

Problem Solving Environment としての Cactus コード

(PSE = 科学者や技術者が複雑な知識の習得なしに簡単にコンピュータを使える環境)

理化学研究所 計算科学技術推進室

(基礎科学特別研究員) 真貝寿明

hshinkai@postman.riken.go.jp

<http://atlas.riken.go.jp/shinkai/>

Cactus コード開発の背景 (一般相対性理論の数値シミュレーション)

Cactus コードの特長・現状

Grid Computing への応用への試み (伝聞形)



www.CactusCode.org



Cactus コードとは

<http://www.cactuscode.org/Documentation/Introduction.html>

巨大数値シミュレーションを行う際に，並列計算環境を提供するツール

<http://www.cactuscode.org/>より，無料でダウンロードできる

開発者 ドイツ・アインシュタイン研究所の数値相対論グループ

開発開始 (1997) から 5 年余りを経て，大枠はほぼ固定

日本語版の解説ページ

<http://superdry.s.kanazawa-u.ac.jp/~ohashi/contents/research/cactus/>
金沢大田子研究室の大橋氏による紹介ページ．小橋氏の後を引き継いだそうだ．

<http://atlas.riken.go.jp/~shinkai/cactus/cactuscode.html>

私のページ



Cactus User Community

Using and Developing Physics Thorns

Numerical Relativity

AEI

Southampton

Wash U

RIKEN

Goddard

Penn State

Thessaloniki

Tuebingen

TAC

SISSA

Portsmouth

EU Astrophysics
Network

NASA Neutron Star
Grand Challenge

Many others
who mail us at
cactusmaint

Other Applications

Chemical Engineering
(U.Kansas)

Climate Modeling
(NASA,+)

Bio-Informatics
(Canada)

Geophysics
(Stanford)

Early Universe
(LBL)

Plasma Physics
(Princeton)

Astrophysics
(Zeus)

Cactus コード開発の背景

= 数値相対論 (Numerical Relativity)

= 一般相対性理論における数値シミュレーション

強い重力場の解明に必須

重力波の放出メカニズム (ブラックホール, 中性子星, 超新星爆発, . . .)

相対論的動力学の解明 (宇宙論, 銀河中心核, . . .)

数学的問題への傍証 (特異点形成, 厳密解, カオス現象, . . .)

重力理論の検証と実験 (拡張された一般相対論, 高次元時空モデル, . . .)

何が難しいのか

Einstein 方程式は 10 本の非線形偏微分方程式 (4 楕円型, 6 双曲型)

時空の分解方法 (3+1 or 2+2) ・ 座標の選び方 ・ ゲージ条件の選び方, . . .

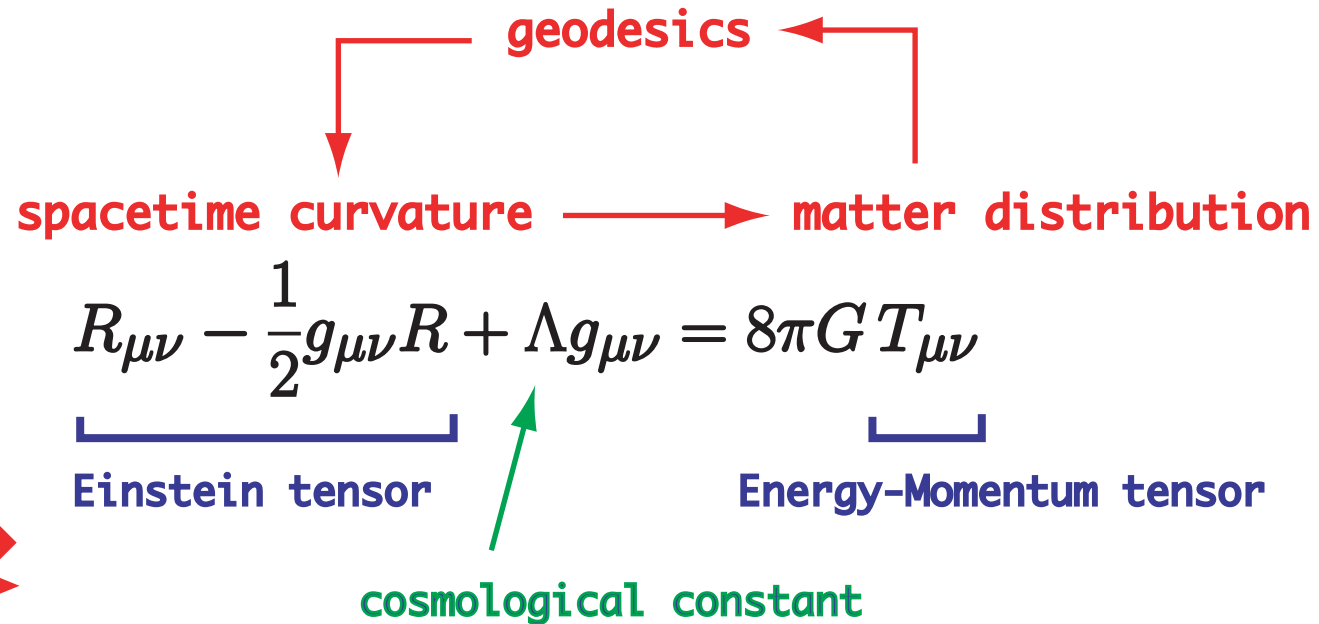
必然的に時空特異点が存在する

物理的に妥当な初期条件を得る方法が難しい

安定な時間発展が, なかなかできない

変数が多いので, 巨大計算が必要となる

The Einstein equation



Solve for metric
 $g_{\mu\nu}(t, x, y, z)$
 (10 components)

flat spacetime (Minkowskii spacetime):

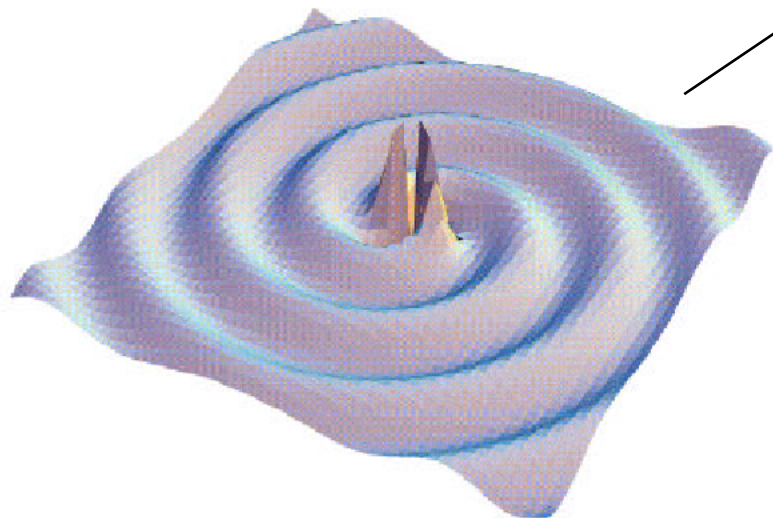
$$\begin{aligned}
 ds^2 &= -dt^2 + dx^2 + dy^2 + dz^2 \\
 &= -dt^2 + dr^2 + r^2(d\theta^2 + \sin^2\theta d\varphi^2)
 \end{aligned}$$

$$ds^2 = \sum_{\mu, \nu} g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu := g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu$$

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} g_{tt} & g_{tx} & g_{ty} & g_{tz} \\ & g_{xx} & g_{xy} & g_{xz} \\ & & g_{yy} & g_{yz} \\ \text{sym.} & & & g_{zz} \end{pmatrix}$$

重力波の直接観測プロジェクト

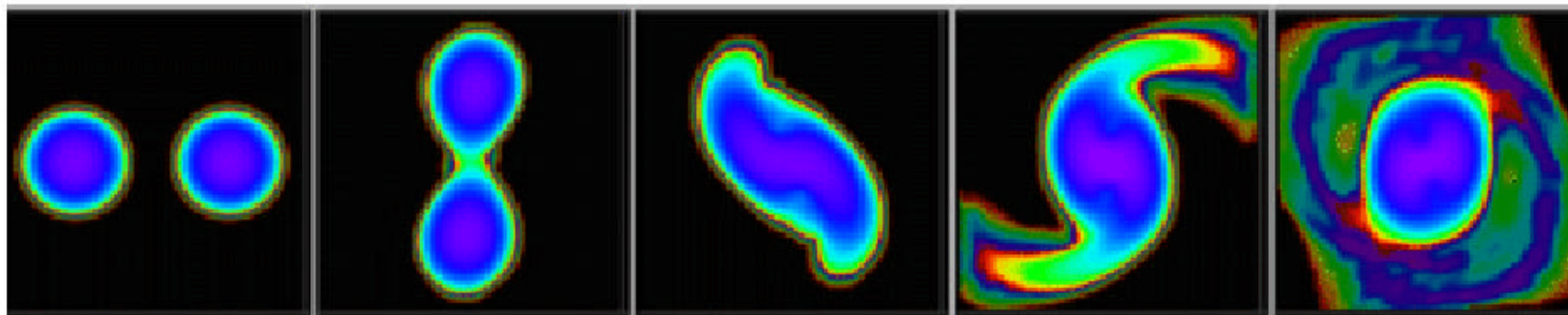
ブラックホールや中性子星の
合体によって生じる重力波



長基線レーザー干渉計

日本	300m	2000年-
アメリカ	4Km/2Km	2002年-
独・英	600m	2002年-
伊・仏	3Km	2003年-

- Neutron star – neutron star (Centrella et al.)





数値相対論の計算規模

- メモリ とりあえず45GB (もっともっと欲しい)
 - 171 Grid Functions
 - 400x400x200 grid
- 1ステップの計算量 グリッドあたり 6000 演算
典型的には3000ステップ時間発展 (本当はもっと)
 - 600 テラ演算
- アウトプット 一つの関数を1ステップ出すのに
 - 256 MB
 - (320 GB for 10 Grid Function every 50 time steps)
- 典型的な1回のシミュレーション
 - Need 10-50 hours

Requirements

並列化

最適化

並列・高速 I/O,
Data Management,
可視化

Checkpointing

Interactive
monitoring, steering,
visualization, portals

Cactus コードの特長 (1)

共同コード開発を意識した , モジュール構造

サボテン (cactus) = 幹 (flesh) + とげ (thorn)

Plug- In “Thorns” (modules)

ブラックホールの特定

状態方程式の設定

座標条件の設定

Core “Flesh”

初期値の設定

grid variables

make systems

scheduling

parameters

error handling

check pointing

重力波の評価

補間

境界条件

楕円型 solver

時間発展スキームの設定

時間発展方程式の設定



Modularity: "Plug-and-play" Executables

Computational Thorns

PUGH	PAGH
Carpet	HLL
CartGrid3D	Cartoon2D
Time	Boundary
EISOR	EIIBase
IOFlexIO	IOASCII
IOHDF5	IOJpeg
IOUtil	IOBasic
HTTPD	HTTPDExtra

Numerical Relativity Thorns

ADMConstraint	IDAxBrillBH
PsiKadelia	Zorro
AHFinder	Extract
Maximal	ADM
SimpleExcision	ADM_BSSN
FishEye	ConfHyp
IDAnalyticBH	BAM_Elliptic
LegoExcision	IDLinearWaves
TGRPETS	IDBrillWaves

Cactus コードの特長 (2)

大規模計算に必要なツールを提供

Cactus_Computational_Tool_Kit (CCTK)

並列化コマンド (MPI++) , parallel I/O , data distribution , checkpointing, ...

```
C          int myproc = CCTK_MyProc( const cGH * cctkGH)
Fortran    myproc = CCTK_MyProc( cctkGH )
```

```
C          int istat = CCTK_SyncGroup( cGH * cctkGH, const char * group)
Fortran    call CCTK_SyncGroup( istat, cctkGH, group )
```

Cactus コードの特長 (3)

研究目的で開発されたソフトウェアの取り込み可

Globus Metacomputing ツールキット

並列ファイル I/O (HDF5, FlexIO, ...)

科学計算ライブラリ (PETSc, ...)

Web インターフェイス

可視化ツール (OpenDX, Amira, Panda, GrAce, LCAVision ...)

Cactus コードの特長 (4)

プログラマを , コンパイラや機種に依存した最適化作業から開放

ラップトップからスーパーコンピュータまで即日

Fortran 77/90, C/C++ at Linux, Unix, Mac OSX, ...

サポートしているアーキテクチャ 2003年1月現在

<http://www.cactuscode.org/Documentation/Architectures.html>

Intel IA32/IA64 Linux with Absoft/GNU/Intel/... Fortran

Intel IA32 Windows2000/NT

SGI 32/64 bit IRIX

Sun Sparc Solaris

Compaq Alpha Linux

Compaq Alpha OSF

IBM SP

Cray T3E

Hitachi SR8000-F1

MacOS X with Absoft Fortran

Fujitsu

OpenBSD



Cactus Development



[Welcome](#)

[Community](#)

[Documentation](#)

[Download](#)

[Machines](#)

Development

[Projects](#)

[For Developers](#)

[Dev Plans](#)

[Bug Tracking](#)

[Feature Requests](#)

[Mailing Lists](#)

[Viz Tools](#)

[Showcase](#)

[Links](#)

Fujitsu

Status

Cactus runs on the Fujitsu VPP700, and from Beta 12 on the Fujitsu VPP300 and VPP5000. These machines have native MPI. The default optimisation flags haven't been thoroughly investigated, and we welcome suggestions for these.

Notes

1. There is no dependency checking available on the Fujitsu, this means that you need to clean and rebuild your Cactus configurations if you change any include files.
2. The Fujitsu CC compilers do not currently allow template instantiation with Cactus. (The object file names are required to have a .o extension instead of the .C.o extension needed by Cactus). The only generally released thorn this affects is CactusPUGHIO/IOFlexIO, and instead of this it is recommended to use CactusPUGHIO/IOHDF5.

Cactus コードの特長 (5)

メンテナンス担当者 , 数人あり

cactusmaint@cactuscode.org (翌日にはリプライあり . ただし英語)
または users@cactuscode.org (ただし英語)

解説書あり

<http://www.cactuscode.org/Documentation.html>
(pdf 版で 300 ページ . ただし英語)

グリッドを含め , コード汎用化に意欲的

<http://www.cactuscode.org/Development/ComputerScience.html>

EGrid Applications and Testbeds Working Group

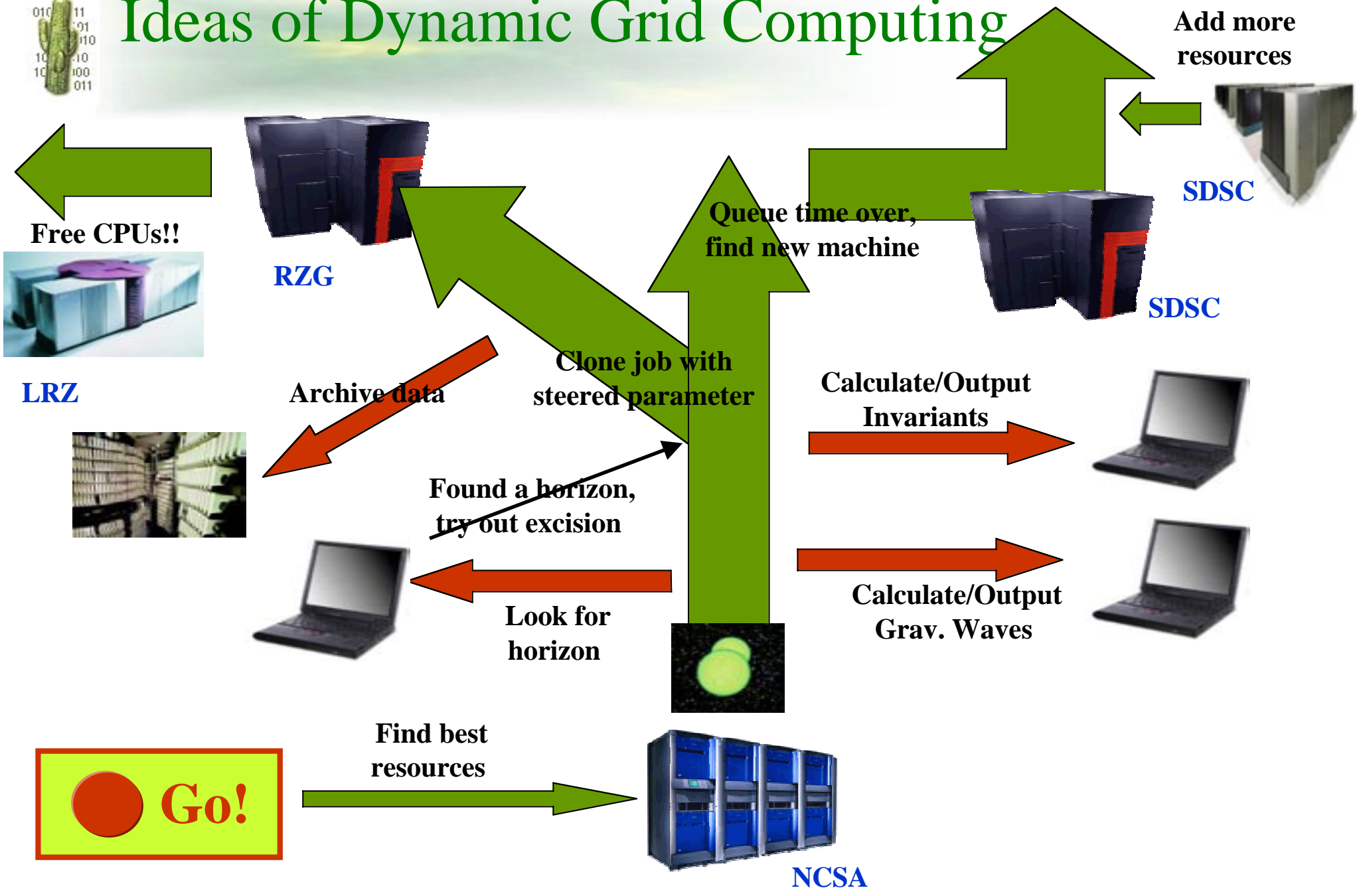
The European Grid Forum (E-Grid) is using Cactus as an application for developing Europe-wide capabilities for accessible and routine distributed computing.

Grid Adaptive Development Systems

The Grid Adaptive Development Systems project in the USA is building protocols and capabilities for using the newly emerging global "Grid".



Ideas of Dynamic Grid Computing





Users View

The image displays a collage of screenshots from the Cactus Jobs web application and related tools. The primary screenshot is the 'Asc Cactus Job Profiles' interface in Netscape, showing a 'Cactus Job Editor' with fields for 'Job name' (Waveto), 'Application', and 'Parameter File'. It also includes a 'Main Menu' with options like Home, Logout, and My Profile, and a 'Resource selection' list containing domains like harpo.wustl.edu and modit.ncsa.uiuc.edu. Other screenshots show the 'www.CactusCode.org' homepage with a 'SGE User Conference Run' announcement, a 'Voyager' interface with a table of job profiles, and a visualization tool displaying a 3D heatmap of a sphere.

Profile Name	Description	View
Waveto	Step of Wave	[View]
Waveto	Step of Wave	[View]
Waveto	Step of Wave	[View]

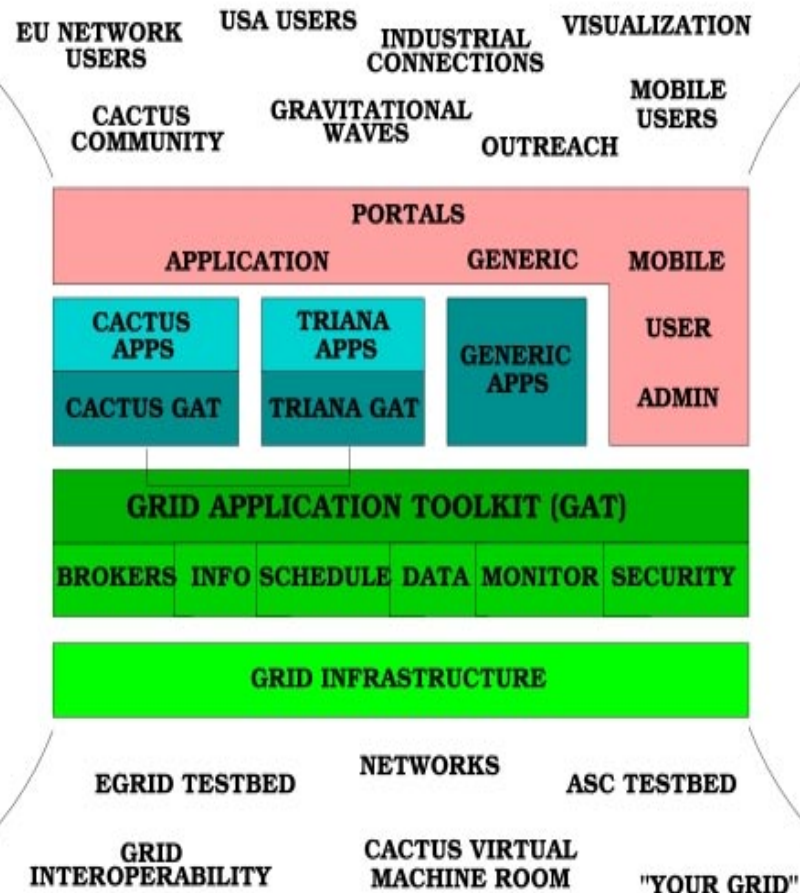


GridLab:

Enabling Dynamic Grid Applications

www.gridlab.org

- EU Project (under final negotiation with EC)
- AEI, ZIB, PSNC, Lecce, Athens, Cardiff, Amsterdam, SZTAKI, Brno, ISI, Argonne, Wisconsin, Sun, Compaq
- Grid Application Toolkit for application developers and infrastructure (APIs/Tools)
- Develop new grid scenarios for 2 main apps:
 - Numerical relativity
 - Grav wave data analysis



おまけ 1 Cactus コード お試し手順

動作環境の確保

<http://www.cactuscode.org/Documentation/Architectures.html>

<http://www.cactuscode.org/Guides/Stable/UsersGuide/UsersGuideHTML/node4.html>

Perl/GNUMake/C/CPP (and F90 or C++)

「WaveToy」お試しセット

<http://www.cactuscode.org/Documentation/WaveToyDemo.html>

Cactus の開発者が提供している「波の伝播デモ」
(flesh+波動方程式, 相対論部分は含まない)

コンパイルの実行の手順

<http://atlas.riken.go.jp/shinkai/cactus/cactuscode.html>

```
gmake waveXXX-config @ Cactus/  
gmake waveXXX-thornlist  
./cactus_waveXXX_wavetoyc_flat.par @ Cactus/exe/
```

```
gmake waveYYY-config MPI=yes  
gmake waveYYY-thornlist  
mpi run -np 4 cactus_waveYYY_wavetoyc_flat.par
```

おまけ 2

Cactus プログラムファイルの実際

```
#include "cctk.h"
#include "cctk_Arguments.h"
#include "cctk_DefineThorn.h"
#include "cctk_Parameters.h"
!
  subroutine gr_initial (CCTK_ARGUMENTS)
  implicit none
  DECLARE_CCTK_ARGUMENTS
  DECLARE_CCTK_PARAMETERS
  DECLARE_CCTK_FUNCTIONS
  CCTK_REAL one, zero
  integer i, j, k
!
  one =1.0d0
  zero=0.0d0
```

CPP コマンドを使うことにより，コンパイル時に，option に応じた変数名や，選択された thorn に応じた変数が自動的に書き込まれたプログラムファイルに変換される．

```
DECLARE_CCTK_ARGUMENTS
CCTK_REAL dx, dy, dz, dt
integer i, j, k

dx = CCTK_DELTA_SPACE(1)
dy = CCTK_DELTA_SPACE(2)
dz = CCTK_DELTA_SPACE(3)
dt = CCTK_DELTA_TIME

do k = 1+cctk_nghostzones(3), cctk_lsh(3)-cctk_nghostzones(3)
do j = 1+cctk_nghostzones(2), cctk_lsh(2)-cctk_nghostzones(2)
do i = 1+cctk_nghostzones(1), cctk_lsh(1)-cctk_nghostzones(1)
  alpha(i, j, k)=1.0

end do
end do
end do
```