



Computer simulations create the future

OACIS講習会 (session1)

村瀬洋介, 内種岳詞

理化学研究所 計算科学研究機構

2016/03/25 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 – 14:30 simulator, analyzer, host登録方法の説明とハンズオン
- session3
 - 14:40 – 15:00 各自の環境に合わせたOACISのセットアップ（希望者）

Session1の流れ

- 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

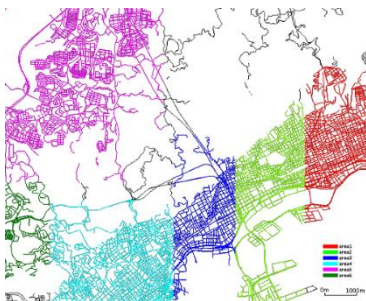
概要説明 (13:00 – 13:20)

- 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

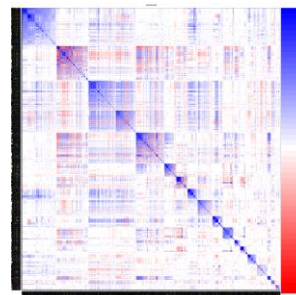
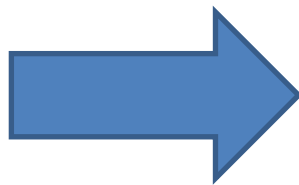
- 内種岳詞

- 都市規模の自動車交通シミュレーション



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

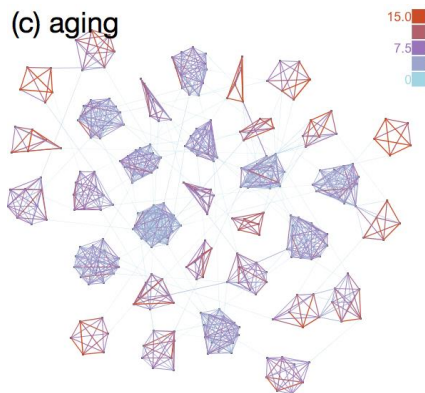
OACIS

OACISとは

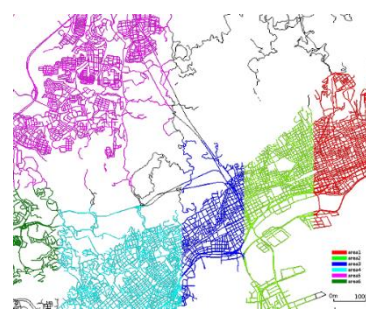
- OACIS (Organizing Assistant for Comprehensive and Interactive Simulations)
 - ジョブの実行や結果の管理をするツール
- AICSの離散事象シミュレーション研究チーム (Discrete Event Simulation Research Team) で2013年より開発
 - 2014年にversion1をMITライセンスで公開。いくつかのプロジェクトで実運用
 - 2015年3月時点でバージョン (v2.4.0) を公開

実運用例

複雑ネットワーク



自動車交通流、人流シミュレーション



神戸三宮周辺の地図

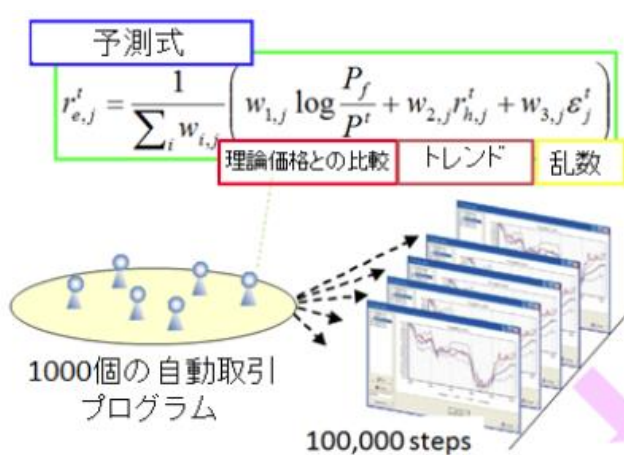
© OpenStreetMap contributors



金沢大徳地区周辺の地図

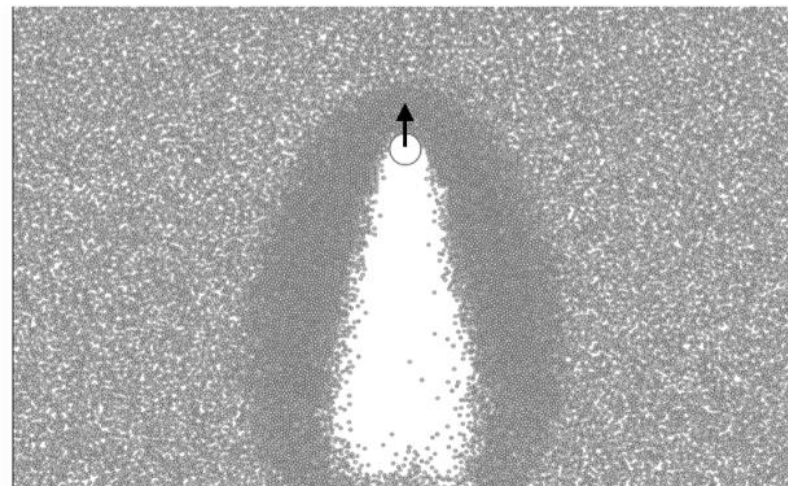
© GoogleMap

株式市場シミュレーション

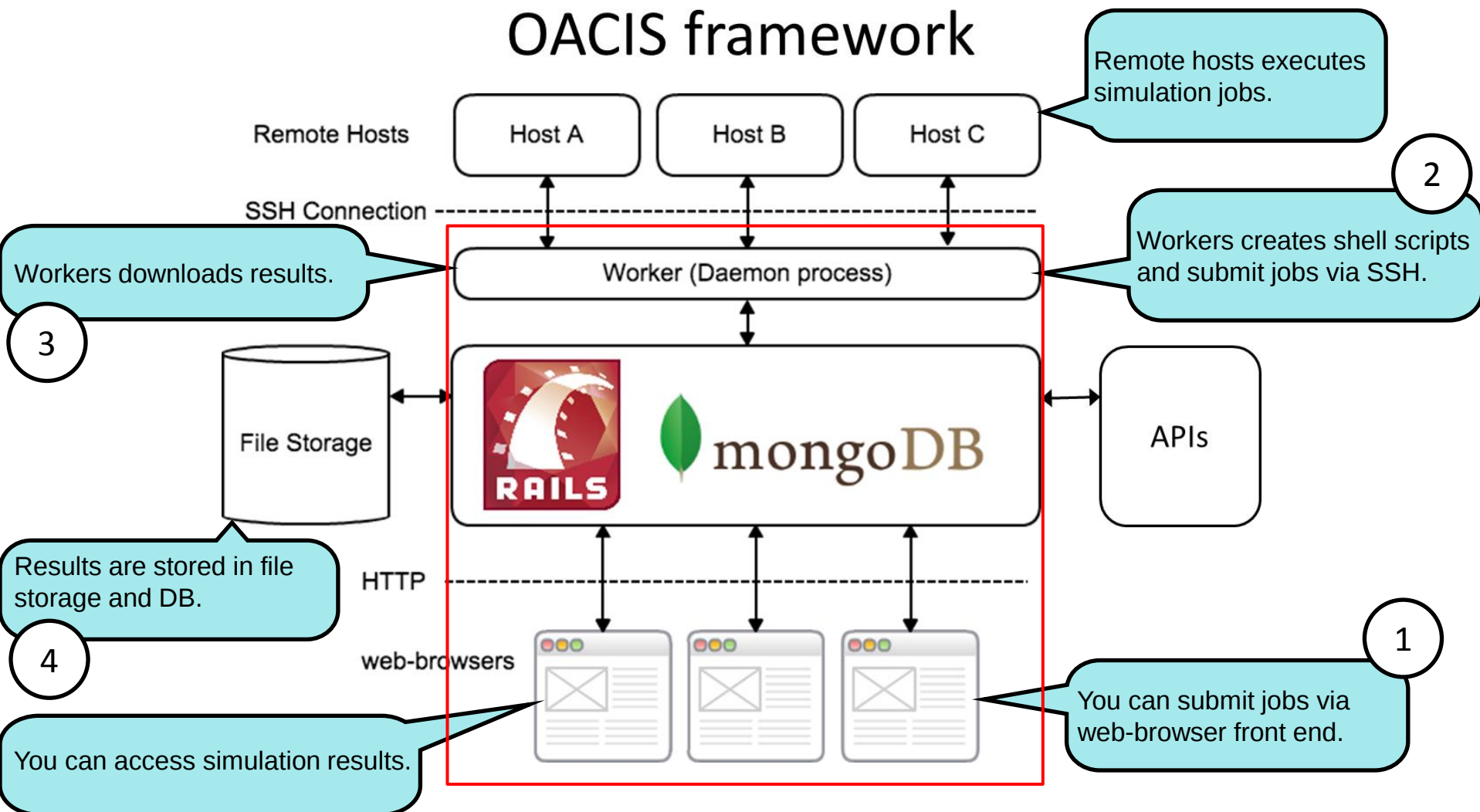


Mizuta, Izumi et al.

粉体分子動力学シミュレーション

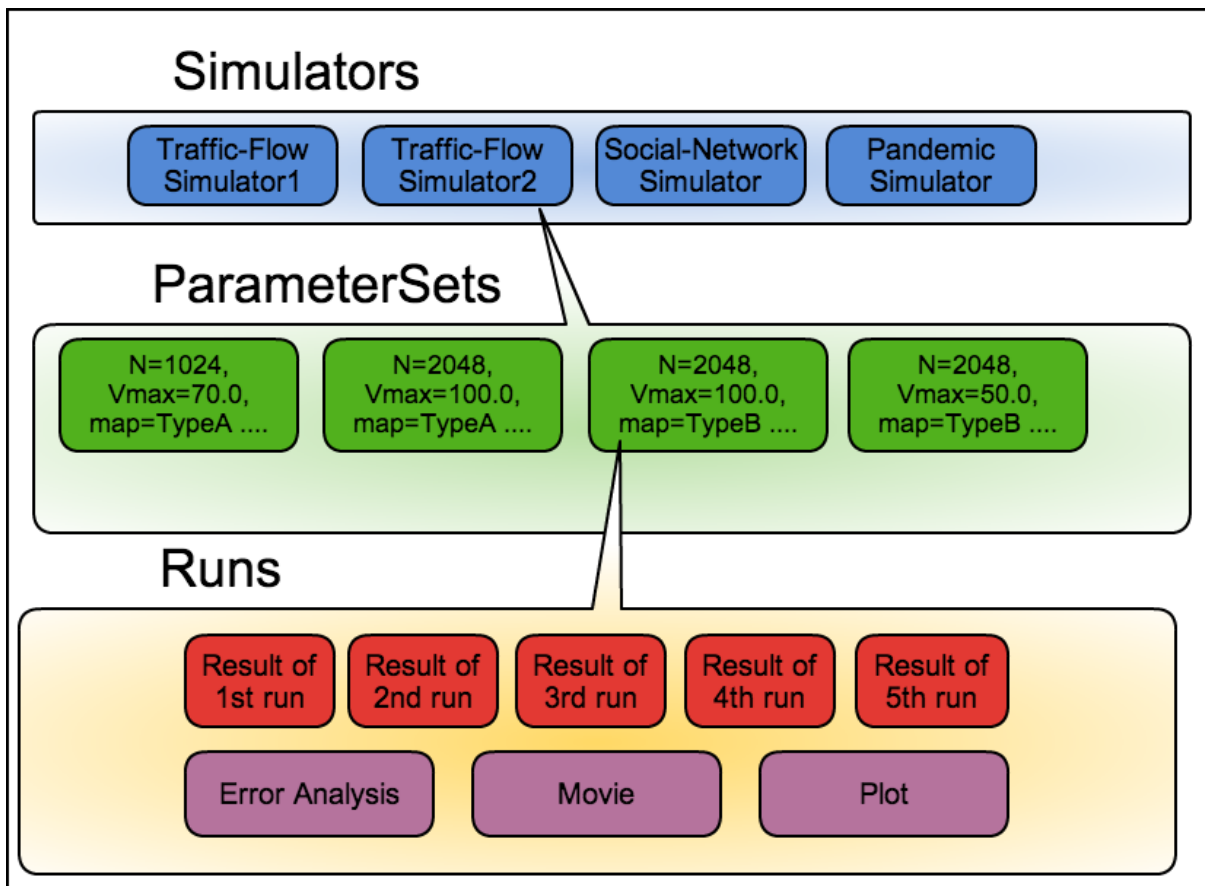


System Overview



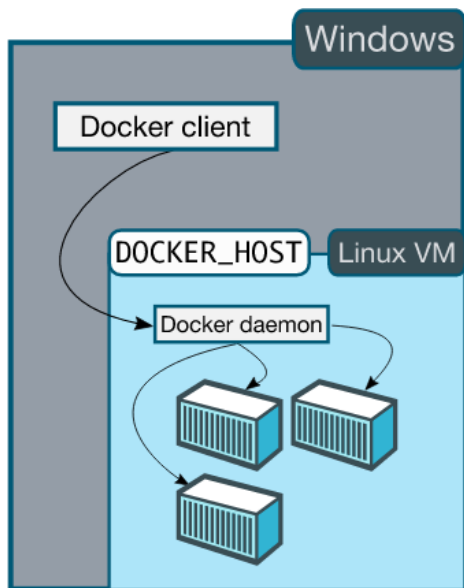
Data structure

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

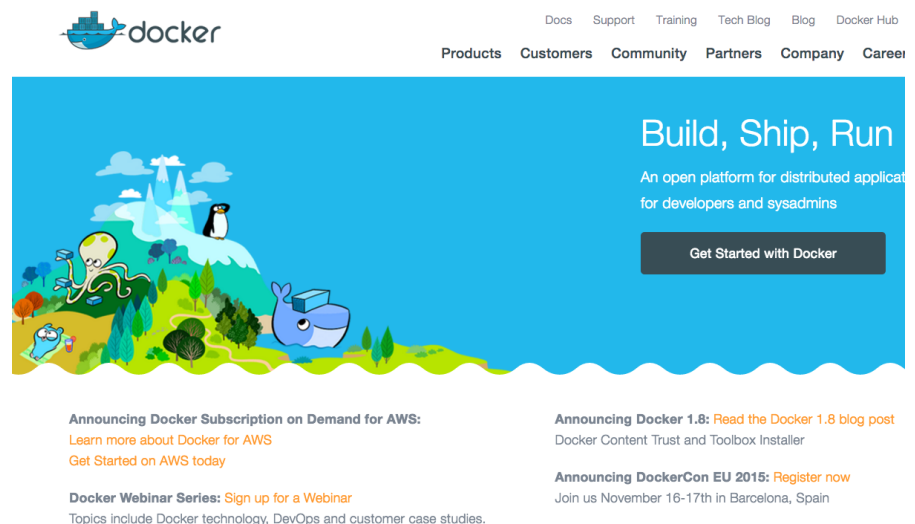


仮想環境について

- 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/>

参考文献

- OACIS: MITライセンスなので自由に使ってもらって構わないですが、もし研究発表をした場合には謝辞にOACISを利用したことを加えてもらえると幸いです。

[1] Y. Murase, T. Uchitane and N. Ito, “A tool for parameter-space explorations”, Physics Procedia, 57, p73–76 (2014)

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. イメージのダウンロードとOACIS実行

- dockerコマンドの実行

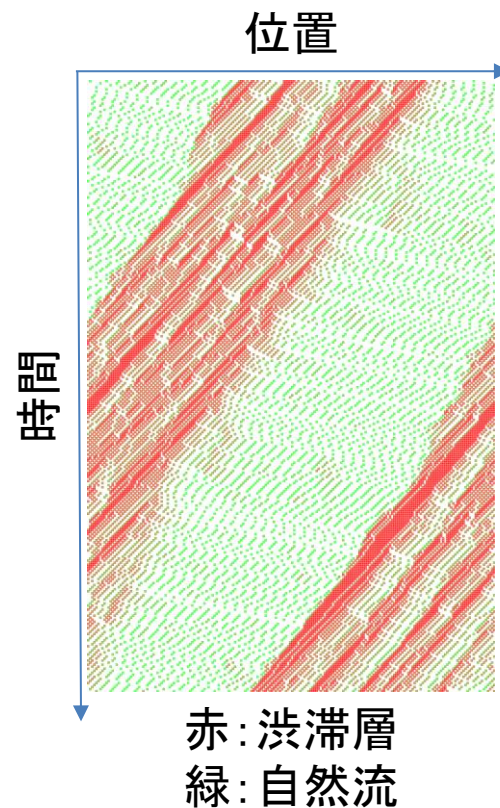
- OACIS起動確認

- インターネット接続の確認

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
}
```



OACIS起動

- Docker Quickstart Terminalの実行
- OACISの起動

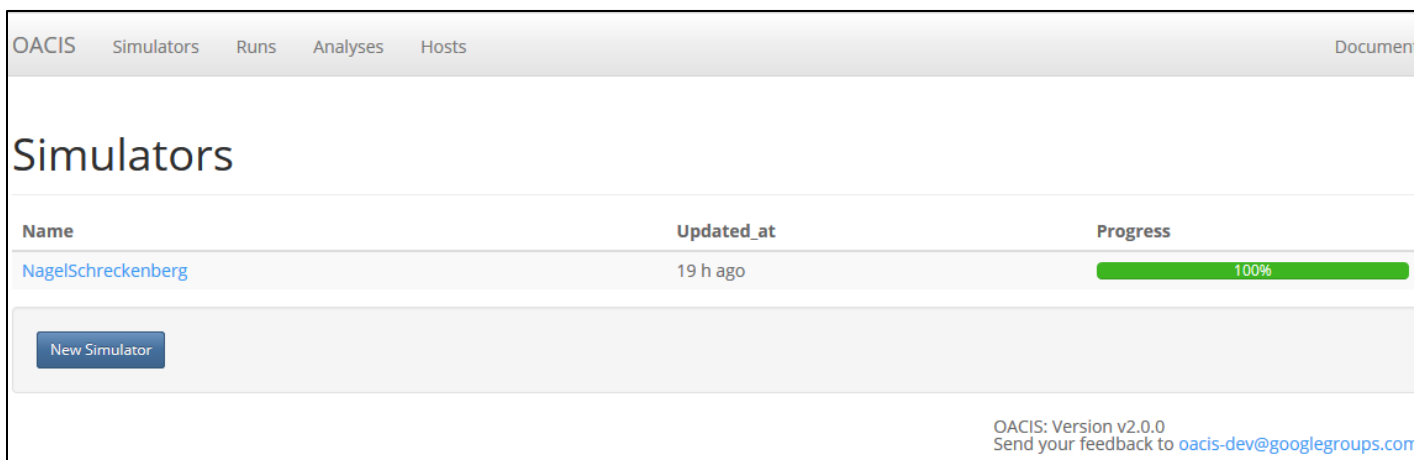


```
docker start oacis
```

(講習会準備が完了していない場合は下記コマンド)

```
docker run --name oacis -p 3000:3000 -dt -e OACIS_TUTORIAL=oacis_tutorial_NS oacis/oacis
```

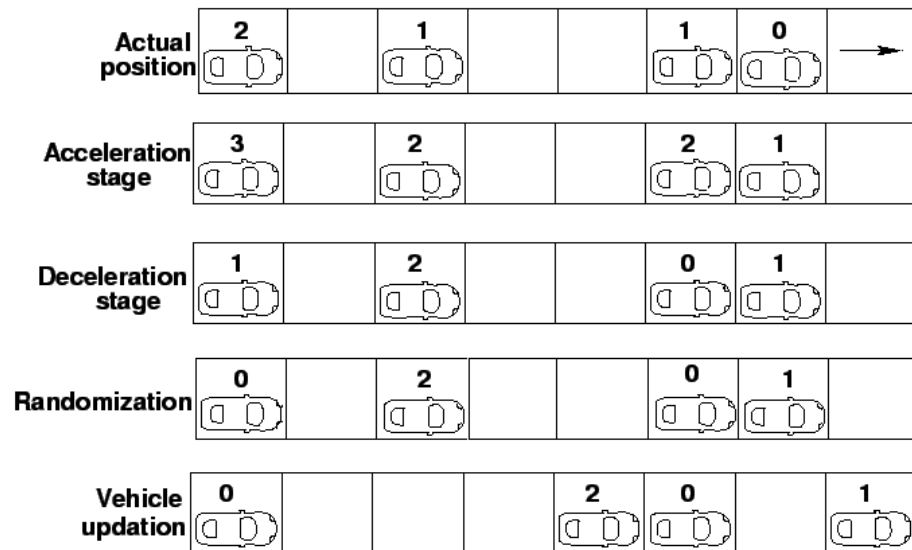
- OACIS web インターフェースの確認
 - <http://192.168.99.100:3000> へアクセス



OACIS web インターフェース

Nagel-Schreckenberg model

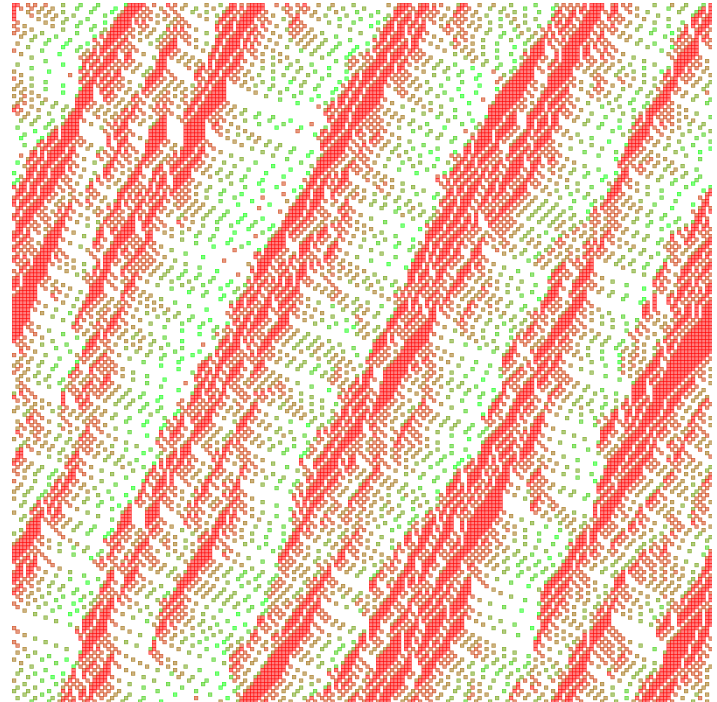
- Nagel-Schreckenbergは1990年代に提案された交通流モデル
- 単純なセルラーオートマトンでありながら自然渋滞を再現
- 詳細は[Wikipedia] (https://en.wikipedia.org/wiki/Nagel%E2%80%93Schreckenberg_model) を参照



http://www.civil.iitb.ac.in/tvm/1111_nptel/544_TrCA/plain/plain.html

Key	Description
l	Road length
v	Maximum velocity
ρ	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
- 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



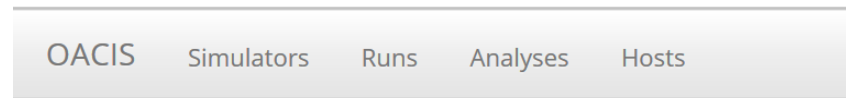
Simulator選択

• 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

Name

[NagelSchreckenberg](#)

クリック

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
- 単純なセルオートマトンでありながら自然の渋滞を再現した
- 詳細はWikipediaを参照

Duplicate Edit Destroy

About

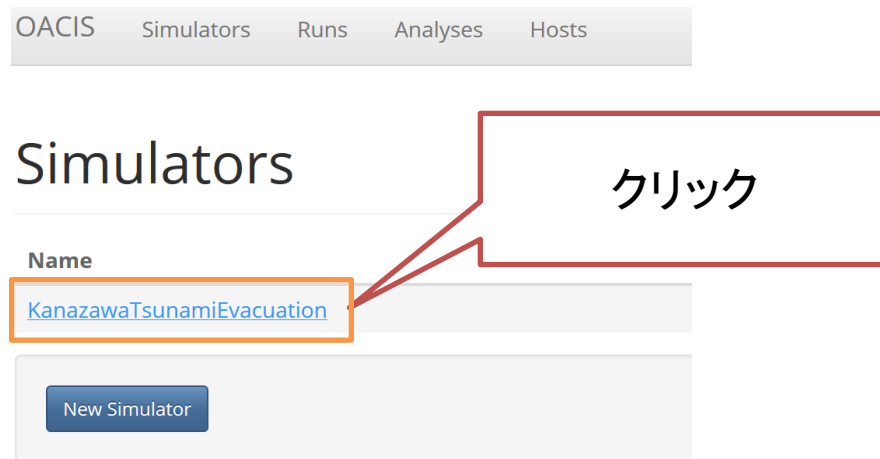
Parameter Input Type	Arguments
Support MPI	No
Support OMP	No
Executable On	localhost

Defined Parameters

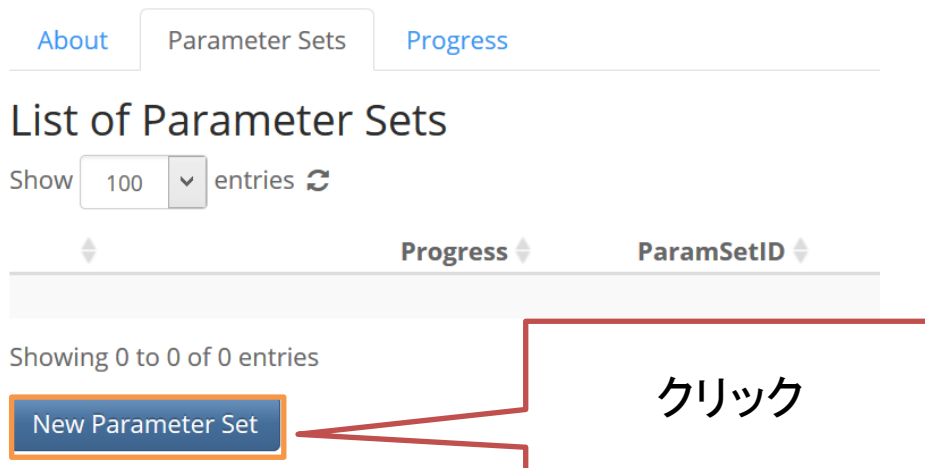
	Type	Default	Description
l	Integer	200	road length
v	Integer	5	maximum velocity
rho	Float	0.3	car density
p	Float	0.1	deceleration probability(0.0, 1.0)
t_init	Integer	1000	thermalization steps
t_measuer	Integer	300	measurment steps

ParameterSetとRun作成

- 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

l (Integer)	200	road length
v (Integer)	1,2,3,4,5	maximum velocity
rho (Float)	0.1,0.2,0.3,0.4,0.5,0.6,0.7,0.8,0.9	car density
p (Float)	0.1	deceleration probability[0.0, 1.0]
t_init (Integer)	1000	thermalization steps
t_measurer (Integer)	300	measurment steps
Target # of Runs	1	
Submitted to	localhost	
Priorities of Runs	normal	
	Create Cancel	

① 値を指定

② 1を選択

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

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	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	

指定した値はDBに登録

Runの実行状況は
プログレスバー表示

ParameterSetとRun作成

OACIS

Simulators

Runs

Analyses

Hosts

Document

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	100%	faad2a	< 1 min. ago	200	5	0.2	0.1	1000	300	
Q	100%	faad29	< 1 min. ago	200	5	0.1	0.1	1000	300	
Q	100%	faad26	< 1 min. ago	200	4	0.7	0.1	1000	300	
Q	100%	faad25	< 1 min. ago	200	4	0.6	0.1	1000	300	
Q	100%	faad28	< 1 min. ago	200	4	0.9	0.1	1000	300	
Q	100%	faad27	1 min. ago	200	4	0.8	0.1	1000	300	
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	

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	100%	faad2a	< 1 min.	200	5	0.2	0.1	1000	300	
Q	100%	faad29	1 min. ago	200	5	0.1	0.1	1000	300	
Q	100%	faad26	< 1 min. ago	200	4	0.7	0.1	1000	300	
Q	100%	faad25	< 1 min. ago	200	4	0.6	0.1	1000	300	
Q	100%	faad28	< 1 min. ago	200	4	0.9	0.1	1000	300	
Q	100%	faad27	1 min. ago	200	4	0.8	0.1	1000	300	
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	

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 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

クリック

ParameterSetのページ

パラメータ値の表示

ParameterSetに紐づいたRunの一覧

結果確認

OACIS Simulators Runs Analyses Hosts Document

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

Runのページ

Run

(l=200, v=4, rho=0.7, p=0.1, t_init=1000, t_measuer=300)

/home/oacis/oacis/public/Result_development/561cdf093135350450000000/561dfaad356339008d260000/561dfaad356339008d530000

[About](#)

[Results and Analyses](#)

_output.jsonの内容は
DBに保存される

Results

velocity	0.2582833333333336
flow	0.18079833333333317

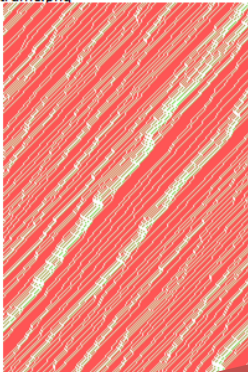
Output Files

/Result_development/561cdf093135350450000000/561dfaad356339008d260000/561dfaad356339008d530000/

- ☐ 561dfaad356339008d530000_xsub.sh
- ☐ _output.json
- ☐ _status.json
- ☐ _stderr.bt
- ☐ _stdout.bt
- ☐ _time.bt
- ☐ initial_time_series.dat
- ☐ traffic.png

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

[Download Archive](#)

結果確認

OACIS Simulators Runs Analyses Hosts Document

[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_measuer=300)

/home/oacis/oacis/public/Result_development/561cdf093135350450000000/561dfaad356339008d260000/561dfaad356339008d530000

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

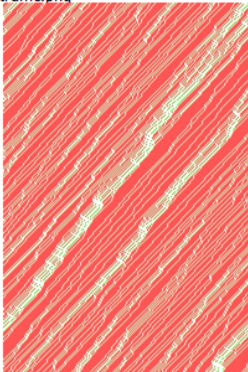
Results

velocity	0.25828333333333336
flow	0.18079833333333317

Output Files

/Result_development/561cdf093135350450000000/561dfaad356339008d260000/561dfaad356339008d530000/

- ☐ 561dfaad356339008d530000_xsub.sh
- ☐ _output.json
- ☐ _status.json
- ☐ _stderr.txt
- ☐ _stdout.txt
- ☐ _time.txt
- ☐ initial_time_series.dat
- ☐ traffic.png



[Download Archive](#)

結果ファイルは一意的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

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

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

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 ($l=200$, $v=2$, $\rho=0.05$, $p=0.1$, $t_{\text{init}}=100$, $t_{\text{measure}}=300$)

Plot type line plot

X-Axis rho

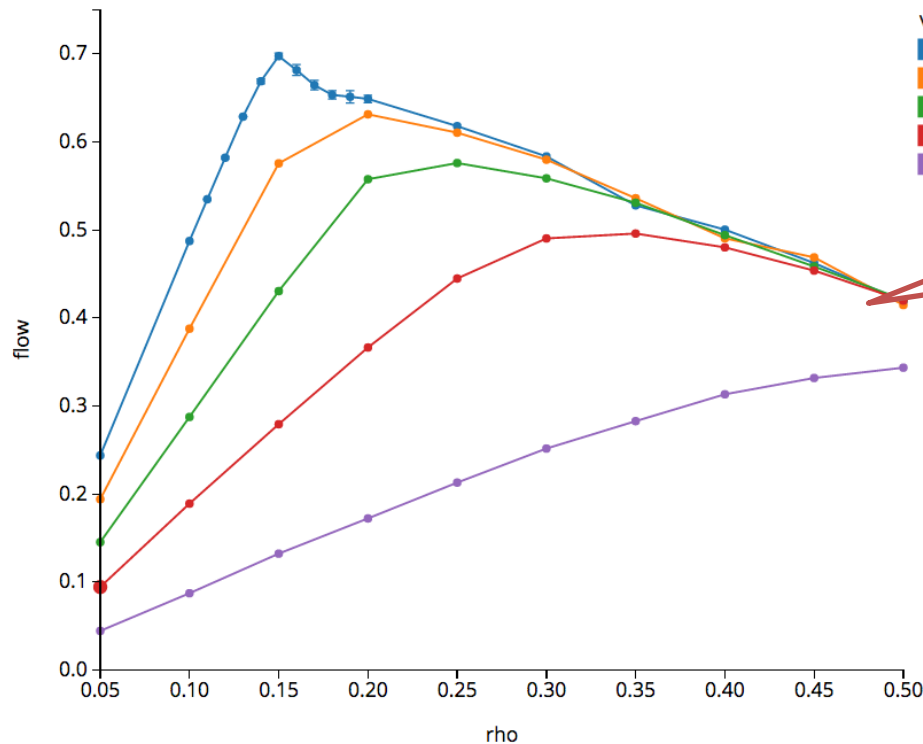
Y-Axis .flow

Series v

Add Line Plot

Irrelevant parameters:

☐ l ☐ v ☐ rho ☐ p ☐ t_{init} ☐ t_{measure}



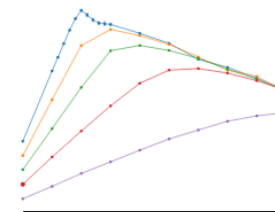
line plotを選択

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

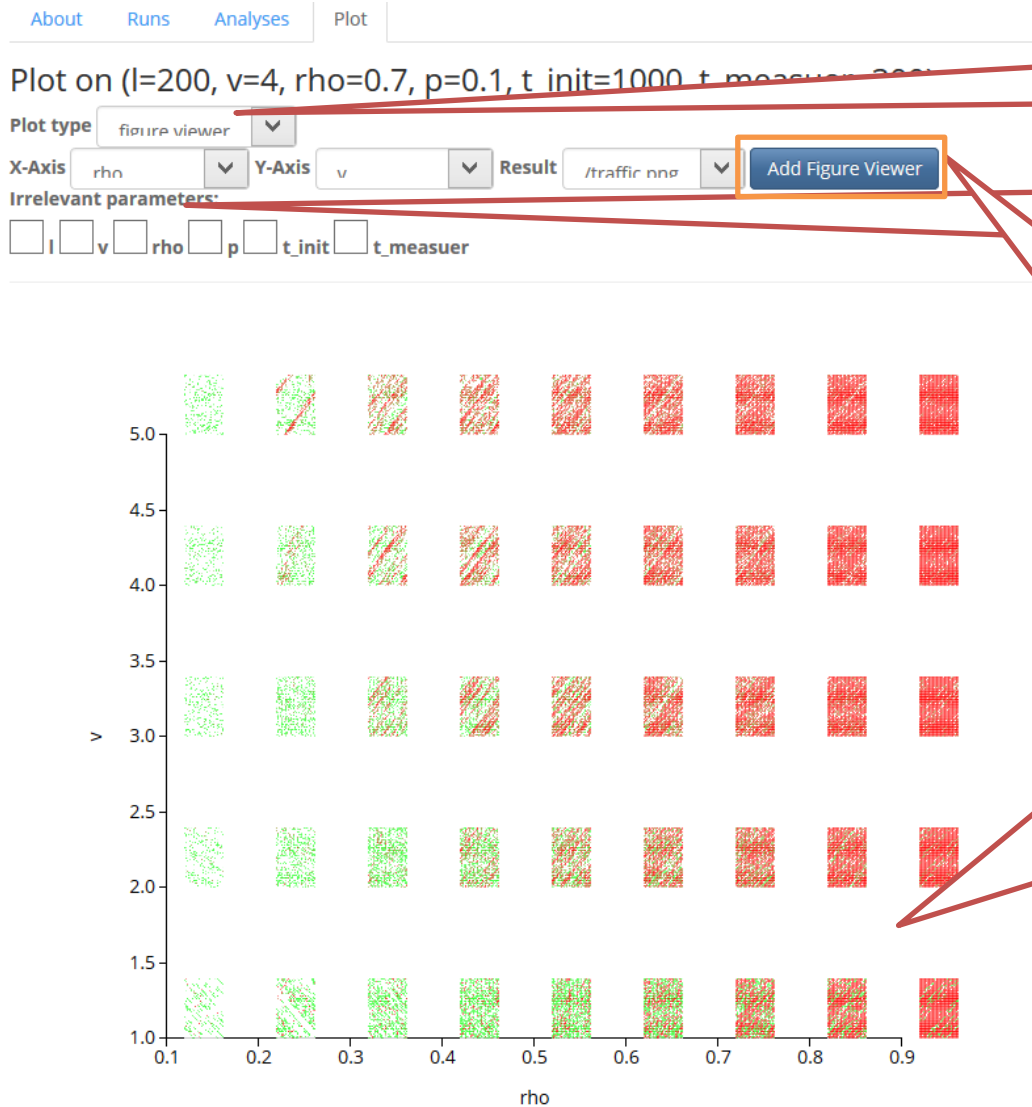


figure viewerを選択

X-Axis: ρ
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**

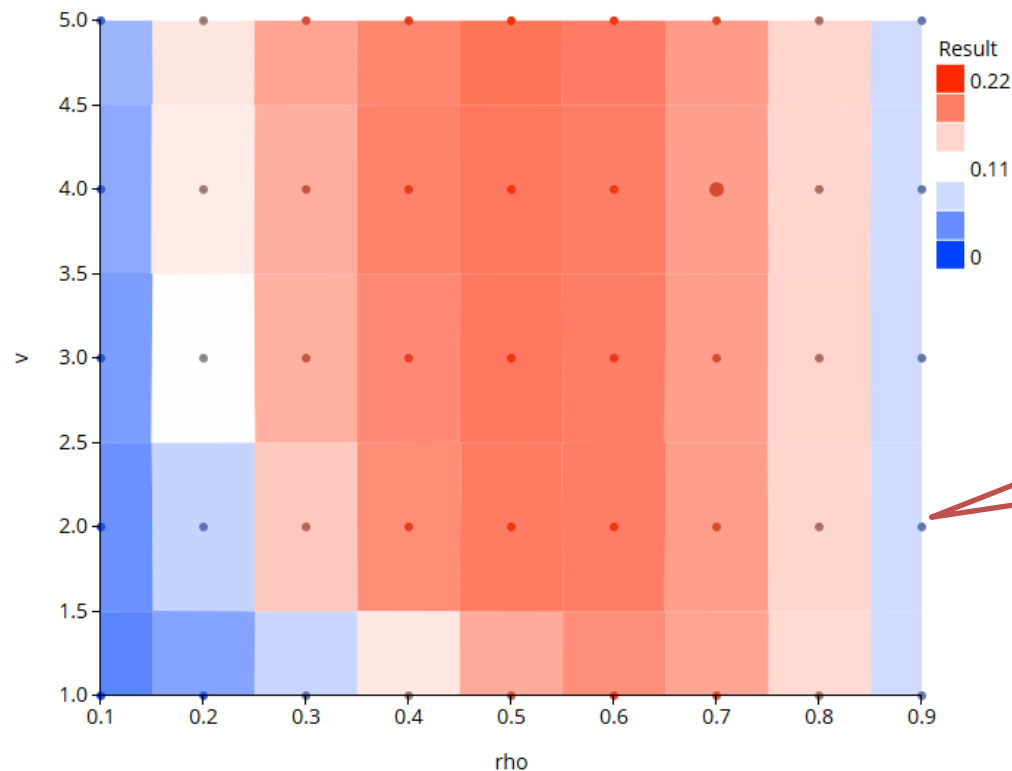
Plot on (l=200, v=4, rho=0.7, p=0.1, t_init=1000, t_measuer=300)

Plot type **scatter plot**

X-Axis **rho** Y-Axis **v** Result **flow** **Add Scatter Plot**

Irrelevant parameters:

☐ l ☐ v ☐ rho ☐ p ☐ t_init ☐ t_measuer

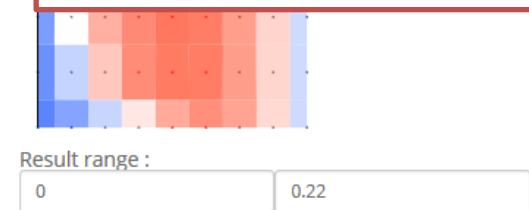


scatter plotを選択

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



結果確認

About Runs Analyses **Plot**

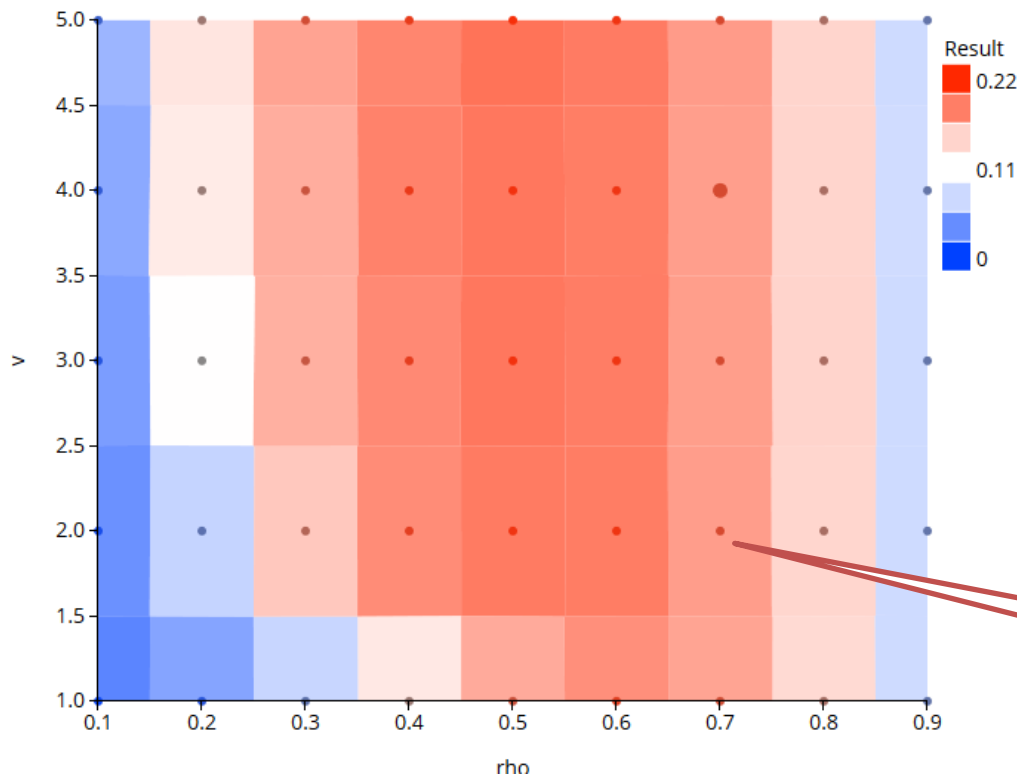
Plot on ($l=200, v=4, \rho=0.7, p=0.1, t_{\text{init}}=1000, t_{\text{measuer}}=300$)

Plot type scatter plot

X-Axis ρ Y-Axis v Result flow Add Scatter Plot

Irrelevant parameters:

☐ l ☐ v ☐ ρ ☐ p ☐ t_{init} ☐ t_{measuer}



PlotにURLがつく
(ノートにURLをはる)

X-Axis ρ

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_cli`コマンドを実行(コンテナ内で作業)

OACIS停止

- Docker Quickstart Terminalの実行
– OACIS停止



```
docker stop oacis
```

– OACIS再実行

```
docker start oacis
```

– コンテナ (仮想環境) へログイン

```
# root
docker exec -it oacis bash
# user
docker exec -it oacis bash -c 'su - oacis; cd /home/oacis/oacis; exec "bash && exit"'
```

– コンテナ削除

```
docker stop oacis; docker rm oacis
```

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: simulator, analyzer, host登録方法の説明
とハンズオン