Программно-аппаратные комплексы на базе вычислительных систем с арифметическими ускорителями для моделирования методом Монте-Карло и методом молекулярной динамики

Воронин Б.Л., Грушин С.А., Житник А.К., Залялов А.Н., Копкин С.В., Крючков И.А., Малькин А.Г., Огнев С.П., Рослов В.И., Рыбкин А.С., Степаненко С.А., Шагалиев Р.М., Южаков В.В.

Российский федеральный ядерный центр — Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики. Институт теоретической и математической физики (РФЯЦ-ВНИИЭФ ИТМФ)

Тезисы

Одним из современных направлений развития средств математического моделирования является применение вычислительных систем с арифметическими ускорителями, называемых также гибридными системами [1]. Вследствие конструктивных особенностей ускорителей эти системы, по сравнению с обычными универсальными микропроцессорами, позволяют на определенных классах задач существенно ускорить вычислительный процесс.

Такими задачами, в частности, являются задачи расчета нейтронно физических характеристик ядерных энергетических установок методом Монте-Карло [2] и задачи моделирования свойств ядерного топлива и конструкционных материалов реакторов, а также транспортных упаковочных комплектов методами молекулярной (наноуровень) и кластерной (микроуровень) динамики [3].

В этой работе представлены результаты исследования возможностей создания программно-аппаратных комплексов на базе вычислительных систем, интегрирующих процессоры архитектуры x86 и арифметические ускорители, предназначенных:

– для расчета методом Монте-Карло критических параметров активных зон ядерных реакторов, мест хранения ядерного топлива, транспортно-упаковочных комплектов для перевозки топлива и других средств обращения с топливом на АЭС и проектирования технических объектов атомной энергетики;

– для моделирования свойств материалов методом молекулярной динамики при решении специальных классов задач атомной энергетики и других наукоемких отраслей промышленности.

В работе приведены структура и параметры вычислительных систем с арифметическими ускорителями, особенности реализации аппаратно-программных комплексов.

Экономическая эффективность результатов подтверждается не только техническими параметрами (производительность, мощность), конкурентно способной ценой создаваемых вычислительных систем, не требующих специально обустроенных систем жизнеобеспечения, но и созданием комплексных программно-аппаратных средств моделирования сложных физических процессов.

Литература

1. Sim L.C., Schroder H., Leedham G. MIMD-SIMD hybrid system – towards a new low cost parallel system // Parallel Computing . 2003. Vol. 29. P. 21-36.
2. Zhitnik A.K., Tarasov V.A., Ognev S.P. , Taiwo T.A., Yang W.S. Code TDMCC for Monte Carlo Computations of Spatial Reactor Cores Kinetics // Monte Carlo 2005 Topical Meeting. Chattanooga, Tennesse, April 17 – 21, 2005.
3. Воронин Б.Л., Ерофеев А.М., Копкин С.В., Крючков И.А., Рыбкин А.С., Степаненко С.А., Южаков В.В. Применение графических арифметических ускорителей для расчета задач молекулярной динамики по программному комплексу МД // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2009. Вып. 2. С. 55-61.