

НЕКОТОРЫЕ АСПЕКТЫ ПРИМЕНЕНИЯ АРИФМЕТИЧЕСКИХ УСКОРИТЕЛЕЙ AMD В ПАК-МК ДЛЯ РАСЧЕТА ЭФФЕКТИВНОГО КОЭФФИЦИЕНТА РАЗМНОЖЕНИЯ НЕЙТРОНОВ

А. Г. Ломтев, А. С. Рыбкин, И. В. Семенов

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», г. Саров Нижегородской обл.

Описание программы ПАК-МК

Программно-аппаратный комплекс ПАК-МК (Программный комплекс расчета критических параметров методом Монте-Карло для вычислительных систем с арифметическими ускорителями. Свидетельство о регистрации № 2010617162 от 27.10.2010) [1] служит для расчета нейтронно-физических характеристик ядерных энергоустановок методом Монте-Карло, в т. ч. для определения эффективного коэффициента размножения нейтронов ($k_{эфф}$) активных зон (АЗ) ядерных реакторов, обоснования радиационной и ядерной безопасности транспортных упаковочных комплексов (ТУК) для перевозки и длительного хранения отработанного ядерного топлива АЭС.

Моделирование в программе происходит пакетами (ансамблями) частиц, каждый из которых состоит из определенного (заданного пользователем) числа траекторий N . Для хранения информации о пакете используется массив, в который записываются текущие фазовые параметры всех N частиц (геометрические координаты, энергия, направление полета и т. д.). Также для каждой траектории из пакета хранятся свои параметры генератора случайных чисел. Таким образом, моделирование всех траекторий может происходить одновременно и независимо друг от друга, что дает возможность ускорения работы программы с помощью арифметических ускорителей (АрУ).

Расчет $k_{эфф}$ выполняется методом Монте-Карло по поколениям нейтронов. Очередное поколение формируется после моделирования траекторий предыдущего поколения до первой точки деления. Во время моделирования производится снятие результатов с каждой траектории. Моделирование прекращается по достижении заданной точности $k_{эфф}$.

Для расчета $k_{эфф}$ используется одна оценка по пробегу и три оценки по столкновениям: по собственно столкновениям, делениям и поглощениям. Оптимальная оценка вычисляется на основе этих четырех оценок.

Структура программы

Основой ПАК-МК является программа СМК-У (СМК-У. Свидетельство о регистрации № 2010614638

от 14.07.2010) для универсального процессора (УП), применяемая для расчета критических параметров методом Монте-Карло. Характерной чертой параллельной реализации программы с использованием MPI является отсутствие межпроцессорных обменов во время счета пакета вследствие того, что счет каждого пакета задачи происходит в рамках одного MPI-процесса. Это позволяет применить стандартный подход для адаптации программы для АрУ – выделить ускоряемую счетную часть в рамках одного MPI-процесса.

При этом необходимо учитывать следующие аспекты:

- ускоряемая часть должна занимать большой процент общего времени выполнения для достижения приемлемого значения ускорения;

- алгоритм программы и структура данных должны подходить (с учетом возможной модификации) под специфическую структуру АрУ;

- необходимо учитывать и по возможности сокращать обмены данными между ОЗУ универсального процессора и ОЗУ АрУ.

Было решено адаптировать для вычислений на АрУ всю счетную часть программы в рамках отдельного MPI-процесса.

Структура программы СМК-У представлена на рис. 1,а, программы ПАК-МК – на рис. 1,б.

Программа СМК-У реализована на языке программирования Fortran. Изначально предполагалась адаптация программы для АрУ NVIDIA с использованием технологии NVIDIA CUDA и для АрУ AMD с использованием технологии OpenCL. Обе технологии позволяют использовать АрУ для вычислений. Они содержат функции API для работы с АрУ и в качестве средства программирования используют расширение языка C99 для параллельного программирования. Основное их отличие состоит в области применения. Программы, написанные с использованием CUDA, работают только на АрУ NVIDIA. OpenCL дает возможность задействовать как универсальный процессор, так и АрУ NVIDIA, и AMD.

Счетная часть ПАК-МК реализована в трех вариантах: с использованием C++, CUDA и OpenCL, которые используют единый вычислительный код, написанный на языке программирования Си. Для проведения расчетов предусмотрена возможность выбора любой из реализаций, в т. ч. первоначальной на Fortran. Структура программы ПАК-МК показана на рис. 2.

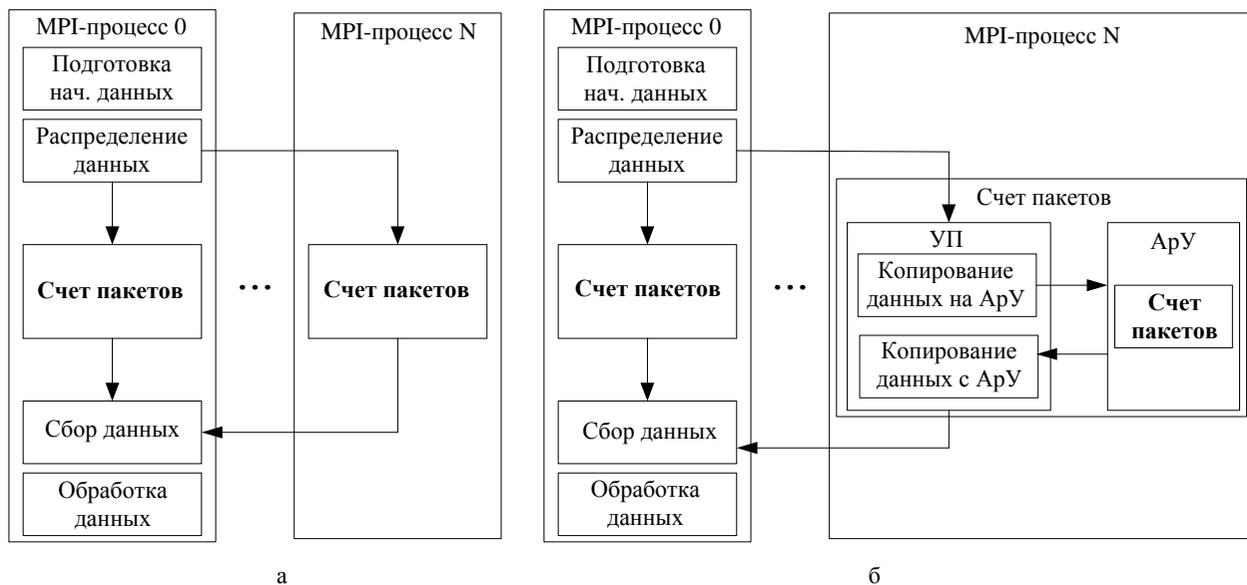


Рис. 1. Структура программы: а – СМК-У; б – ПАК-МК

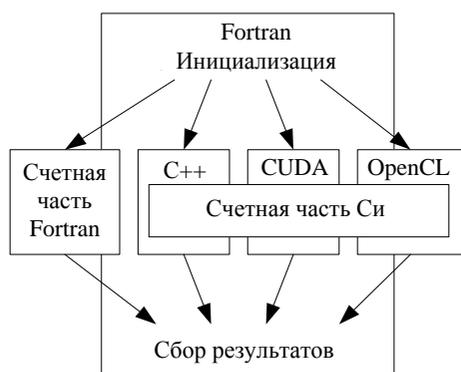


Рис. 2. Структура программы ПАК-МК

Адаптация программы

Адаптация программы для архитектуры АрУ AMD осуществлялась в нескольких направлениях. Массивы логически связанных данных, которые в программе обычно обрабатываются вместе (компоненты координат и скоростей частиц), были объединены в массивы векторов.

Для более эффективного использования памяти АрУ доступ к константам и некоторым небольшим массивам констант осуществляется через константную память.

Массивы, хранящие номера частиц и их текущие состояния, были объединены таким образом, что оба параметра хранятся в одном элементе массива. Это позволило уменьшить длительность выполнения процедуры сортировки частиц.

Перенос всей счетной части программы на АрУ позволил минимизировать количество передаваемых между АрУ и УП данных.

Использование математических функций на АрУ имеет свои особенности. Часть математических функций была заменена на аналогичные реализации,

поддерживаемые АрУ, для увеличения точности вычислений или сокращения времени расчета.

Разбиение одной вычислительной функции, выполняемой на АрУ, на несколько в зависимости от логики работы и входных данных позволило уменьшить время компиляции программы и в некоторых случаях дало дополнительное ускорение расчетов.

Результаты тестирования

Тестирование программы проводилось на вычислительной системе, содержащей универсальный процессор архитектуры x86 и графический арифметический ускоритель AMD ATI Radeon HD 5970. Характеристики вычислительной системы представлены в табл. 1.

Таблица 1

Характеристики вычислительной системы

Параметр	Значение
Универсальный процессор	AMD Phenom II X2 545
Количество ядер, шт.	2
Тактовая частота, ГГц	3,0
Теоретическая пиковая производительность (64-bit), Гфлоп/с	24,0
Емкость оперативной памяти, ГБ	4
Арифметический ускоритель	AMD ATI Radeon HD 5970
Количество графических процессоров, шт.	2
Количество потоковых процессоров, шт.	320
Тактовая частота, ГГц	0,725
Теоретическая пиковая производительность (64-бит), Гфлоп/с	928
Объем памяти, ГБ	1,0*2
Интерфейс	PCI-Express x16 2.0

Так как АрУ AMD ATI Radeon HD 5970 состоит из двух независимых графических процессоров (согласно данным, приведенным в табл. 1), то далее в тексте под АрУ будем подразумевать один из графических процессоров, входящих в состав AMD ATI Radeon HD 5970.

Тестирование программы проводилось на двух задачах:

1. Задача Т1 представляет собой бесконечную систему, состоящую из тепловыделяющих систем с одним и тем же химическим составом тепловыделяющих элементов.

2. Задача Т2 – одно из состояний активной зоны реактора ВВЭР-1000.

Тестирование ПАК-МК проводилось в следующих конфигурациях:

1. 1 и 2 MPI-процесса с использованием только универсального процессора и реализации счетной части на языке Fortran.

2. 1 и 2 MPI-процесса с использованием 1 и 2 АрУ соответственно (1 MPI процесс задействует 1 АрУ) и реализации счетной части на OpenCL.

3. 1 MPI-процесс с использованием только универсального процессора и реализации счетной части на OpenCL (задействует все ядра УП).

Максимальное заданное количество траекторий в пакете для каждой задачи определяется доступным объемом памяти АрУ (1 ГБ) и составляет 262144 (2^{18}) штук.

Все расчеты выполнялись для четырех пакетов расчета для каждого MPI-процесса.

Длительности выполнения всей программы в указанных конфигурациях на задаче Т1 представлены в табл. 2, на задаче Т2 – в табл. 3.

В табл. 4 и на рис. 3 представлены значения коэффициента ускорения длительности вычислений всей программы по сравнению с одним ядром УП для задачи Т1. В табл. 5 и на рис. 4 – для задачи Т2.

Таблица 2

Длительности выполнения всей программы на задаче Т1, в секундах

Устр.	Реализация	MPI-проц.	Траекторий в пакете (2^X), X, шт.								
			10	11	12	13	14	15	16	17	18
УП	Fortran	1	22,1	46,4	92,1	193,5	431,6	954,6	1998,9	4022,3	8103,7
		2	12,5	23,5	48,8	107,6	232,5	497,0	1052,6	2115,8	4258,4
АрУ	OpenCL	1	39,7	50,7	65,2	80,6	102,3	148,3	238,5	408,5	745,3
		2	21,1	27,9	33,3	43,5	54,1	74,8	126,4	214,1	381,8
УП		(2)	9,6	17,8	32,2	62,2	127,2	272,9	589,5	1183,3	2383,5

Таблица 3

Длительности выполнения всей программы на задаче Т2, в секундах

Устр.	Реализация	MPI-проц.	Траекторий в пакете (2^X), X, шт.								
			10	11	12	13	14	15	16	17	18
УП	Fortran	1	52,2	104,5	209,5	432,2	885,0	1820,4	3724,2	7476,9	15018,3
		2	27,3	54,6	111,6	231,0	466,4	956,0	1966,3	3943,0	7868,9
АрУ	OpenCL	1	96,6	122,0	157,0	204,7	291,6	463,6	758,0	1374,8	2568,0
		2	49,6	63,6	78,2	105,7	149,0	237,1	385,4	700,0	1301,8
УП		(2)	19,5	35,1	65,5	126,7	252,5	513,7	1049,8	2099,5	4211,3

Таблица 4

Значения коэффициента ускорения длительности вычислений всей программы по сравнению с одним ядром УП на задаче Т1

Устр.	Реализация	MPI-проц.	Траекторий в пакете (2^X), X, шт.								
			10	11	12	13	14	15	16	17	18
УП	Fortran	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
		2	1,8	2,0	1,9	1,8	1,9	1,9	1,9	1,9	1,9
АрУ	OpenCL	1	0,6	0,9	1,4	2,4	4,2	6,4	8,4	9,8	10,9
		2	1,0	1,7	2,8	4,4	8,0	12,8	15,8	18,8	21,2
УП		(2)	2,3	2,6	2,9	3,1	3,4	3,5	3,4	3,4	3,4

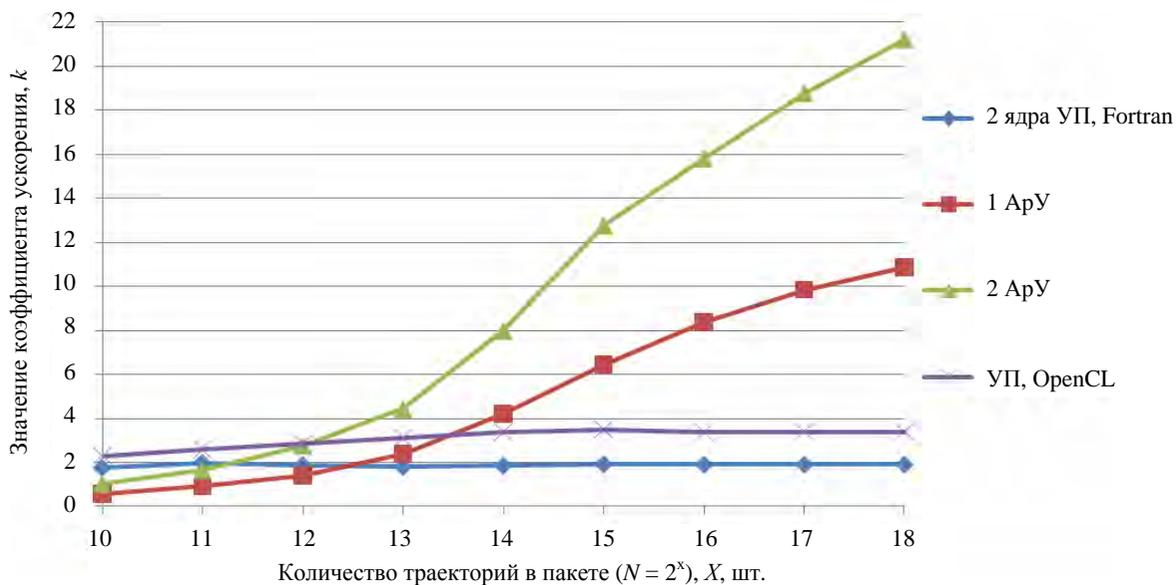


Рис. 3. Значения коэффициента ускорения длительности вычислений всей программы по сравнению с одним ядром УП для задачи T1

Т а б л и ц а 5

Значения коэффициента ускорения длительности вычислений всей программы по сравнению с одним ядром УП на задаче T2

Устр.	Реализация	MPI-проц.	Траекторий в пакете (2^X), X, шт.									
			10	11	12	13	14	15	16	17	18	
УП	Fortran	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
		2	1,9	1,9	1,9	1,9	1,9	1,9	1,9	1,9	1,9	1,9
АрУ	OpenCL	1	0,5	0,9	1,3	2,1	3,0	3,9	4,9	5,4	5,8	
		2	1,1	1,6	2,7	4,1	5,9	7,7	9,7	10,7	11,5	
УП		(2)	2,7	3,0	3,2	3,4	3,5	3,5	3,5	3,6	3,6	

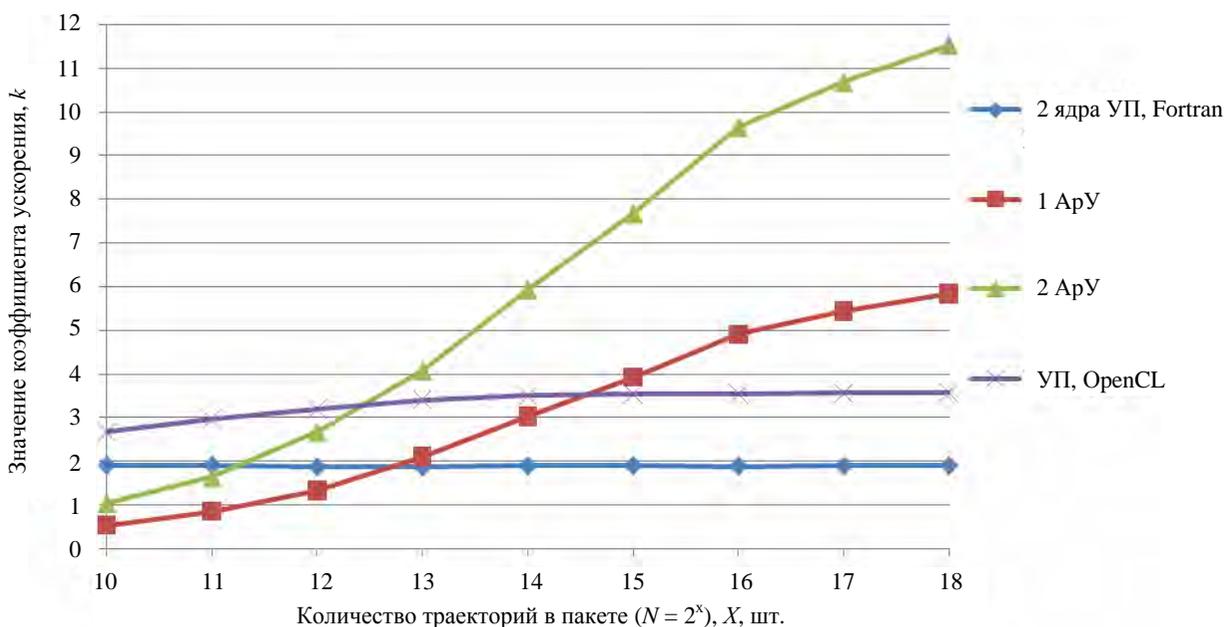


Рис. 4. Значения коэффициента ускорения длительности вычислений всей программы по сравнению с одним ядром УП для задачи T2

Заключение

В докладе представлены результаты разработки и численного исследования программно-аппаратного комплекса ПАК-МК для расчета эффективного коэффициента размножения нейтронов методом Монте-Карло.

Значение ускорения OpenCL-версии программы на арифметическом ускорителе AMD ATI Radeon HD 5970 по сравнению с одним ядром универсального процессора AMD Phenom II X2 545 составляет:

– на задаче T1 – 10,9 раза при использовании одного АрУ и 21,2 раза при использовании двух АрУ;

– на задаче T2 – 5,8 раза при использовании одного АрУ и 11,5 раза при использовании двух АрУ.

Длительность выполнения OpenCL-версии программы на универсальном процессоре уменьшается в 1,3–1,9 раз по сравнению с первоначальной версией программы при запуске двух MPI-процессов.

Литература

1. Рыбкин А. С., Залялов А. Н., Малькин А. Г. и др. Программный комплекс на базе гибридных вычислительных систем для расчета критических параметров методом Монте-Карло // Сб. тр. XII межд. семинара «Супервычисления и математическое моделирование» / Под ред. Р. М. Шагалиева. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2011. С. 310–315.