

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

**«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ Н. Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»**

Кафедра информатики и программирования

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НА
ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ ГРАВИТАЦИОННОЙ
ЗАДАЧИ N ТЕЛ**

АВТОРЕФЕРАТ МАГИСТЕРСКОЙ РАБОТЫ

студентки 2 курса 271 группы
направления 09.04.01 — Информатика и вычислительная техника
факультета КНиИТ
Каримовой Ренаты Фаридовны

Научный руководитель
доцент, к. ф.-м. н.

К. П. Савина

Заведующий кафедрой
доцент, к. ф.-м. н.

М. В. Огнева

Саратов 2020

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы. Задача взаимодействия N тел встречается как в области астрономии, так и в области молекулярной динамики, также она применяется для описания поведения нанообъектов. Например, решение задачи взаимодействия N тел в создаваемом ими гравитационном поле, необходимо при описании движения планет и галактик или их скоплений, а также для описания движения в сверхсильных гравитационных полях нейтронных звезд [1]. Задача N тел помимо небесной механики встречается во многих других областях, например, при изучении сворачивания белков численное решение задачи N тел используется для вычисления электростатических и Ван дер Ваальсовских сил. При большом количестве учитываемых тел, атомов, молекул, задача требует значительных вычислительных ресурсов, поэтому актуальным является ее решение методами, позволяющими сократить объем вычислений, и реализация таких методов на современных параллельных вычислительных системах.

Задача N тел впервые была рассмотрена Исааком Ньютоном. В пустоте находится N материальных точек, моделирующих небесные тела, взаимодействующие по закону тяготения. Заданы начальные положения и скорости точек. Требуется определить положения точек для всех последующих моментов времени [2]. Данная задача была сформулирована как общая математическая задача решения дифференциальных уравнений движения материальных точек.

Гравитационные силы, действующие между частицами в модели, как правило, имеют дальнедействующий характер [3]. Если количество частиц N , то количество взаимодействий между ними, которые необходимо учитывать, растет как $O(N^2)$. Это обуславливает высокую вычислительную сложность задачи. Помимо тривиального алгоритма взаимодействия, существуют различные приближенные схемы. В среднем они позволяют снизить сложность с $O(N^2)$ до $O(N \log N)$, однако имеют худшие показатели точности.

В связи с вышесказанным важно иметь возможность быстро находить решение данной задачи N тел. Одними из наиболее распространенных технологий для распараллеливания систем в настоящее время являются OpenMP и MPI. Они поддерживают работу с такими языками как C, C++, Java. Язык программирования Java является современным, простым в изучении объектно-ориентированным языком программирования, который применяется для реализации многих программных решений, существующих на сегодняшний день. Java поддерживает различные библиотеки для многопоточного программирования, в том числе технологии распараллеливания OpenMP и MPI, которые востребованы для решения целого ряда вычислительно-трудоемких задач.

Цель магистерской работы – реализация и анализ параллельных методов «всех пар», Барнса-Хата и Стёрмера-Верле решения задачи моделирования поведения N точечных масс, взаимодействующих по гравитационному закону.

Поставленная цель определила **следующие задачи**:

1. рассмотреть математическую постановку задачи расчета поведения системы N гравитирующих тел;
2. изучить алгоритмы «всех пар», Барнса-Хата и Стёрмера-Верле решения гравитационной задачи N тел;
3. освоить возможности языка Java для распараллеливания изученных алгоритмов и их визуализации;
4. реализовать последовательные и параллельные версии изученных алгоритмов на основе стандартных средств языка Java, технологий OpenMP и MPI;
5. провести анализ результатов запусков алгоритмов на различных вычислительных архитектурах.

Методологические основы компьютерного моделирования на высокопроизводительных вычислительных системах гравитационной задачи N тел представлены в работах Рой А. [1], Алексеев В. М. [2],

Крашенинников К. Г., Морозов А. Ю. [3], Антонов А. С. [4-5], Адинец А. В. [6], Боголепов Д. К., Турлапов В. Е. [8], Гергель В. П. [10].

Теоретическая и практическая значимость магистерской работы.

В ходе выполнения магистерской работы были решены все поставленные задачи, что позволило достигнуть заявленные цели – реализация приложения для работы на вычислительном кластере `mpi-m3.sgu.ru` и процессоре Intel Core i5-4300U, его тестирование и моделирование на реализованных алгоритмах «всех пар», Барнса-Хата, Стёрмера-Верле решения задачи взаимодействия N гравитирующих тел.

Несомненным достоинством данной работы является то, что она позволяет использовать разработанные алгоритмы в ходе последующего обучения студентов технологиям OpenMP и MPI для языка Java в рамках курса по параллельному и распределенному программированию. Данный проект не имеет некоммерческих аналогов, программный код которого является открытым программным обеспечением в данный момент. Реализованные алгоритмы «всех пар», Барнса-Хата, Стёрмера-Верле для взаимодействия N гравитирующих тел достаточно просты для изучения технологиям OpenMP и MPI, но в то же время наглядным образом демонстрируют их состоятельность с точки зрения вычислительной эффективности.

Структура и объем работы. Магистерская работа состоит из введения, 3 разделов, заключения, списка использованных источников и приложения. Общий объем работы – 59 страниц, из них 51 страница – основное содержание, включая 14 рисунков и 2 таблицы, цифровой носитель в качестве приложения, список использованных источников информации – 22 наименования.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Первый раздел «Задача N тел» посвящен описанию математической формулировки задачи моделирования динамики системы N точечных масс, взаимодействующих по закону тяготения Ньютона. Также в нем рассматриваются методы для решения гравитационной задачи N тел, описания и решения проблем, связанных с численными методами, а также описания алгоритмов для решения гравитационной задачи N тел. Раздел содержит несколько подразделов.

Подраздел «Постановка задачи N тел» включает в себя описание формул и характеристик данной задачи.

Подраздел «Метод Стёрмера-Верле» содержит описание алгоритма Стёрмера-Верле, схему его вычислений и основные свойства, присущие данному алгоритму.

Подраздел «Метод «всех пар»» содержит описание алгоритма, его вычислительной сложности, а также, в данном подразделе описаны основные проблемы, возникающие при использовании алгоритма «всех пар».

Подраздел «Метод Барнса-Хата» содержит описание алгоритма, его вычислительной сложности, а также в данном подразделе описаны основные проблемы, которые встречаются при распараллеливании алгоритма Барнса-Хата. В подразделе содержится описание процесса построения дерева Барнса-Хата и расчета сил, действующих на тела.

Второй раздел «Возможности языка Java» посвящен описанию библиотек для распараллеливания и моделирования с использованием языка программирования Java.

Подраздел «Язык программирования Java» посвящен истории создания и описанию ключевых особенностей языка Java.

Подраздел «Технология OpenMP» посвящен описанию открытого стандарта для распараллеливания программ OpenMP, в нем проведены описание основных директив технологии, также описаны ее ключевые моменты.

Подраздел «Технология OpenMP в Java» посвящен описанию технология `omp4j.Omp4j` – это OpenMP-подобный препроцессор для Java, который является простым и удобным в использовании. `Omp4j` – принимает на вход исходный код Java, и возвращает его. Данная технология предназначена для JDK 8-6. Также произведено описание команд для запуска `omp4j` программ, представлено описание директив, макросов и атрибутов в `omp4j`.

Подраздел «Технология MPI» посвящен описанию MPI (Message Passing Interface). MPI – одна из наиболее распространенных технологий программирования параллельных компьютеров с общей памятью. Основным способом взаимодействия параллельных процессов является передача сообщений (набор данных некоторого типа). MPI-программа – это множество параллельных взаимодействующих процессов. В данном разделе также представлены особенности программ, написанных с использованием MPI.

Подраздел «Библиотека MPI в Java» посвящен описанию FastMPJ. FastMPJ – это эффективная библиотека передачи сообщений в Java (MPJ) для высокопроизводительной поддержки в совместно используемой памяти и высокоскоростных кластерных сетях (например, InfiniBand). В данном разделе представлены основные команды для работы с данной библиотекой, также представлен синтаксис MPI подобных команд для языка Java.

Подраздел «Платформа JavaFX» содержит описание средства для моделирования программы на языке Java. JavaFX – это набор графических и мультимедийных пакетов, который позволяет разработчикам проектировать, создавать, тестировать, отлаживать и развертывать приложения с расширенными возможностями, которые работают согласованно на разных платформах. В данном разделе представлено описание модулей данной платформы и истории ее создания.

Третий раздел «Реализация алгоритмов решения задачи N тел на высокопроизводительных вычислительных системах» посвящен реализации решения гравитационной задачи N тел различными методами на

центральном и кластере «mpi.sgu.ru» и сравнении эффективности решения задачи для различных архитектур.

Раздел состоит из пяти подразделов.

Подраздел «Суперкомпьютер и его конфигурация» содержит подробное описание возможностей кластера СГУ и программ для работы с ним (PuTTY, WinSCP).

Вычислительный кластер СГУ состоит из 5 узлов, один из которых является головным (s9.cluster.sgu.ru), и четырех счетных узлов. Узлы кластера полностью однородные (как hardware, так и software).

Подраздел «Реализация алгоритма «всех пар»» содержит в себе описание реализации последовательной и параллельных версий алгоритма «всех пар» для решения гравитационной задачи N тел, а также описание реализации программы моделирования поведения системы тел.

Подраздел «Реализация алгоритма Стёрмера-Верле» содержит в себе описание реализации последовательной и параллельных версий алгоритма Стёрмера-Верле для решения гравитационной задачи N тел, а также описание реализации программы моделирования поведения системы тел.

Подраздел «Реализация алгоритма Барнса-Хата» содержит в себе описание реализации последовательной и параллельных версий алгоритма Барнса-Хата для решения гравитационной задачи N тел, а также описание реализации программы моделирования поведения системы тел.

Подраздел «Расчет поведения модельной системы тел» описываются входные данные для реализованных решений, проводятся эксперименты для сравнения эффективности трех реализованных методов, приводятся примеры работы приложений, реализующих три сравниваемых метода на языке Java с использованием технологий OpenMP и MPI и анализируются полученные результаты.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе было произведено математическое моделирование и численное решение гравитационной задачи N тел. Проведен анализ существующих алгоритмов решения, а именно: «всех пар», Барнса-Хата, Стёрмера-Верле. Были реализованы алгоритмы решения задачи N тел в последовательных и параллельных версиях с использованием языка Java и средств для распараллеливания OpenMp и MPI. Проведен анализ эффективности данных алгоритмов на процессоре Intel Core i5-4300U и на кластере факультета КНиИТ (mpi-m3.sgu.ru). Наилучшим временем выполнения среди параллельных вариантов программы показала технология MPI при запуске на кластере. В результате произведенных вычислений показано, что алгоритм Барнса-Хата имеет наименьшее время работы на кластере «mpi.sgu.ru» с применением технологии FastMPJ. При этом разница всех найденных решений не превышает 0,55%.

Отдельные части магистерской работы были представлены на конференциях:

Информационные технологии в образовании: Материалы XI Всероссийской (с международным участием) научно-практической конференции, тема статьи «Реализация решения задачи N тел и анализ эффективности разработанных решений» [11]. Также было принято участие в 10 научно-практической конференции, посвященной 110-летию саратовского государственного университета «Presenting Academic Achievements to the World».

СПИСОК ОСНОВНЫХ ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Рой А. Движение по орбитам. – Москва: Мир, 1981 – 544 с.
2. Алексеев В. М. Лекции по небесной механике. – Ижевск: Ред. Журнала «Регулярная и хаотическая механика», 1999 – 160 с.
3. Крашенинников К. Г., Морозов А. Ю. Численное моделирование гравитационной задачи N-тел на GPU с использованием технологии CUDA. Москва: Мир, 2016 – 16 с.
4. Антонов А. С. Введение в параллельные вычисления. – Москва: Мир, 2002 – 69 с.
5. Антонов А. С. Параллельное программирование с использованием технологии OpenMP – Издательство Московского Университета, 2009.
6. Адинец А. В. Анализ эффективности решения задачи N тел на различных вычислительных архитектурах [Электронный ресурс]. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/analiz-effektivnosti-resheniya-zadachi-n-tel-na-razlichnyh-vychislitelnyh-arhitekturah> (дата обращения 11.04.2020). Загл. с экр. Яз. рус.
7. Алгоритм Барнса-Хата [Электронный ресурс]. URL: <http://arborjs.org/docs/barnes-hut> (дата обращения 11.04.2020). Загл. с экр. Яз. рус.
8. Боголепов Д. К., Турлапов В. Е. Вычисления общего назначения на графических процессорах с использованием шейдерных языков [Электронный ресурс]. URL: <http://www.ict.edu.ru/vconf/files/11899.pdf>. (дата обращения 11.04.2020). Загл. с экр. Яз. рус.
9. Параллельные методы решения гравитационной задачи n тел [Электронный ресурс]. URL: http://edu.mmcs.sfedu.ru/pluginfile.php/5634/mod_resource/content/4/OMPMPIGravit2018.pdf (дата обращения 11.04.2020). Загл. с экр. Яз. рус.
10. Гергель В. П. Высокопроизводительные вычисления для многоядерных многопроцессорных систем [Электронный ресурс]. URL:

<http://www.unn.ru/pages/e-library/methodmaterial/2010/7.pdf>

(дата обращения 11.04.2020). Загл. с экр. Яз. рус.

11. Каримова Р. Ф., Вахлаева К. П. Реализация решения задачи N тел и анализ эффективности разработанных решений // Информационные технологии в образовании: Материалы XI Всероссийск. (с международным участием) научно-практ. конф. – М. Издательство Перо, 2019. С. 103-106.