

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС НА БАЗЕ ГИБРИДНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ ДЛЯ РАСЧЕТА КРИТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

А. С. Рыбкин, А. Н. Залялов, А. Г. Малькин, С. П. Огнев, В. И. Рослов

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

Введение

Одной из основных сфер внедрения программных комплексов на базе гибридных вычислительных систем с графическими арифметическими ускорителями является атомная энергетика. В частности, важнейшей задачей при разработке и эксплуатации сложных технических объектов атомной энергетики является расчет критических параметров систем.

В практике ВНИИЭФ для расчета критических параметров методом Монте-Карло используется программный комплекс, являющийся развитием программы С-95 [1], написанный на языке программирования Фортран-90 и предназначенный для универсальных вычислительных систем. Задействование графических арифметических ускорителей потребовало создание новой программы, способной выполняться на гибридных вычислительных системах. Разработка программы, адаптированной к особенностям архитектуры гибридной вычислительной системы, потребовала коренного изменения структуры комплекса. В данном докладе приводятся результаты разработки программы, в результате чего основная часть кода для расчета критических параметров комплекса переведена на графические арифметические ускорители. Представлены характерные для данного класса задач тесты и первые численные исследования разрабатываемой программы на гибридных вычислительных системах.

Численные исследования проводились на высокопроизводительной вычислительной системе ГВС-10 «Кубань» с универсальным процессором архитектуры x86 и арифметическим ускорителем (ArV) основанном на графических процессорах фирмы NVIDIA GeForce GTX295.

Постановка задачи

Метод Монте-Карло является одним из основных методов для определения эффективного коэффициента размножения нейтронов активных зон (АЗ) ядерных реакторов, обоснования радиационной и ядерной безопасности транспортных упаковочных комплектов (ТУК) для перевозки и долговременного хранения отработанного ядерного топлива АЭС. Для данного класса задач характерным является наличие

большого количества (порядка нескольких сотен) тепловыделяющих систем (ТВС), которые заполняют внутренность АЗ или ТУК. Каждая из ТВС, в свою очередь, содержит несколько сотен тепловыделяющих элементов (ТВЭЛ), конструкционных и управляющих стержней. Кроме того, ТВС отличаются друг от друга химическими составами ТВЭЛ. Такое детальное описание задач создает определенные трудности, как при подготовке начальных данных, так и при проведении расчетов.

В разработанной программе основным объектом в задании геометрических данных выбран геометрический блок. Блок представляет собой совокупность областей и поверхностей определенного типа.

В задаче может быть описано произвольное количество блоков. Они рассматриваются как независимые «строительные» элементы, которые следует так разместить друг относительно друга, чтобы составить требуемую геометрию системы. Геометрия, составленная из вложенных друг в друга блоков, напоминает «матрешку». Отличие состоит лишь в том, что в блок можно вкладывать не один, а несколько других (не обязательно разных) блоков. Важно лишь, чтобы размещенные блоки не пересекались между собой и не выходили за пределы блока-вместилища.

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

Источник определяет фазовые параметры начального распределения нейтронов. В начале счета задач, в течение нескольких поколений нейтронов, выполняется моделирование траекторий без снятия с них результатов (процесс установления собственной функции).

Моделирование траекторий осуществляется в соответствии с выбранной системой констант взаимодействия частиц с веществами. Для розыгрыша свободного пробега и выбора вещества, на котором произошло столкновение, используется схема максимальных кусочно-постоянных сечений. Учет теплового движения ядер среды происходит либо в прибли-

жении свободного максвелловского газа (FRGAS), либо с учетом химических связей вещества (модель $S(\alpha, \beta)$).

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

Модификация программы для использования на АрУ

Специфика программирования на АрУ потребовала существенного изменения алгоритма работы программы и системы хранения данных.

Счетная часть программы была переведена на язык программирования С. При этом все структуры данных были трансформированы в одномерные массивы, передача данных в процедуры и функции осуществлялась явно в виде параметров подпрограмм без использования модулей.

В отличие от стандартного метода, где все частицы одного поколения моделируются последовательно, в новой программе предназначенной для работы на гибридных вычислительных системах с графическими арифметическими ускорителями различные части траектории частиц (расчет расстояния, свободный пробег, розыгрыш столкновения и т. д.) рассчитываются параллельно для всех частиц поколения.

Описание тестовых задач

Для тестирования программы выбраны две тестовых задачи. Их подготовка основана на результатах расчета активной зоны реактора ВВЭР-1000 с 1/3 загрузкой МОХ-топлива, выполненной специалистами Курчатовского института [2].

В качестве первого теста была выбрана бесконечная система, состоящая из ТВС с одним и тем же химическим составом ТВЭЛ. Геометрия задачи представлена на рис. 1а, в качестве второго теста было выбрано одно из состояний АЗ реактора ВВЭР-1000 из работы [2]. Картограмма заполнения АЗ представлена на рис. 1б. В силу симметрии АЗ расчеты проводились 1/6 части АЗ с применением тактики отражения на границах. На рисунке разные химические составы ТВЭЛ в ТВС выделены разным цветом.

Гибридная вычислительная система ГВС-10 «КУБАНЬ»

Система содержит вычислительный модуль с универсальным процессором Intel Core i7-920, работающий на тактовой частоте 2,66 ГГц и арифметический ускоритель.

АрУ состоит из графических процессоров (ГП) NVIDIA GT200 и оперативной памяти типа GDDR3. Объем оперативной памяти доступный каждому ГП составляет 896 МБ.

Структура гибридной вычислительной системы представлена на рис. 2.

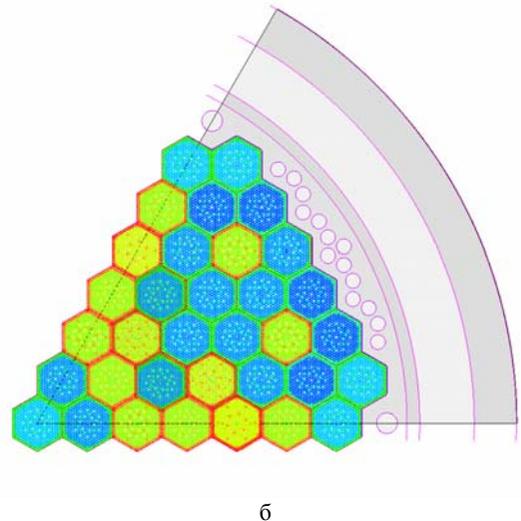
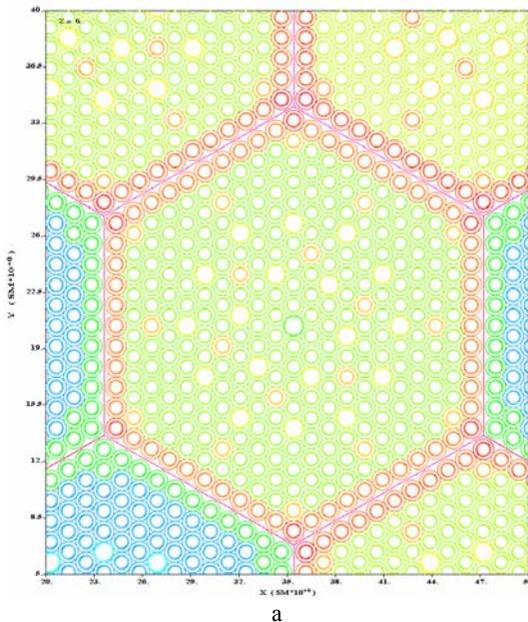


Рис. 1. Поперечное сечение ТВС(а) и 1/6 картограммы заполнения АЗ (б)

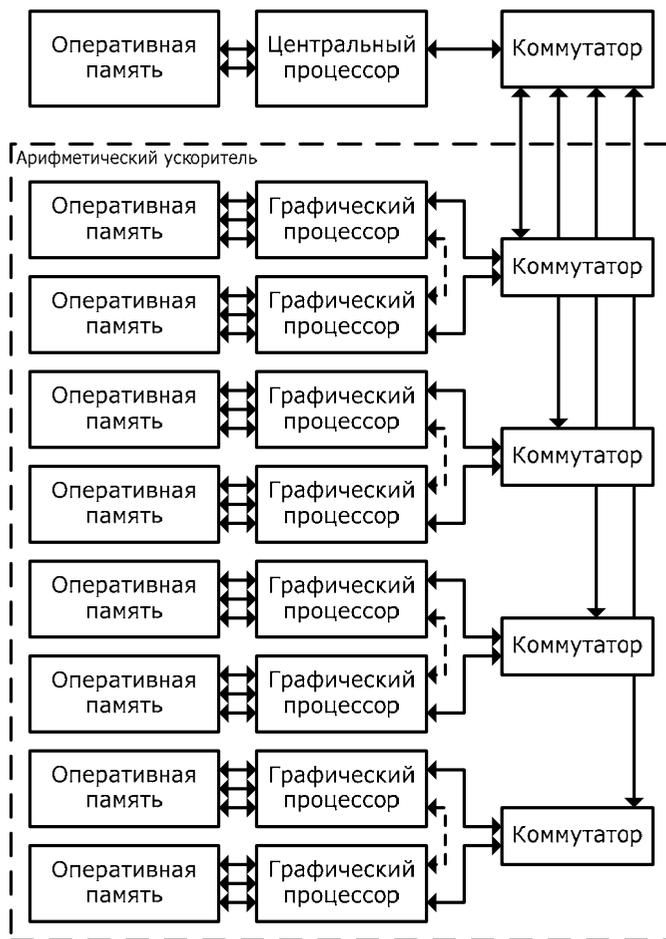


Рис. 2. Структурная схема ГВС-10 «Кубань»

ГП NVIDIA GT200 содержит 30 векторных ядер и 7 64-битных контроллеров памяти. Векторные ядра ГП работают на частоте 1,242 ГГц. Теоретическая пиковая производительность вычислительной системы составляет 638 ГФ/с. Агрегированная пропускная способность памяти Ару составляет 896 ГБ/с. Интерфейс подключения Ару – PCI Express 2.0 x16 (четыре шины).

В состав системного программного обеспечения входят операционная система Microsoft Windows Server 6 R2 для платформы x86_64, библиотека межпроцессорных обменов MPI MPICH2-1.1.1, сконфигурированная для работы с системой программирования Intel Fortran 11.0.72. Для графического арифметического ускорителя использовалась NVIDIA CUDA 3.0 SDK.

Результаты тестирования

В данной главе приводятся результаты тестирования программы в четырех конфигурациях:

- вычислительный процесс с использованием одного ядра универсального процессора;
- вычислительный процесс с использованием четырех ядер универсального процессора;

– вычислительный процесс с использованием одного ядра универсального процессора и одного ГП Ару;

– вычислительный процесс с использованием четырех ядер универсального процессора и восьми ГП Ару.

Численные исследования выполнялись на различном числе траекторий в пакете (ансамбле). Максимальное количество траекторий в пакете определялось доступным объемом оперативной памяти ГП. Для иллюстрации все расчеты выполнялись для двух пакетов установления собственной функции и двух пакетов счета.

Далее на рис. 3, 4 приняты следующие обозначения коэффициентов ускорения:

– «k0». Коэффициент ускорения, определяемый соотношением длительности вычисления на одном ядре универсального процессора Intel Core i7-920 к длительности вычисления одного ядра универсального процессора и на одного графическом процессоре Ару;

– «k1». Коэффициент ускорения, определяемый соотношением длительности вычисления на четырех ядрах универсального процессора Intel Core i7-920 к длительности вычисления на четырех ядрах универсального процессора и восьми графических процессорах Ару.

Расчет тепловыделяющей сборки

В табл. 1, 2 представлены длительности счета для различных частей разработанной программы:

1 – розыгрыш параметров частицы после столкновений;

2 – процедура розыгрыша столкновений частиц;

3a – блок гибели;

3b – расчет расстояния до границы области вдоль направления полета частицы;

3c – розыгрыш свободного пробега частиц;

sort – сортировка частиц для оптимальной загрузки АрУ.

В табл. 1 представлено время счета ТВС при задействовании одного ядра универсального процессора.

Аналогично, в табл. 2 представлены значения длительности вычислений при задействовании АрУ.

Из таблицы видно, что большую часть времени занимает сортировка частиц. Данная процедура в настоящее время реализована в последовательном режиме. Ведутся работы по ее распараллеливанию, что приведет к снижению времени счета. Также достаточно большое время занимает поиск расстояний вдоль полета частицы. Авторы изучают возможность оптимизации алгоритмов для ускорения этого блока.

Необходимо отметить, что при масштабировании количества ГП в АрУ эффективность использования остается на прежнем уровне, и не снижается с увеличением их числа.

Таблица 1

Длительность вычислений на универсальном процессоре, в секундах

Тип	Количество траекторий в пакете, тыс. шт.						
	1,6	3,2	6,4	12,8	25,6	51,2	102,4
1	0,4	0,8	1,9	4,3	9,4	21,6	46,0
2	2,0	4,3	9,7	21,2	46,8	109,2	235,6
3a	1,8	3,8	9,1	22,0	52,2	131,4	282,1
3b	45,0	90,8	183,2	370,5	748,0	1537,8	3113,1
3c	9,2	19,3	40,8	86,0	186,0	419,5	889,1
Sort	0,3	0,6	1,2	2,5	6,2	18,7	55,9
ИТОГО	58,7	119,6	245,8	506,4	1048,6	2238,1	4621,9

Таблица 2

Длительность вычислений на АрУ, в секундах

Устройство	Тип	Количество траекторий в пакете, тыс. шт.						
		1,6	3,2	6,4	12,8	25,6	51,2	102,4
Графический арифметический ускоритель	1	0,6	1,2	1,7	2,3	3,5	6,0	10,4
	2	1,2	3,3	5,7	9,0	14,0	24,5	42,1
	3a	0,5	1,2	1,6	2,9	3,6	5,8	7,9
	3b	10,6	19,2	27,5	38,8	58,8	99,2	170,7
	3c	5,5	13,7	22,9	33,1	50,2	85,8	145,4
	sort	20,3	60,6	131,1	272,5	534,9	1076,5	2125,4
Универсальный процессор	1	0,2	0,2	0,2	0,3	0,3	0,3	0,3
	2	1,3	1,5	1,7	2,0	2,3	2,5	2,6
	3a	0,9	1,0	1,1	1,4	1,7	2,0	2,1
	3b	17,0	16,1	15,5	16,8	20,0	19,0	18,3
	3c	5,2	5,6	6,0	6,9	7,9	8,0	8,2
	sort	0,2	0,2	0,2	0,3	0,3	0,3	0,3
ИТОГО		63,4	123,8	215,2	386,3	697,5	1330,0	2533,7

На рис. 3 проиллюстрированы значения коэффициентов ускорения при расчете ТВС при различных значениях количества траекторий в пакете.

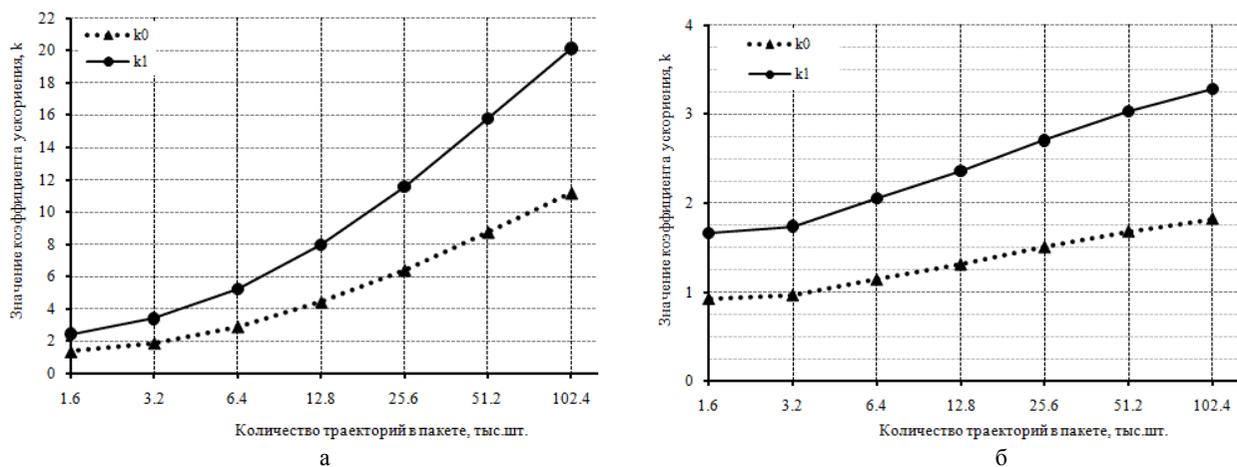


Рис. 3. Значения коэффициентов ускорения: а – всей задачи; б – счетной части (без сортировки)

При количестве траекторий равно 102400 шт. ускорение всей задачи составляет 1,82 раза при задействовании одного графического процессора АрУ. С использованием восьми ГП АрУ длительность вычислений уменьшается в 3,28 раза по сравнению с четырьмя ядрами универсального процессора Intel Core i7-920.

Расчет активной зоны

В табл. 3 представлено время счета отдельных частей расчета активной зоны (АЗ) на универсальном процессоре.

Таблица 3

Длительность вычислений на универсальном процессоре, в секундах

Тип	Количество траекторий в пакете, тыс. шт.							
	1,6	3,2	6,4	12,8	25,6	51,2	102,4	204,8
1	0,4	0,9	2,1	4,8	10,6	24,5	51,6	108,1
2	2,0	4,2	9,4	21,5	48,1	111,2	234,5	497,6
3a	1,8	3,7	8,9	22,1	54,3	135,7	280,7	624,0
3b	48,8	98,4	197,1	402,4	814,4	1664,0	3395,3	6824,9
3c	13,6	28,3	59,0	126,9	266,7	574,9	1178,2	2389,2
Sort	0,1	0,3	0,5	1,4	3,4	7,8	19,9	55,4
ИТОГО	66,7	135,8	276,9	579,0	1197,5	2518,2	5160,2	10499,2

В табл. 4 приведено время счета задачи с использованием АрУ.

Таблица 4

Длительность вычислений на АрУ, в секундах

Тип	Количество траекторий в пакете, тыс. шт.							
	1,6	3,2	6,4	12,8	25,6	51,2	102,4	204,8
1	0,6	0,7	1,0	1,6	2,9	5,5	10,9	21,4
2	2,7	3,3	4,6	6,3	9,8	17,5	34,0	68,1
3a	0,3	0,4	0,5	0,6	0,9	1,5	3,0	6,5
3b	65,4	84,6	118,8	174,9	271,4	473,1	823,2	1538,6
3c	24,3	31,0	42,1	57,9	85,9	144,3	265,8	507,5
Sort	22,6	43,0	83,9	164,0	323,9	642,2	1278,6	2557,7
ИТОГО	115,9	163,0	250,9	405,3	694,8	1284,0	2415,4	4699,8

На рис. 4 проиллюстрированы значения коэффициентов ускорения при расчете АЗ при различных значениях количества траекторий в пакете.

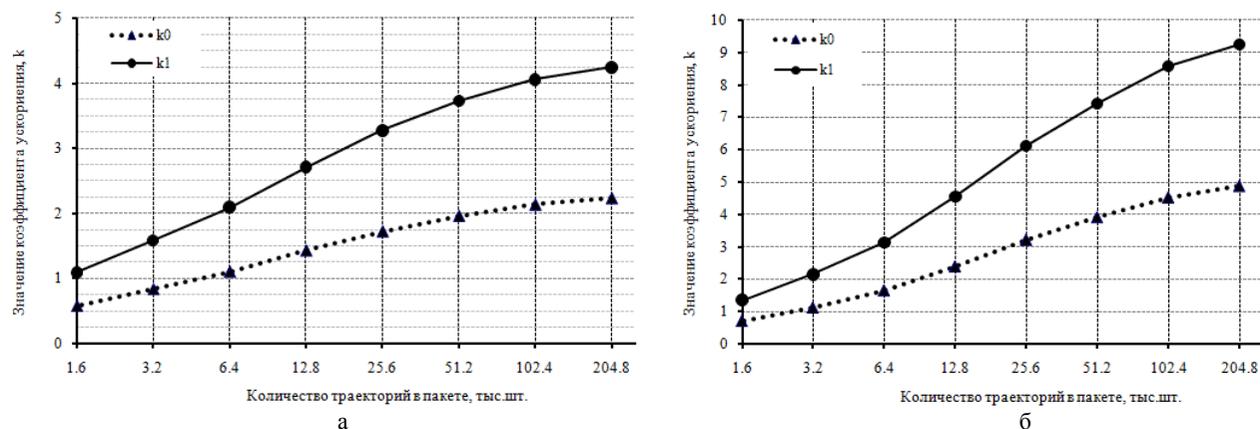


Рис. 4. Значения коэффициентов ускорения: а – всей задачи; б – счетной части (без сортировки)

При количестве траекторий равного 204800 шт. ускорение всего расчета АЗ составляет 4,24 раза по сравнению с четырьмя ядрами универсального процессора при задействовании восьми графических процессоров ГВС-10 «Кубань».

Заключение

При количестве траекторий равного 102400 шт. ускорение расчета ТВС составляет 1,82 раза при задействовании одного графического процессора АрУ. С использованием восьми ГП АрУ длительность вычислений уменьшается в 3,28 раза по сравнению с четырьмя ядрами универсального процессора Intel Core i7-920.

При количестве траекторий равного 204800 шт. ускорение всей задачи расчета активной зоны составляет 4,24 раза по сравнению с четырьмя ядрами универсального процессора при задействовании восьми графических процессоров ГВС-10 «Кубань».

Литература

1. Кочубей Ю. К., Житник А. К., Огнев С. П., Семенова Т. В. и др. Программа С-95. Моделирование совместного переноса нейтронов и γ -квантов методом Монте-Карло // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2000, № 2. С. 49–52.
2. Gomin E., Kalugin M., Oleynik D. VVER-1000 MOX Core Computational Benchmark. OECD 2006, NEA № 6088.