

УДК 519.6

## 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, И. В. Семёнов  
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Приводятся результаты разработки программы СМК-У, переводящей основную часть кода для расчета критических параметров комплекса СМК на графические арифметические ускорители. Представлены характерные для данного класса задач тесты и первые численные исследования разрабатываемой программы на гибридных вычислительных системах.

*Ключевые слова:* арифметический ускоритель, графический процессор, специализированная компактная суперЭВМ, ВВЭР-1000, тепловыделяющий элемент (ТВЭЛ), тепловыделяющая сборка (ТВС).

### Введение

Атомная энергетика является одной из сфер внедрения программных комплексов на базе гибридных вычислительных систем с графическими арифметическими ускорителями (АрУ), которые, в частности, применяются для расчета критических параметров систем при разработке и эксплуатации сложных технических объектов.

В практике РФЯЦ-ВНИИЭФ для расчета критических параметров методом Монте-Карло используется программный комплекс СМК [1], являющийся развитием программы С-95 [2], написанный на языке программирования Фортран-90 и предназначенный для универсальных вычислительных систем. Задействование АрУ потребовало создания новой программы, способной выполняться на гибридных вычислительных системах, что, в свою очередь, привело к коренному изменению структуры программного комплекса.

В данной статье приводятся результаты разработки программы СМК-У [3], переводящей основную часть кода для расчета критических параметров комплекса СМК на АрУ. Представлены характерные для данного класса задач тесты и первые численные исследования программы на гибридных вычислительных системах.

В качестве аппаратной основы использовались:

- специализированная компактная высокопроизводительная вычислительная система ГВС-10 "Кубань" с универсальным процессором фирмы Intel с архитектурой Nehalem и АрУ, основанным на графическом процессоре NVIDIA GT200;
- АрУ NVIDIA GeForce 480 и Tesla C2050;
- универсальная компактная суперЭВМ, построенная на процессорах фирмы AMD с архитектурой Magny-Cours (Opteron 6168).

### 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 длительного хранения отработанного ядерного топлива АЭС. Для данного класса задач характерным является наличие большого количества (порядка нескольких сотен) тепловыделяющихборок (ТВС), которые заполняют внутренность АЗ или ТУК. Каждая ТВС, в свою

очередь, содержит несколько сотен тепловыделяющих элементов (ТВЭЛ), конструкционных и управляющих стержней. Кроме того, ТВС отличаются друг от друга химическим составом ТВЭЛ. Такое детальное описание задач создает определенные трудности как при подготовке начальных данных, так и при проведении расчетов.

В разработанной программе в качестве основного объекта при 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  $k_{эф}$  выполняется методом Монте-Карло по поколениям нейтронов. Очередное поколение нейтронов формируется моделированием траекторий нейтронов предыдущего поколения до первой точки деления. Во время моделирования производится снятие результатов с траекторий частиц. Моделирование прекращается по достижении заданной точности  $k_{эф}$ .

Источник определяет фазовые параметры начального распределения нейтронов. В начале счета задачи 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 [2]. Учет теплового движения ядер среды происходит либо в приближении свободного максвелловского газа (FRGAS), либо с учетом химических связей вещества (модель  $S(\alpha, \beta)$ ) [4].

Для расчета  $k_{эф}$  используется одна оценка по пробегу и три оценки по столкновениям: по собственным 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 выполнения программы и системы хранения данных.

Счетная часть программы переведена на язык программирования С. При этом все структуры данных трансформированы в одномерные массивы, передача данных в процедуры и функции осуществляется 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 АрУ, 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 тестовые задачи. Их подготовка основана на результатах выполненного специалистами Курчатовского института расчета АЗ реактора ВВЭР-1000 с 1/3 загрузки МОХ-топлива [5].

В качестве первого теста была выбрана бесконечная система, состоящая из ТВС с одним и тем же химическим составом ТВЭЛ. Геометрия задачи представлена на рис. 1, а. В качестве второго теста было выбрано одно из состояний АЗ реактора ВВЭР-1000 из работы [5]. Картограмма заполнения АЗ представлена на рис. 1, б. В силу симметрии АЗ расчеты проводились для 1/6 части АЗ с применением тактики отражения на границах. На рис. 1 (см. также цветную вкладку) разные химические составы ТВЭЛ в ТВС выделены разным цветом.

### Состав оборудования

Для исследования использовались несколько вычислительных систем:

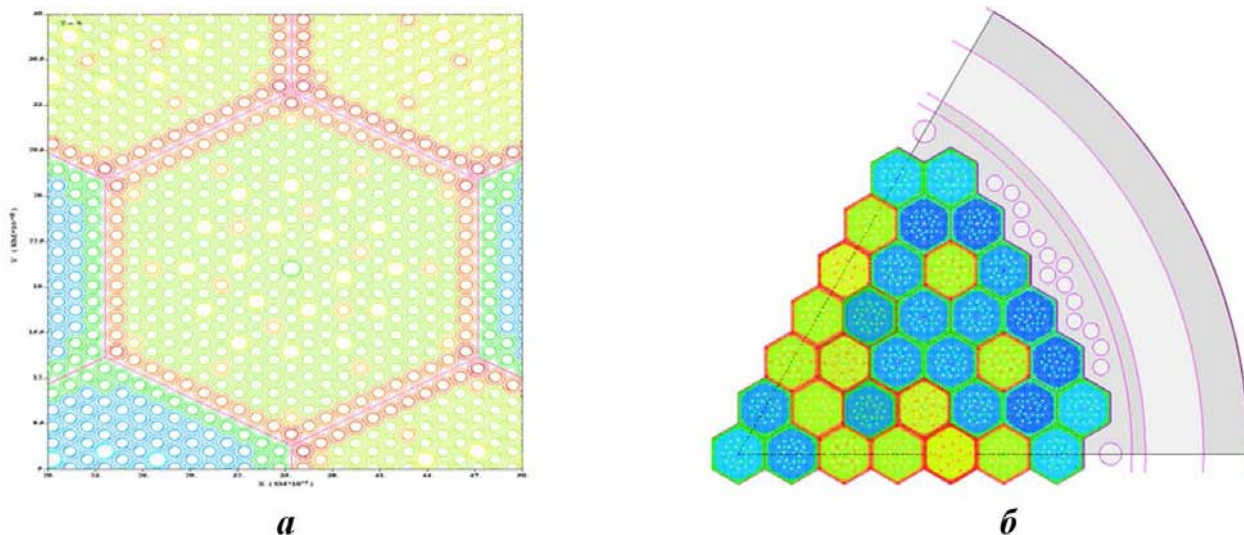


Рис. 1. Поперечное сечение ТВС (а) и 1/6 картограммы заполнения АЗ (б)

- специализированная компактная высокопроизводительная вычислительная система ГВС-10 "Кубань". Система содержит вычислительный модуль с четырехядерным универсальным процессором Intel Core i7-920 архитектуры Nehalem и АРУ, основанный на графическом процессоре NVIDIA GT200. Структурная схема вычислительной системы представлена на рис. 2;
- специализированная компактная высокопроизводительная вычислительная система ГВС-14 с АРУ NVIDIA GeForce 480 и Tesla

C2050. Структурная схема вычислительной системы представлена на рис. 3;

- универсальная компактная суперЭВМ, построенная на процессорах фирмы AMD с архитектурой Magny-Cours (Opteron 6168).

В состав системного программного обеспечения гибридных вычислительных систем входит операционная система Microsoft Windows для платформы x86\_64, библиотека межпроцессорных обменов MPI MPICH2-1.2.1. Часть программного кода,

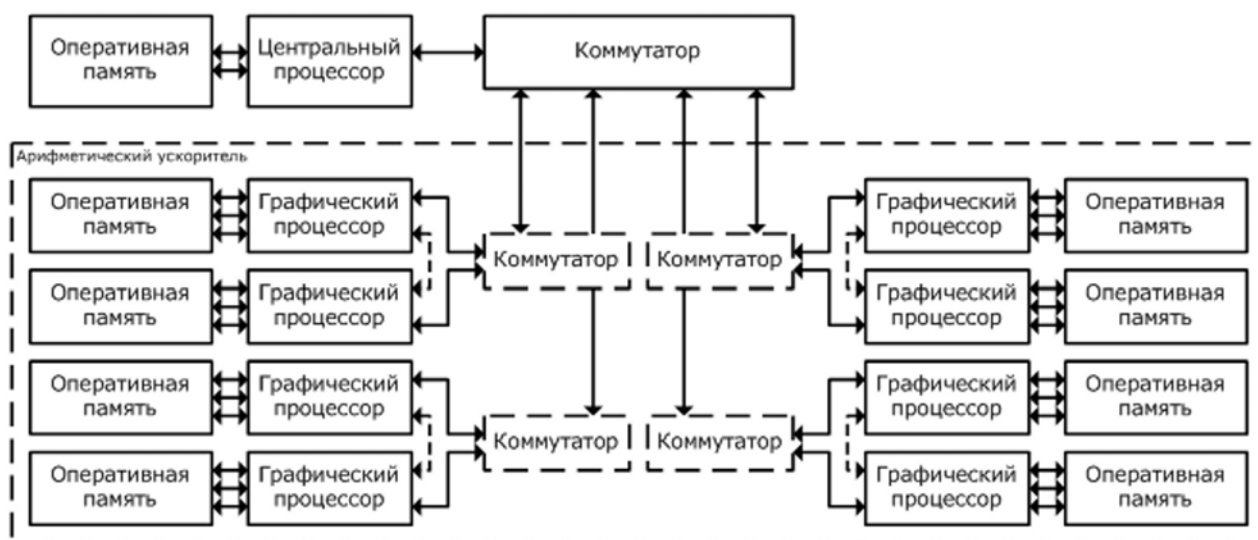


Рис. 2. Структурная схема ГВС-10 "Кубань"

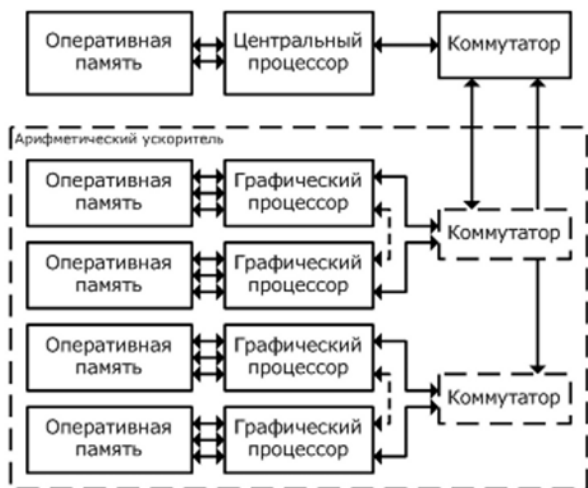


Рис. 3. Структурная схема ГВС-14

предназначенная для универсального процессора, собиралась с использованием Intel Fortran 11. Для АрУ фирмы NVIDIA использовался компилятор NVCC из NVIDIA CUDA 3.1 SDK. Ограничения на количество регистров и т. п. не устанавливались.

### Результаты тестирования

Численные исследования выполнялись на различном числе траекторий частиц в пакете (ансамбле). Максимальное количество траекторий в пакете определялось доступным объемом оперативной памяти графического процессора. Все расчеты выполнялись для двух пакетов установления собственной функции и двух пакетов счета.

Необходимо отметить, что изменение структур данных в программе СМК-У повлекло за собой увеличение длительности счета на универсальном процессоре в 3–4 раза относительно времени

счета программы СМК. В данной работе сравниваются времена счета разработанной программы СМК-У на универсальных и графических процессорах.

В общем виде длительность выполнения программы  $T_T$  можно представить следующим образом:

$$T_T = (T_H + T_O + T_G) + \sum_{i=1}^6 T_i,$$

Здесь  $T_H$  — длительность начальной подготовки данных;  $T_O$  — длительность обработки данных по окончании расчета;  $T_G$  — длительность организационной работы с АрУ, включая передачу данных в/из АрУ;  $T_i$  ( $i = \overline{1, 6}$ ) — длительности процедур расчета ансамбля частиц:

- 1 — розыгрыш параметров частицы после столкновений;
- 2 — розыгрыш столкновений частиц;
- 3 — блок гибели частиц;
- 4 — расчет расстояния до границы области вдоль направления полета частицы;
- 5 — розыгрыш свободного пробега частиц;
- 6 — распределение частиц по группам.

Начальная подготовка данных, обработка их по окончании расчета и работа с АрУ, включая передачу данных в и из АрУ, занимают незначительное количество времени.

### Расчет ТВС

Длительность расчетов системы из ТВС на одном ядре универсального процессора и одном графическом процессоре с использованием программы СМК-У, а также значения коэффициентов ускорения для  $2^{19}$  траекторий в пакете приведены соответственно в табл. 1 и 2.

Таблица 1

Расчет ТВС. Длительность выполнения (в с) процедур расчета ансамбля частиц

$T$	Intel Core i7-920	AMD Opteron 6168	NVIDIA Tesla C1060	NVIDIA Tesla C2050	NVIDIA Tesla C2050 ECC	NVIDIA GeForce 480
$T_1$	266,2	589,8	34,8	9,6	10,3	7,7
$T_2$	1 381,2	3 051,0	98,2	45,0	71,4	38,5
$T_3$	1 951,1	4 168,7	4,8	4,2	9,6	4,9
$T_4$	16 119,0	27 407,5	3 581,7	1 588,6	1 941,8	1 301,6
$T_5$	5 639,8	12 223,6	713,9	208,7	228,5	174,1
$T_6$	141,3	417,2	67,0	69,4	104,7	66,0
$T_T$	25 498,6	47 857,8	4 500,4	1 925,5	2 366,3	1 592,8

Расчет ТВС. Коэффициенты ускорения процедур расчета ансамбля частиц

$k$	Intel Core i7-920	AMD Opteron 6168	NVIDIA Tesla C1060	NVIDIA Tesla C2050	NVIDIA Tesla C2050 ECC	NVIDIA GeForce 480
$k_1$	1	0,45	7,65	27,73	25,84	34,57
$k_2$	1	0,45	14,07	30,69	19,34	35,88
$k_3$	1	0,48	406,48	464,55	203,24	398,18
$k_4$	1	0,59	4,50	10,15	8,30	12,38
$k_5$	1	0,46	7,90	27,02	24,68	32,39
$k_6$	1	0,34	2,11	2,04	1,35	2,14
$k_T$	1	0,53	5,67	13,24	10,78	16,01

На рис. 4 приведены значения коэффициентов ускорения  $k_T$  на различных АрУ для разного количества  $N$  траекторий в пакете.

Применение одного АрУ NVIDIA GeForce 480 позволило сократить длительность выполнения программы СМК-У при расчете системы из ТВС в 16 раз по сравнению с одним ядром универсального процессора Intel Core i7-920 и в 30 раз по сравнению с одним ядром AMD Opteron 6168.

Расчет АЗ реактора

В табл. 3, 4 приведены длительность расчетов АЗ на одном ядре универсального процессора и одном графическом процессоре с использовани-

ем программы СМК-У, а также значения коэффициентов ускорения. Значения указаны для  $2^{19}$  траекторий в пакете.

На рис. 5 представлены значения коэффициента ускорения  $k_T$  для АрУ по сравнению с одним ядром процессора Intel Core i7-920 и процессора AMD Opteron 6168 в зависимости от количества траекторий в пакете.

В данном тесте применение одного АрУ NVIDIA GeForce 480 позволило сократить длительность выполнения программы СМК-У на примере расчета АЗ в 13 раз по сравнению с одним ядром универсального процессора Intel Core i7-920 и в 26 раз по сравнению с одним ядром AMD Opteron 6168.

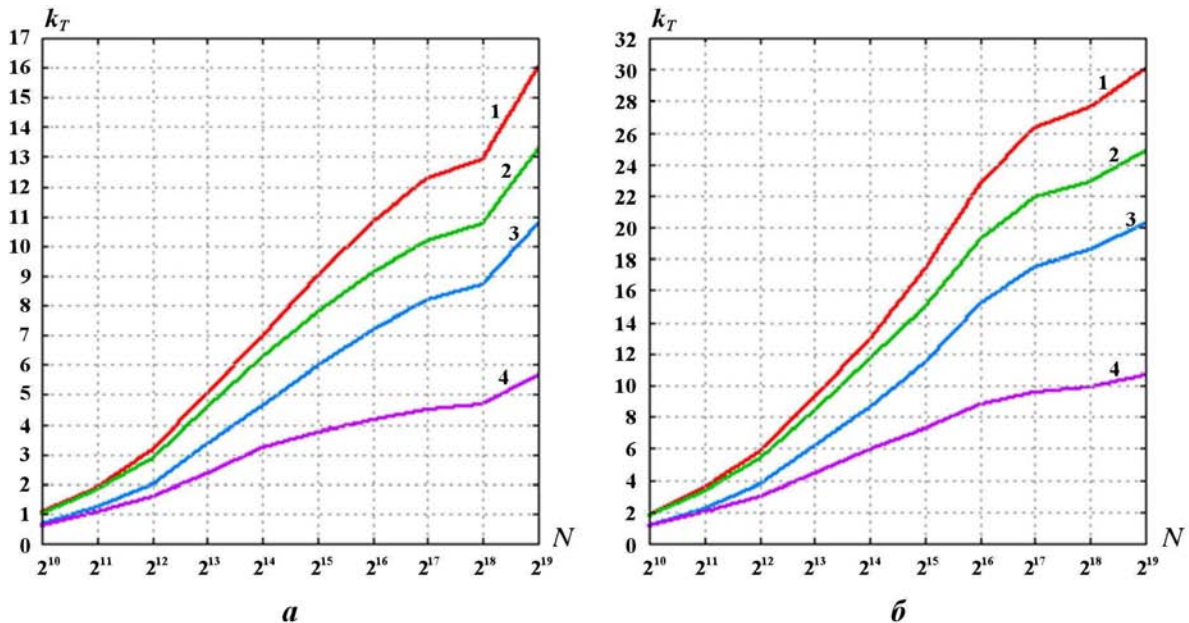


Рис. 4. Расчет ТВС. Коэффициенты ускорения  $k_T$  для различных АрУ по сравнению с одним ядром процессора Intel Core i7-920 (а) и процессора AMD Opteron 6168 (б): 1 — NVIDIA GeForce 480; 2 — NVIDIA Tesla C2050; 3 — NVIDIA Tesla C2050 ECC; 4 — NVIDIA Tesla C1060

Таблица 3

Расчет А3. Длительность выполнения (в с) процедур расчета ансамбля частиц

	Intel Core i7-920	AMD Opteron 6168	NVIDIA Tesla C1060	NVIDIA Tesla C2050	NVIDIA Tesla C2050 ECC	NVIDIA GeForce 480
$T_1$	289,2	632,1	36,9	10,6	11,6	8,6
$T_2$	1 354,8	2 963,1	97,5	43,9	69,0	37,0
$T_3$	1 950,6	4 097,9	5,9	4,0	8,9	4,4
$T_4$	17 176,8	29 278,7	5 035,9	2 067,6	2 363,8	1 628,7
$T_5$	7 628,9	16 022,1	1 375,2	380,1	395,3	315,7
$T_6$	140,3	402,0	64,5	66,0	97,7	60,1
$T_T$	28 540,6	53 395,9	6 615,9	2 572,2	2 946,3	2 054,5

Таблица 4

Расчет А3. Коэффициенты ускорения процедур расчета ансамбля частиц

	Intel Core i7-920	AMD Opteron 6168	NVIDIA Tesla C1060	NVIDIA Tesla C2050	NVIDIA Tesla C2050 ECC	NVIDIA GeForce 480
$k_1$	1	0,46	7,84	27,28	24,93	33,63
$k_2$	1	0,46	13,90	30,86	19,63	36,62
$k_3$	1	0,48	330,61	487,65	219,17	443,32
$k_4$	1	0,59	3,41	8,31	7,27	10,55
$k_5$	1	0,48	5,55	20,07	19,30	24,17
$k_6$	1	0,35	2,18	2,13	1,44	2,33
$k_T$	1	0,54	4,31	11,10	9,69	13,89

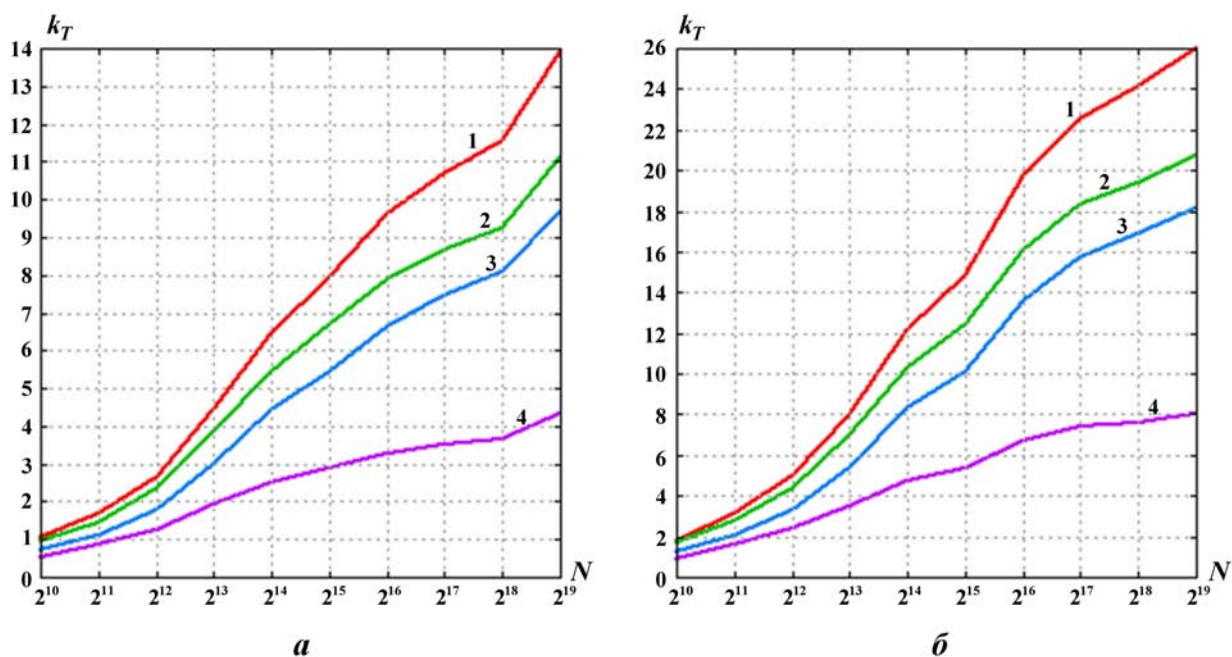


Рис. 5. Расчет А3. Коэффициенты ускорения  $k_T$  для различных АрУ по сравнению с одним ядром процессора Intel Core i7-920 (а) и процессора AMD Opteron 6168 (б): 1 — NVIDIA GeForce 480; 2 — NVIDIA Tesla C2050; 3 — NVIDIA Tesla C2050 ECC; 4 — NVIDIA Tesla C1060

### Заключение

Разработанная программа СМК-У позволяет проводить расчеты критических параметров атомных реакторов на гибридных вычислительных системах, содержащих универсальные и графические процессоры. Использование графического процессора фирмы NVIDIA существенно сокращает длительность расчета. Так, расчет системы из ТВС ускоряется до 16 раз по сравнению с расчетом на одном ядре универсального процессора фирмы Intel с архитектурой Nehalem (Core i7-920); расчет эффективного коэффициента размножения нейтронов АЗ реактора ВВЭР-1000 ускоряется до 13 раз. Ускорение возрастает практически в 2 раза относительно одного ядра универсального процессора фирмы AMD с архитектурой Magny-Cours (Opteron 6168).

При использовании АрУ NVIDIA Tesla C2050 с включенной коррекцией ошибок ECC время расчета увеличивается на 43—48 % по сравнению с NVIDIA GeForce 480. Объясняется это пропускной способностью АрУ: 177,4 Гб/с у NVIDIA GeForce 480, 120 Гб/с у NVIDIA Tesla C2050 с ECC.

### Список литературы

1. Житник А. К., Залялов А. Н., Малькин А. Г. и др. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ

№2011610500 СМК // Электронный бюллетень. 2011. № 2. С. 123. <http://www.fips.ru>.

2. Кочубей Ю. К., Житник А. К., Артемьева Е. В. и др. Программа С-95. Моделирование совместного переноса нейтронов и  $\gamma$ -квантов методом Монте-Карло // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2000. Вып. 2. С. 49—52.
3. Житник А. К., Залялов А. Н., Малькин А. Г. и др. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2010614638 СМК-У // Электронный бюллетень. 2010. № 4. С. 89. <http://www.fips.ru>.
4. Иванов Н. В., Иванов А. Н. Учет теплового движения атомов среды при решении задач переноса нейтронов методом Монте-Карло // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2003. Вып. 4. С. 25—32.
5. Gomin E., Kalugin M., Oleynik D. VVER-1000 MOX Core Computational Benchmark. Specification and Results. France, OECD Nuclear Energy Agency, 2006.

Статья поступила в редакцию 13.01.11.

---