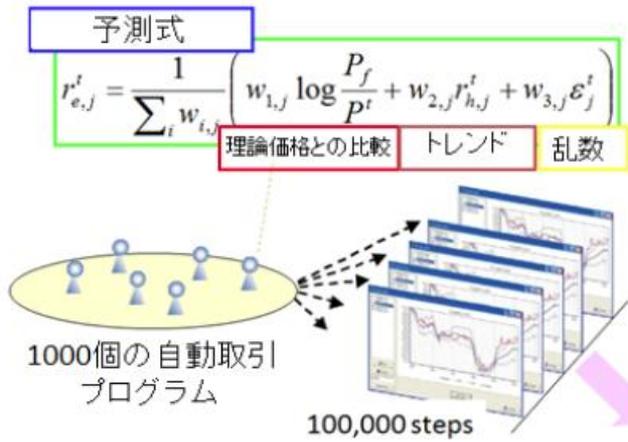


## 交通流シミュレーション



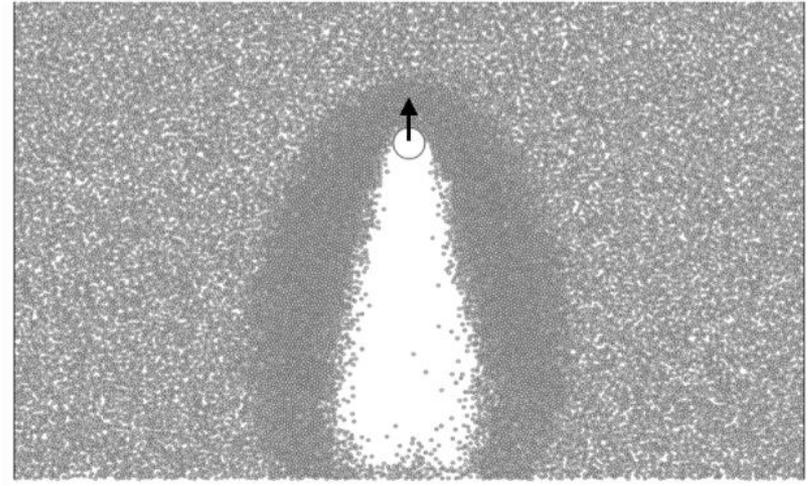
神戸三宮周辺の道路地図  
© OpenStreetMap contributors

## 株式市場シミュレーション



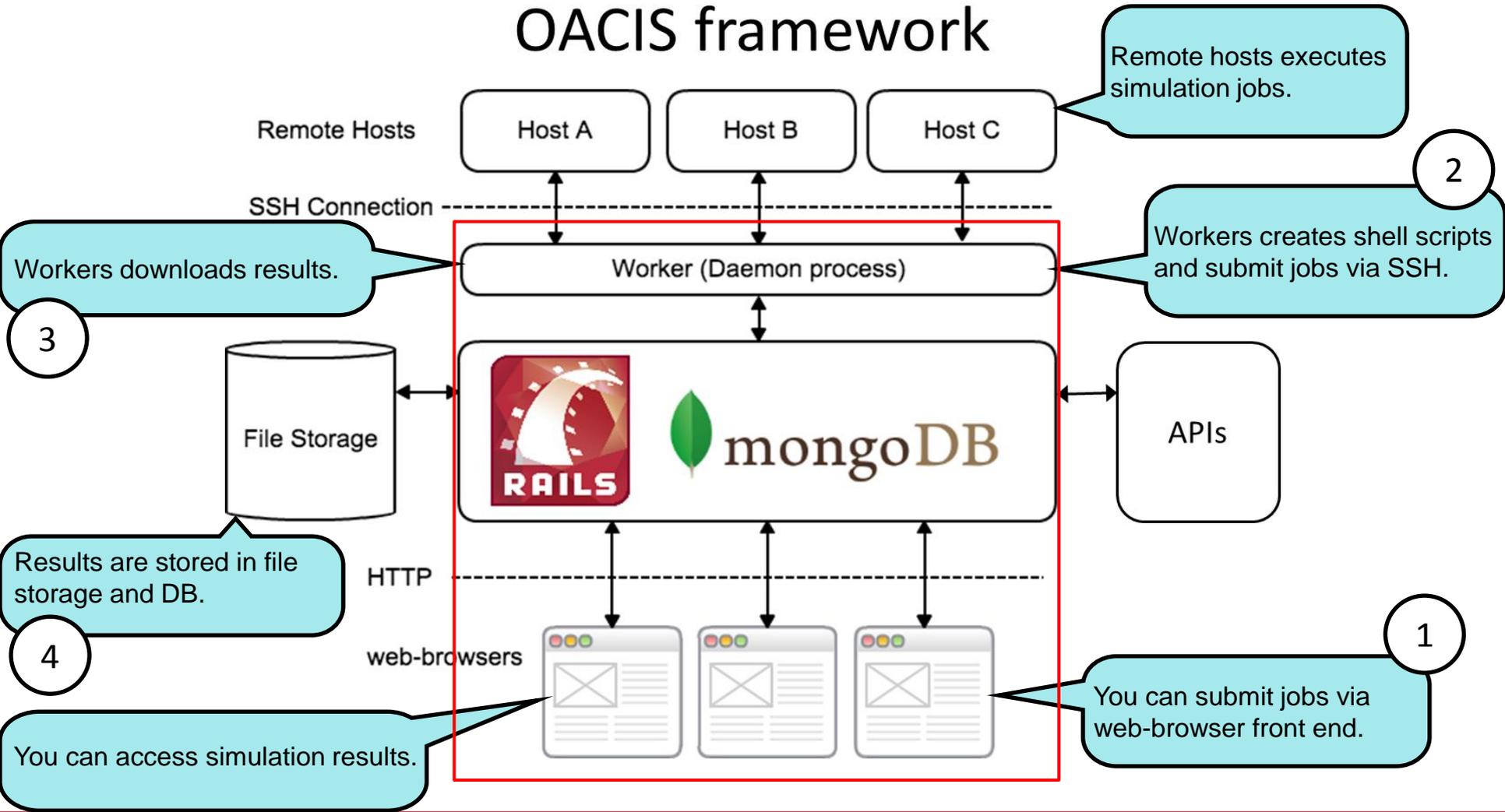
Mizuta, Izumi et al.

## 粉体分子動力学シミュレーション



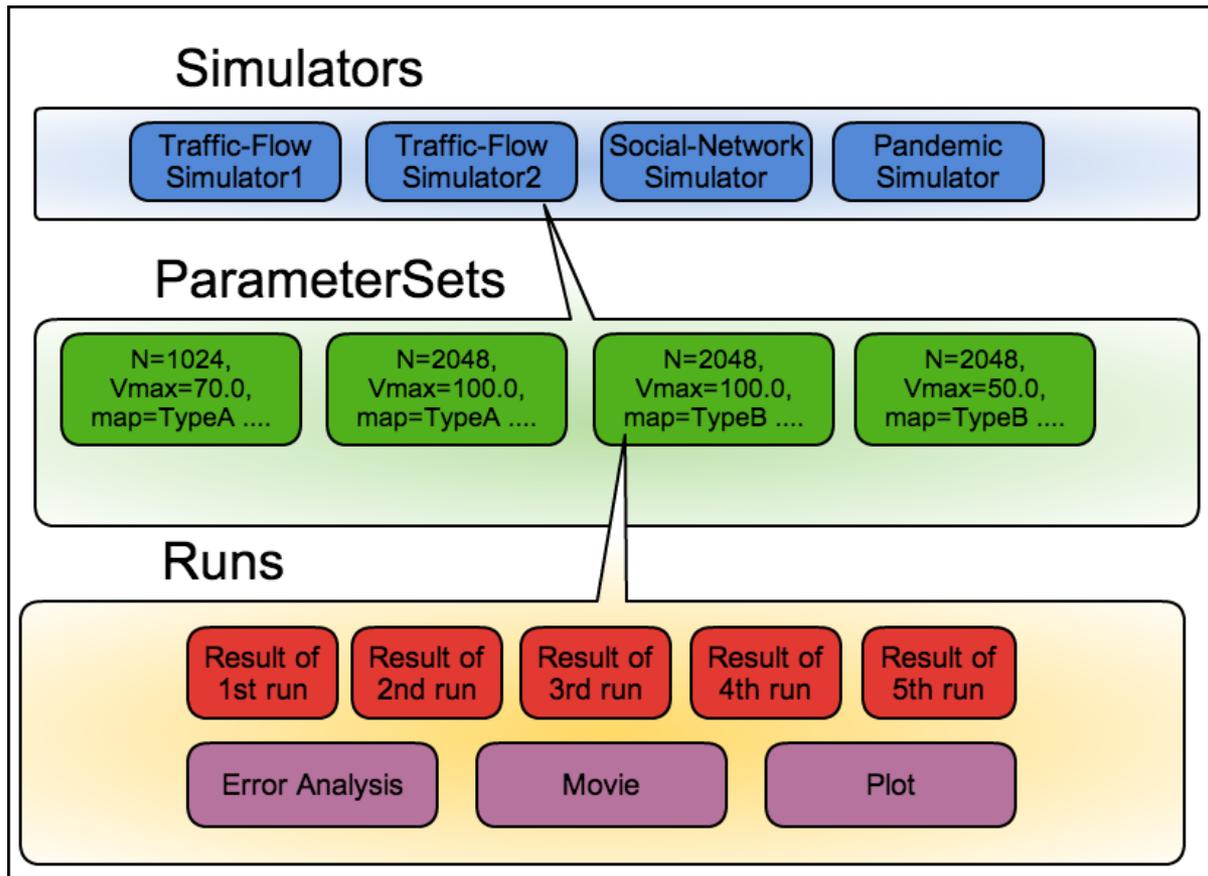
# System Overview

## OACIS framework



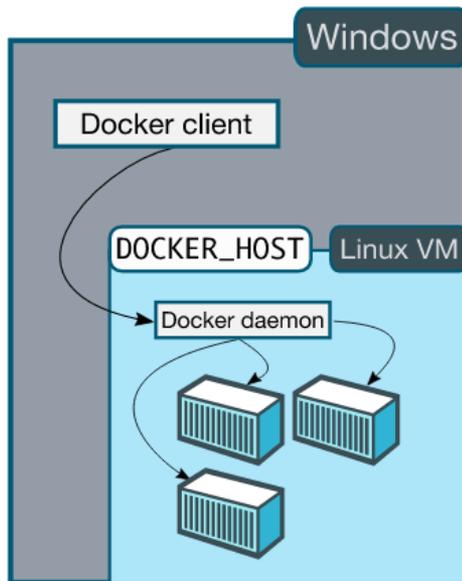
# Data structure

- データベース内に階層的に保存される  
– Simulator, ParameterSet, Run

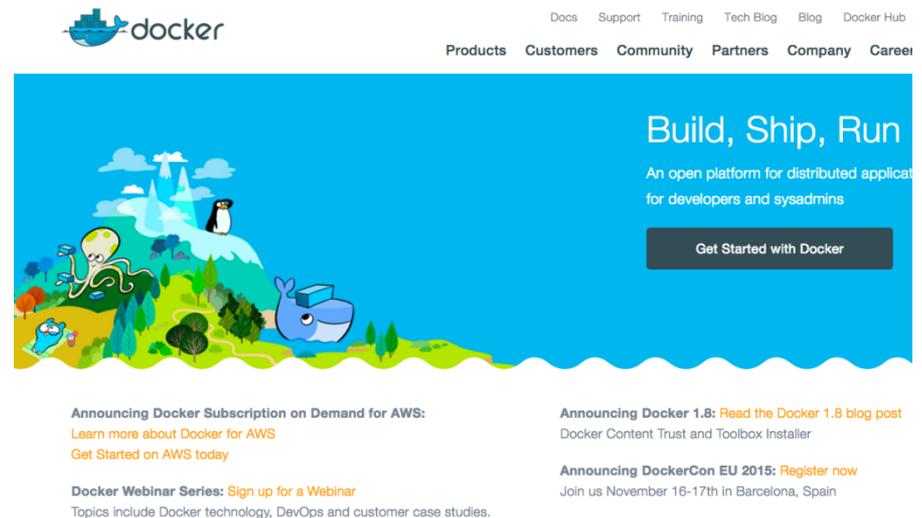


# 仮想環境について

- Docker を利用した仮想環境イメージを配布
  - MongoDB や Ruby など をユーザーがインストールしなくてもよい
  - Windows ユーザーでも使うことができる



<https://docs.docker.com/installation/windows/>



<https://www.docker.com/>

- OACIS: “Organizing Assistant for Comprehensive and Interactive Simulations” [1, 2]

[1] Y. Murase, T. Uchitane and N. Ito, “A tool for parameter-space explorations”, proceedings of 27’ th CSP workshop 2014

[2] OACIS is released as a open software in <http://github.com/crest-cassia/oacis>

# OACISまとめ

- OACIS機能
  - DBへの実験データ自動保存。実験結果のトレーサビリティを確保
  - Webインターフェースによる実験管理と結果の閲覧
  - 複数のリモートホストの利用  
(デスクトップ、HPC, 「京」コンピュータ)
- 利点
  - 創造的な作業に集中可能
  - 統一インターフェースによる研究者間の情報共有
- 対象分野
  - 計算科学分野全般
    - モデルパラメータ数が多い
    - 試行錯誤的にパラメータやモデルを変えてみたい

# シミュレーション実行ハンズオン (13:20 - 13:50)

# 事前準備の状況確認

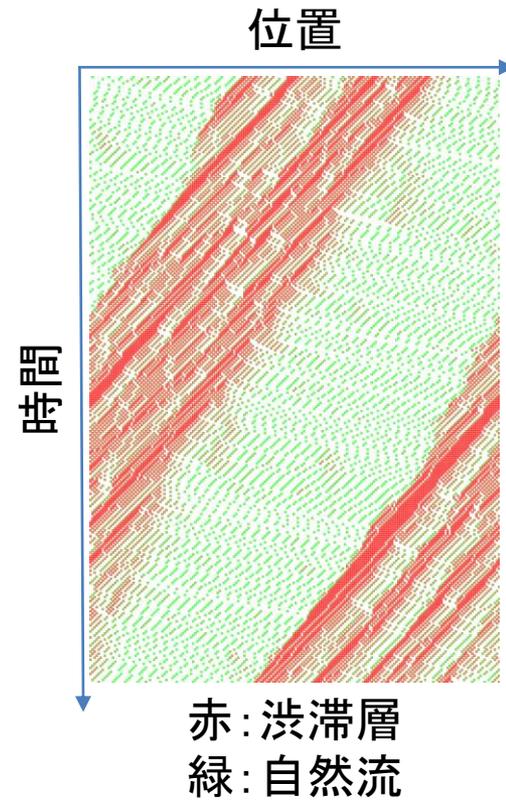
1. 仮想環境 (docker-engine) のインストール
    - インストール作業
    - docker infoコマンドの動作
  2. スクリプトのダウンロードとOACIS実行
    - スクリプトのダウンロード
    - スクリプトの実行
    - OACIS起動確認
- インターネット接続の確認
    - SSID: aics-guest
    - PASS: xxxxxxxxxxxxxxxxxx

# シミュレーション実行

- 目的：OACISによるシミュレーション実行を体験
- 作業：
  - Simulator登録済みのOACISをダウンロード
  - OACIS起動
  - ParameterSet作成
  - Runの作成
  - 結果の確認
    - 出力ファイル
    - plot
    - plotのURLにアクセス

```

_output.json
{
  "velocity":0.5663166666666667,
  "flow":0.169894999999999955
}
  
```



- Docker Quickstart Terminalの実行
- プロジェクトファイルをダウンロード



```
mkdir work_dir
cd work_dir
```

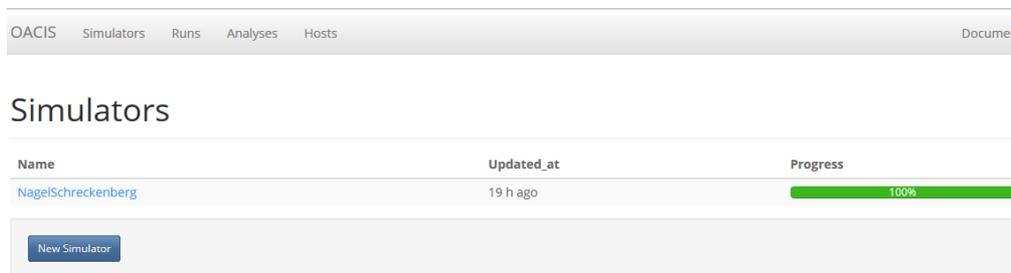
```
#ダウンロード https://www.dropbox.com/s/hytazj9h9mapin2/NS.tar.bz2
tar jxf NS.tar.bz2
```

- OACISの起動

```
~/oacis_docker/bin/restore.sh NS
~/oacis_docker/bin/restart.sh NS
```

- OACIS web インターフェースの確認

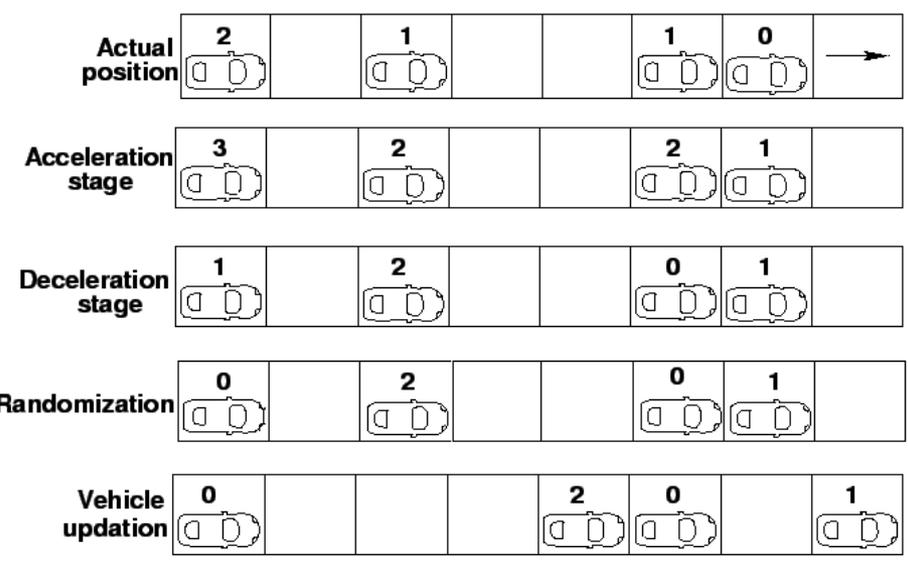
– <http://192.168.99.100:3000> へアクセス



OACIS web インターフェース

# Nagel-Schreckenberg model

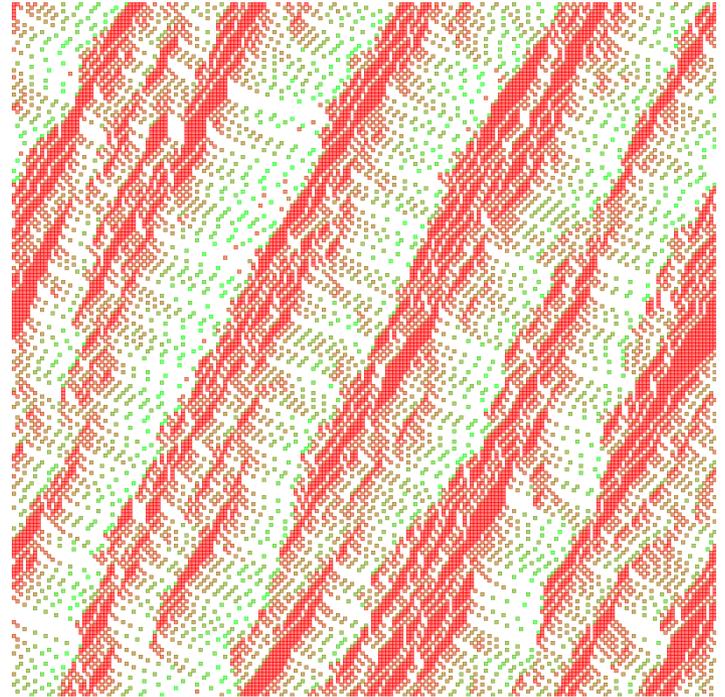
- Nagel-Schreckenbergモデルは1990年代に提案された交通流モデル
- 単純なセルラーオートマトンでありながら自然渋滞を再現した
- 詳細は [Wikipedia] ([https://en.wikipedia.org/wiki/Nagel%E2%80%93Schreckenberg\\_model](https://en.wikipedia.org/wiki/Nagel%E2%80%93Schreckenberg_model)) を参照



[http://www.civil.iitb.ac.in/tvm/1111\\_nptel/544\\_TrCA/plain/plain.html](http://www.civil.iitb.ac.in/tvm/1111_nptel/544_TrCA/plain/plain.html)

Key	Description
$l$	Road length
$v$	Maximum velocity
$\rho$	Car density
$p$	deceleration probability
$t_{init}$	thermalization steps
$t_{measure}$	measurement steps

- ソースコード
  - [https://github.com/yohm/nagel\\_schreckenberg\\_model](https://github.com/yohm/nagel_schreckenberg_model)
- パラメータを引数で渡すとシミュレーションが実行される
- 
- 平均速度、流量とシミュレーションのスナップショットのpngファイルが出力される



# Simulator 選択

- Simulator 選択

- Simulator 情報確認

モデルパラメータ&シミュレーション設定

パラメータがDBに保存される  
[Name, Type, Default value, description]



## Simulators

クリック

Name

NagelSchreckenberg

New Simulator

OACIS Simulators Runs Analyses Hosts

Simulators / NagelSchreckenberg

クリック

## NagelSchreckenberg

About Parameter Sets Progress

SimulatorDescription

NagelSchreckenberg model simulation

- Nagel-Schreckenbergモデルは1990年代に提案された交通流モデル
- 単純なセルラーオートマトンでありながら自然渋滞を再現した
- 詳細はWikipediaを参照

Duplicate Edit Destroy

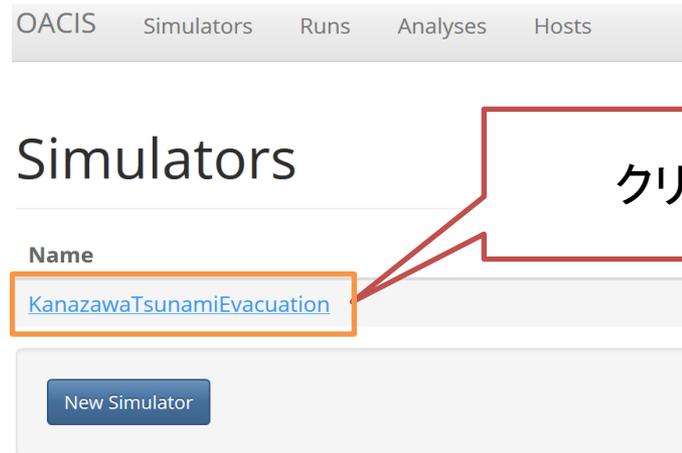
About

Parameter Input Type	Arguments
Support MPI	No
Support OMP	No
Executable On	localhost

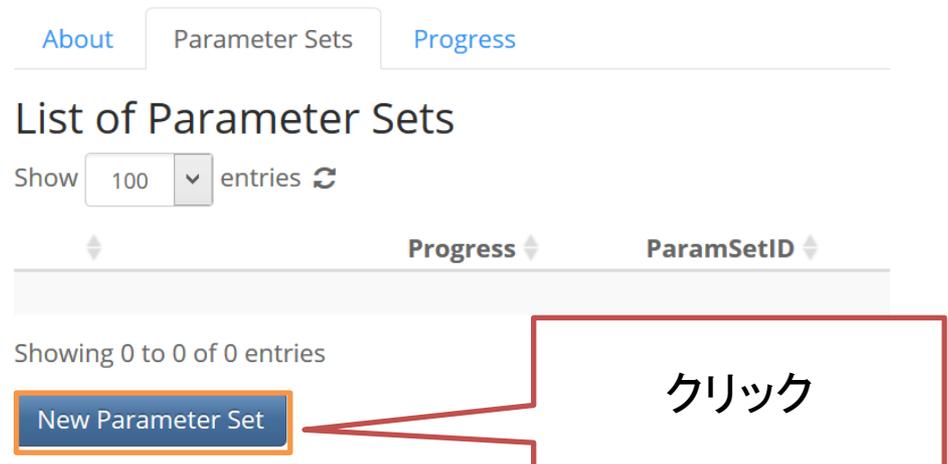
Defined Parameters

	Type	Default	Description
l	Integer	200	road length
v	Integer	5	maximum velocity
rho	Float	0.3	car density
p	Float	0.1	deceleration probability(0.0, 1.0)
t_init	Integer	1000	thermalization steps
t_measurer	Integer	300	measurment steps

- Simulator選択



- ParameterSetの画面へ



# ParameterSetとRun作成

- ParameterSetとRunの作成
  - パラメータの値をコンマ区切りで入力
    - $v = [1, 3, 5]$
    - $\rho = [0.05, 0.1, 0.15, 0.2, 0.25, 0.3, 0.35, 0.4, 0.45, 0.5]$
  - Target # of Runs に `1` を選択
  - Createボタンを押す

Create a new parameter set on: NagelSchreckenberg

I (Integer)	<input type="text" value="200"/>	road length	① 値を指定
v (Integer)	<input type="text" value="1,2,3,4,5"/>	maximum velocity	
rho (Float)	<input type="text" value="0.1,0.2,0.3,0.4,0.5,0.6,0.7,0.8,0.9"/>	car density	
p (Float)	<input type="text" value="0.1"/>	deceleration probability[0.0, 1.0]	
t_init (Integer)	<input type="text" value="1000"/>	thermalization steps	
t_measuer (Integer)	<input type="text" value="300"/>	measurment steps	
Target # of Runs	<input type="text" value="1"/>		② 1を選択
Submitted to	<input type="text" value="localhost"/>		
Priorities of Runs	<input type="text" value="normal"/>		
	<input type="button" value="Create"/> <input type="button" value="Cancel"/>		③ クリック

# ParameterSetとRun作成

OACIS Simulators Runs Analyses Hosts Document

45 ParameterSets and 45 runs were created

作成成功メッセージ

Simulators / NagelSchreckenberg

ParameterSet一覧表示

## NagelSchreckenberg

About Parameter Sets Progress

指定した値はDBに登録

### List of Parameter Sets

Show 100 entries

	Progress	ParamSetID	Updated_at	l	v	rho	p	t_init	t_measuer
Q	100%	faac24	1 min. ago	200	4	0.5	0.1	1000	300
Q	100%	faac23	1 min. ago	200	4	0.4	0.1	1000	300
Q	100%	faac22	1 min. ago	200	4	0.3	0.1	1000	300
Q	100%	faad31	1 min. ago	200	5	0.9	0.1	1000	300
Q		faad30	1 min. ago	200	5	0.8	0.1	1000	300
Q		faad2f	1 min. ago	200	5	0.7	0.1	1000	300
Q		faad2e	1 min. ago	200	5	0.6	0.1	1000	300
Q		faad2d	1 min. ago	200	5	0.5	0.1	1000	300

Runの実行状況は  
プログレスバー表示

# ParameterSetとRun作成

45 ParameterSets and 45 runs were created

Simulators / NagelSchreckenberg

## NagelSchreckenberg

About Parameter Sets Progress

### List of Parameter Sets

Show 100 entries

	Progress	ParamSetID	Updated_at	l	v	rho	p	t_init	t_measuer	
Q	<div style="width: 100%; background-color: blue;">100%</div>	faad2a	< 1 min. ago	200	5	0.2	0.1	1000	300	🗑️
Q	<div style="width: 100%; background-color: blue;">100%</div>	faad29	< 1 min. ago	200	5	0.1	0.1	1000	300	🗑️
Q	<div style="width: 100%; background-color: green;">100%</div>	faad26	< 1 min. ago	200	4	0.7	0.1	1000	300	🗑️
Q	<div style="width: 100%; background-color: green;">100%</div>	faad25	< 1 min. ago	200	4	0.6	0.1	1000	300	🗑️
Q	<div style="width: 100%; background-color: orange;">100%</div>	faad28	< 1 min. ago	200	4	0.9	0.1	1000	300	🗑️
Q	<div style="width: 100%; background-color: orange;">100%</div>	faad27	1 min. ago	200	4	0.8	0.1	1000	300	🗑️
Q	<div style="width: 100%; background-color: green;">100%</div>	faac24	1 min. ago	200	4	0.5	0.1	1000	300	🗑️
Q	<div style="width: 100%; background-color: green;">100%</div>	faac23	1 min. ago	200	4	0.4	0.1	1000	300	🗑️

プログレス  
 緑: 正常終了  
 橙: 実行中  
 青: 準備中  
 赤: 異常終了

45 ParameterSets and 45 runs were created

Simulators / NagelSchreckenberg

## NagelSchreckenberg

About Parameter Sets Progress

### List of Parameter Sets

Show 100 entries

	Progress	ParamSetID	Updated_at			rho	p	t_init	t_measuer	
Q	<div style="width: 100%; background-color: blue;"></div> 100%	faad2a	< 1 min. ago	200	5	0.2	0.1	1000	300	🗑
Q	<div style="width: 100%; background-color: blue;"></div> 100%	faad29	1 min. ago	200	5	0.1	0.1	1000	300	🗑
Q	<div style="width: 100%; background-color: green;"></div> 100%	faad26	< 1 min. ago	200	4	0.7	0.1	1000	300	🗑
Q	<div style="width: 100%; background-color: green;"></div> 100%	faad25	< 1 min. ago	200	4	0.6	0.1	1000	300	🗑
Q	<div style="width: 100%; background-color: orange;"></div> 100%	faad28	< 1 min. ago	200	4	0.9	0.1	1000	300	🗑
Q	<div style="width: 100%; background-color: orange;"></div> 100%	faad27	1 min. ago	200	4	0.8	0.1	1000	300	🗑
Q	<div style="width: 100%; background-color: green;"></div> 100%	faac24	1 min. ago	200	4	0.5	0.1	1000	300	🗑
Q	<div style="width: 100%; background-color: green;"></div> 100%	faac23	1 min. ago	200	4	0.4	0.1	1000	300	🗑

クリック

(緑色のプログレスバー)  
(IDは環境時間で異なる)

# 結果確認

OACIS Simulators Runs Analyses Hosts Document

Simulators / NagelSchreckenberg / Param:561dfaad356339008d260000

## Parameter Set

/home/oacis/oacis/public/Result\_development/561cdf0931353504508.../561...

About Runs Analyses Plot

Runs on (l=200, v=4, rho=0.7, p=0.1, t\_init=1000, t\_measuer=300)

Show 10 entries

RunID	status	priority	elapsed	MPI	OMP	version	created_at	finished_at	host	job_id
faad53	finished	normal	28.81	1	1		5 h ago	5 h ago	localhost	1607

ParameterSetのページ

パラメータ値の表示

ParameterSetに紐づいた  
Runの一覧

クリック

# 結果確認

OACIS   Simulators   Runs   Analyses   Hosts   Document

[Simulators](#) / [NagelSchreckenberg](#) / [Param:561dfaad356339008d260000](#) / [Run:561dfaad356339008d530000](#)

## Run

(l=200, v=4, rho=0.7, p=0.1, t\_init=1000, t\_measurer=300)  
/home/oacis/oacis/public/Result\_development/561cdf093135350450000000/561dfaad356339008d260000/561dfaad356339008d530000

[About](#)   [Results and Analyses](#)

### Results

velocity	0.2582833333333336
flow	0.18079833333333317

### Output Files

/Result\_development/561cdf093135350450000000/561dfaad356339008d260000/561dfaad356339008d530000/

- 561dfaad356339008d530000\_xsub.sh
- \_output.json
- \_status.json
- \_stderr.bt
- \_stdout.bt
- \_time.bt
- initial\_time\_series.dat
- traffic.png



[Download Archive](#)

Runのページ

\_output.jsonの内容はDBに保存される

結果ファイル一覧 (クリックすると内容を表示)

画像ファイルを確認可能

結果ファイル一覧をダウンロード可能

# 結果確認

Simulators / NagelSchreckenberg / Param:561dfaad356339008d260000 / Run:561dfaad356339008d530000

ファイルシステムでのパス

## Run

(l=200, v=4, rho=0.7, p=0.1, t\_init=1000, t\_measurer=300)  
/home/oacis/oacis/public/Result\_development/561cdf093135350450000000/561dfaad356339008d260000/561dfaad356339008d530000

About Results and Analyses

## Results

velocity	0.25828333333333336
flow	0.18079833333333317

## Output Files

/Result\_development/561cdf093135350450000000/561dfaad356339008d260000/561dfaad356339008d530000/

- 561dfaad356339008d530000\_xsub.sh
- \_output.json
- \_status.json
- \_stderr.bt
- \_stdout.bt
- \_time.bt
- initial\_time\_series.dat
- traffic.png



Download Archive

結果ファイルは一意のURLでアクセス可能

(例)画像ファイルのURL:  
[http://192.168.99.100:3000/Result\\_development/561cdf093135350450000000/561dfaad356339008d260000/561dfaad356339008d530000/traffic.png](http://192.168.99.100:3000/Result_development/561cdf093135350450000000/561dfaad356339008d260000/561dfaad356339008d530000/traffic.png)

ノートにURLを貼り付ければ結果をまとめるのに有用

# 結果確認

OACIS Simulators Runs Analyses Hosts Document

Simulators / NagelSchreckenberg / [Param:561dfaad356339008d260000](#)

## Parameter Set

/home/oacis/oacis/public/Result\_development/561cdf0931352...561dfaad356339008d260000

About Runs Analyses **Plot**

Runs on (l=200, v=4, rho=0.7, p=0.1, t\_init=1000, t\_measuer=300)

Show  entries 

RunID	status	priority	elapsed	MPI	OMP	version	created_at	finished_at	host	job_id
<a href="#">faad53</a>	finished	normal	28.81	1	1		5 h ago	5 h ago	localhost	1607

クリック  
(ParameterSetへのリンク)

クリック  
(Plot機能を表示)

# 結果確認

## Parameter Set

/home/oasis/oasis/public/Result\_development/5625a5533939360088030000/5625a7c8343

About Runs Analyses Plot

Plot on (l=200, v=2, rho=0.05, p=0.1, t\_init=100, t\_measure=300)

Plot type

X-Axis  Y-Axis  Series

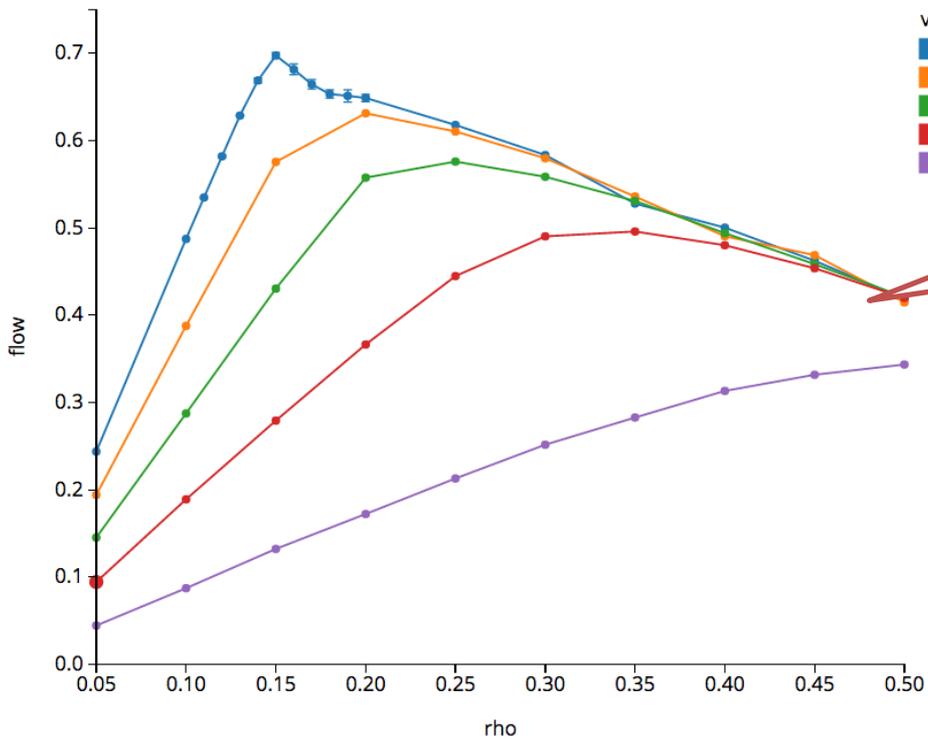
Irrelevant parameters:  
 l  v  rho  p  t\_init  t\_measure

line plotを選択

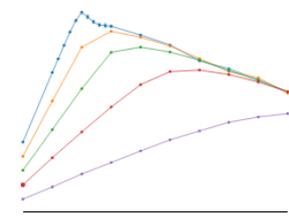
X-Axis: rho  
Y-Axis: flow

クリック

DBに保存されたデータが  
プロットされる



log scale on x axis  
 log scale on y axis



# 結果確認

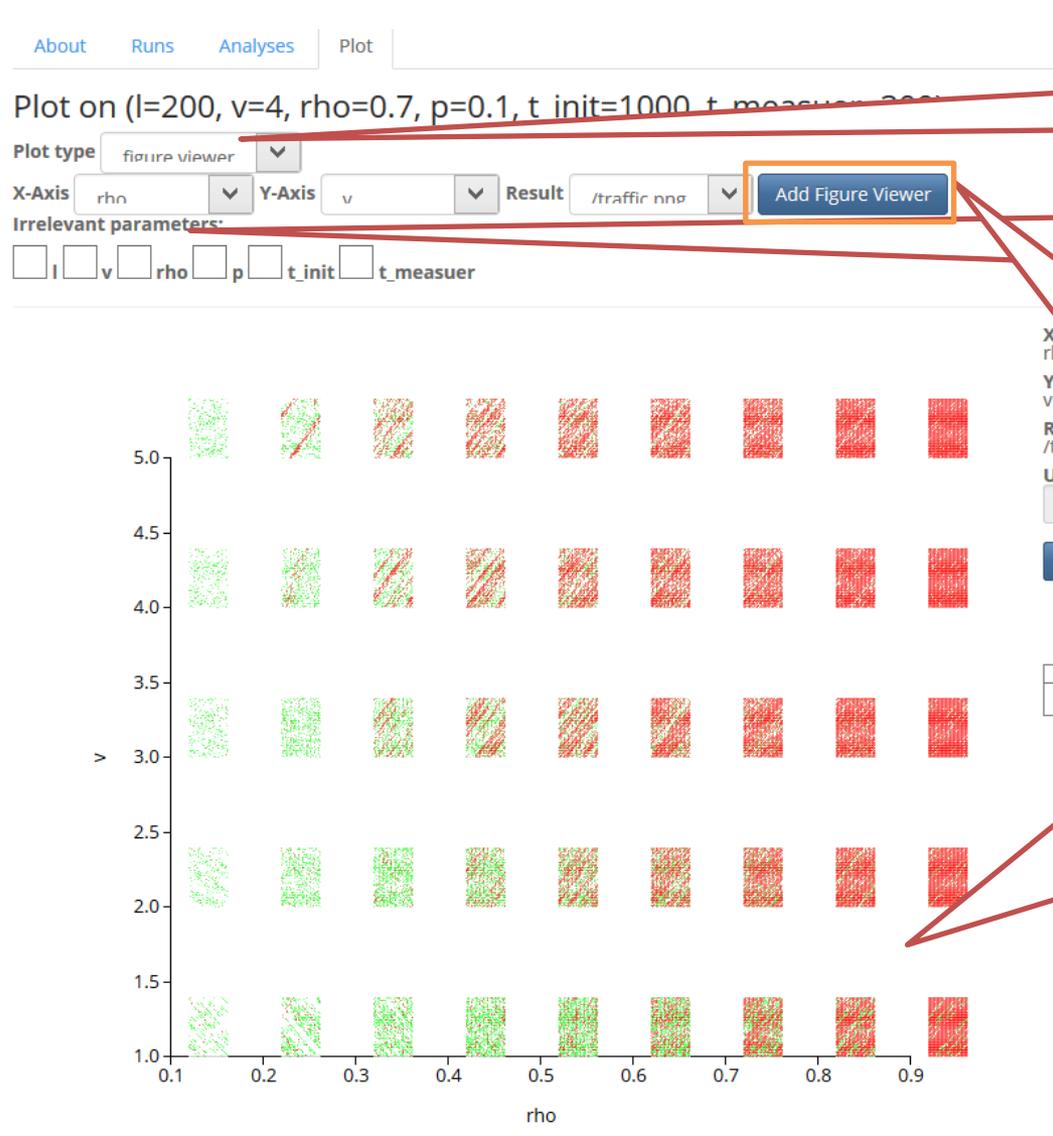


figure viewerを選択

X-Axis: rho  
Y-Axis: v  
Result: .traffic.png

クリック

画像データが  
プロットされる  
(マウスオーバーで拡大)

# 結果確認

About Runs Analyses **Plot**

Plot on (l=200, v=4, rho=0.7, p=0.1, t\_init=1000, t\_measuer=300)

Plot type

X-Axis  Y-Axis  Result

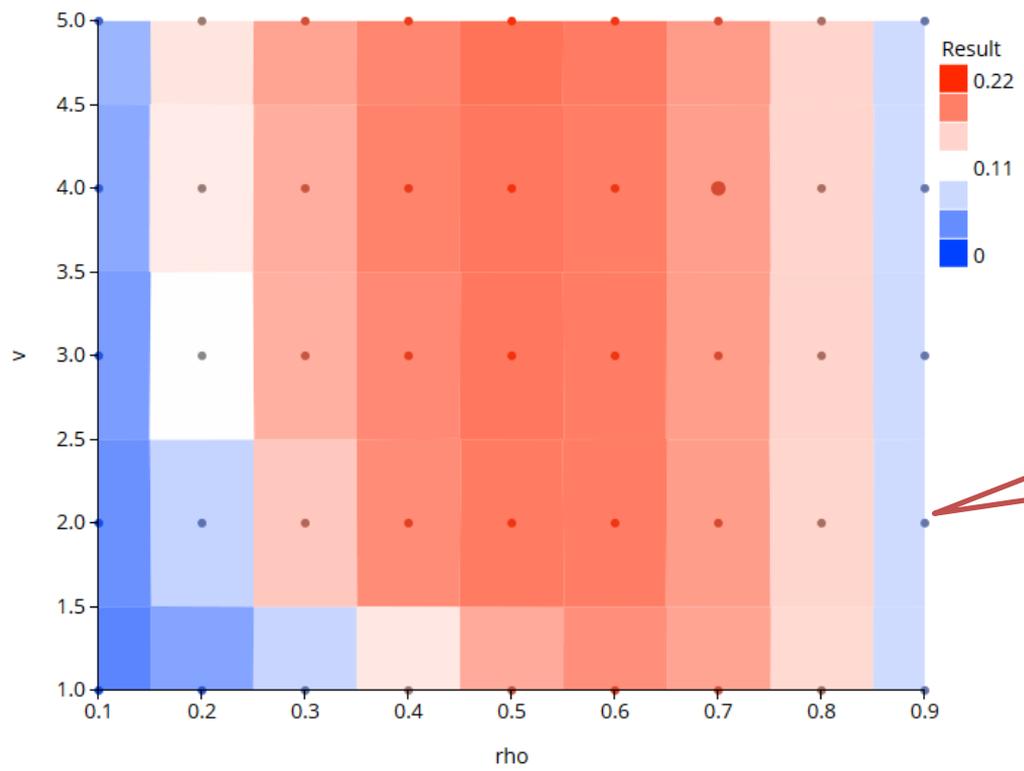
Irrelevant parameters:  
 l  v  rho  p  t\_init  t\_measuer

scatter plotを選択

X-Axis: rho  
 Y-Axis: v  
 Result: .flow

クリック

DBに保存されたデータが  
 プロットされる



Result range :

# 結果確認

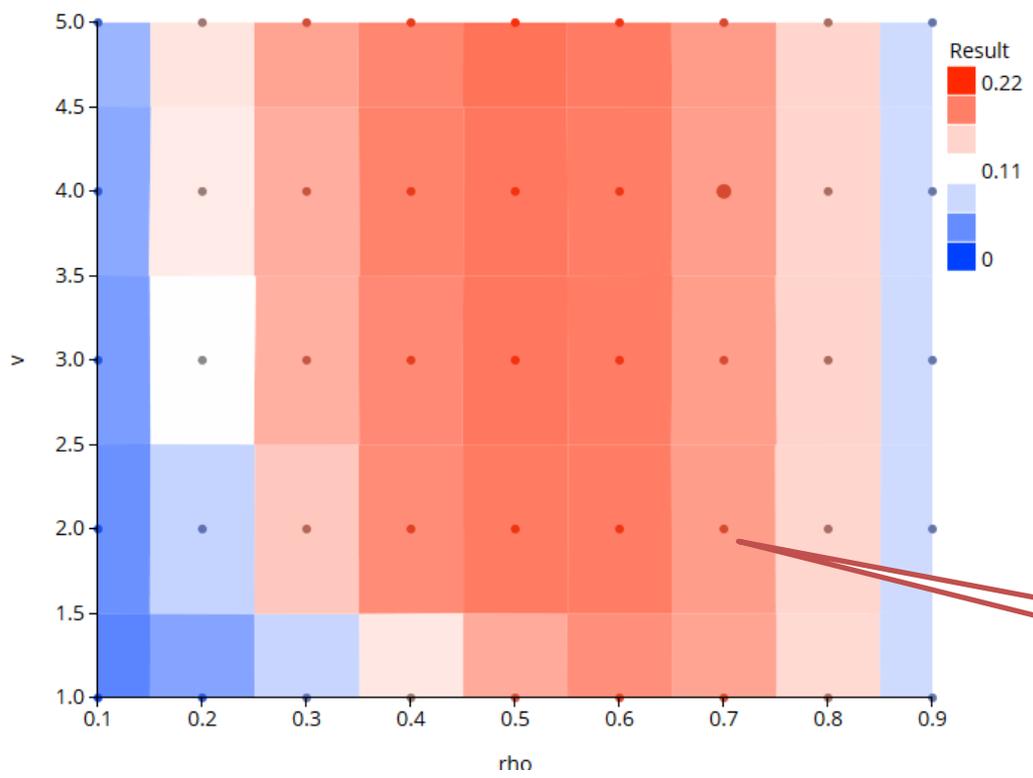
About Runs Analyses **Plot**

Plot on ( $l=200, v=4, \rho=0.7, p=0.1, t_{init}=1000, t_{measuer}=300$ )

Plot type

X-Axis  Y-Axis  Result

Irrelevant parameters:  
 l  v  rho  p  t\_init  t\_measuer



PlotにURLがつく  
(ノートにURLをはる)

X-Axis rho  
Y-Axis v  
Result flow  
URL  
`http://192.168.99.100:3000/parameter_sets/561dfaad356339`

Action

- show data in json
- download svg
- delete plot

画像のダウンロード可

データ点をダブルクリックで  
詳細を確認

# そのほか

- Documentを開く
  - バックアップ、データ共有など
- $\rho=0.0$ でシミュレーションを試してみる
  - Simulatorはエラーを返す
- 100個以上のParameterSetをCLIで作ってみる
  - `~/oacis_docker/bin/exec_shell.sh NS`
  - `cd ~/oacis;`
  - コマンド入力

# OACIS停止

- Docker Quickstart Terminalの実行
- プロジェクトディレクトリへ移動



```
cd work_dir
```

## – OACIS停止

```
~/oacis_docker/bin/stop.sh NS
```

## – OACIS再実行

```
~/oacis_docker/bin/restart.sh NS
```

## – データ dump

```
~/oacis_docker/bin/dump.sh NS
```

```
ls NS/db #データの確認
```

## – プロジェクト削除

```
~/oacis_docker/bin/restart.sh NS
```

```
rm -rf NS #データディレクトリの削除
```

# まとめ

- 仮想環境 (docker-engine) のインストール
  - OACIS起動
  - OACISを利用したシミュレーション実行体験
    - Simulator選択
    - ParameterSetとRun作成
    - 結果確認
      - 出力ファイル
      - Plot
  - OACIS停止
- ⇒ Session 2ではSimulator登録をデモする