

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

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

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 расчёт 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 (АрУ) 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 $k_{\text{эфф}}$ 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 $k_{\text{эфф}}$.

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

Для расчета $k_{\text{эфф}}$ 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 тестовые 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 рисунке 1а, в качестве второго теста было выбрано одно из состояний АЗ реактора ВВЭР-1000 из работы [2]. Картограмма заполнения АЗ представлена на рисунке 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.

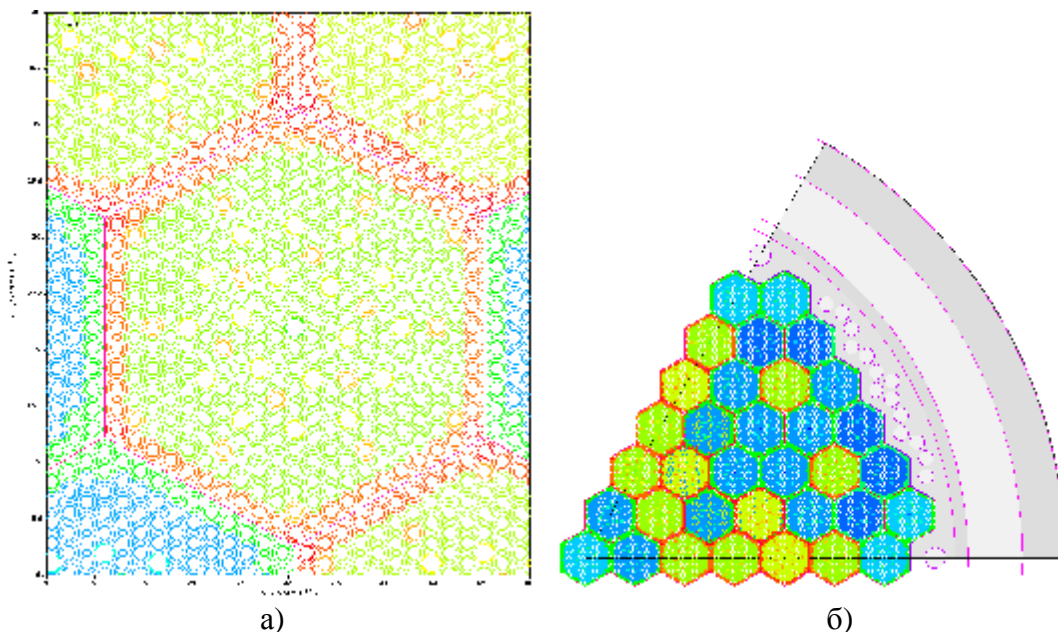


Рисунок 1–(а) Поперечное сечение ТВС и (б) 1/6 картограммы заполнения АЗ.

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 рисунке 2.

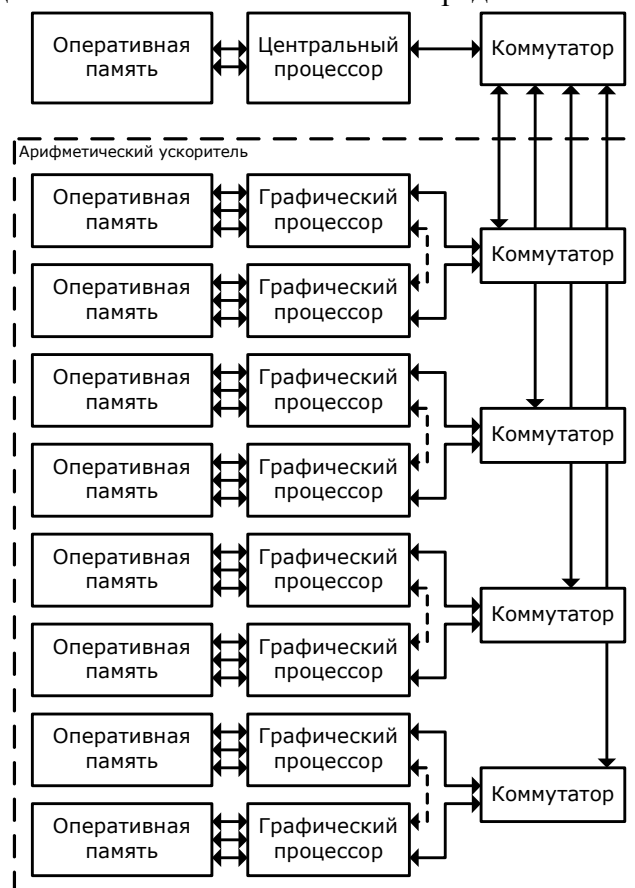


Рисунок 2 – Структурная схема ГВС-10 «Кубань»

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 рисунках 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 таблицах 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 таблице 1 представлено время счета ТВС при задействовании одного ядра универсального процессора.

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

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

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

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.

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

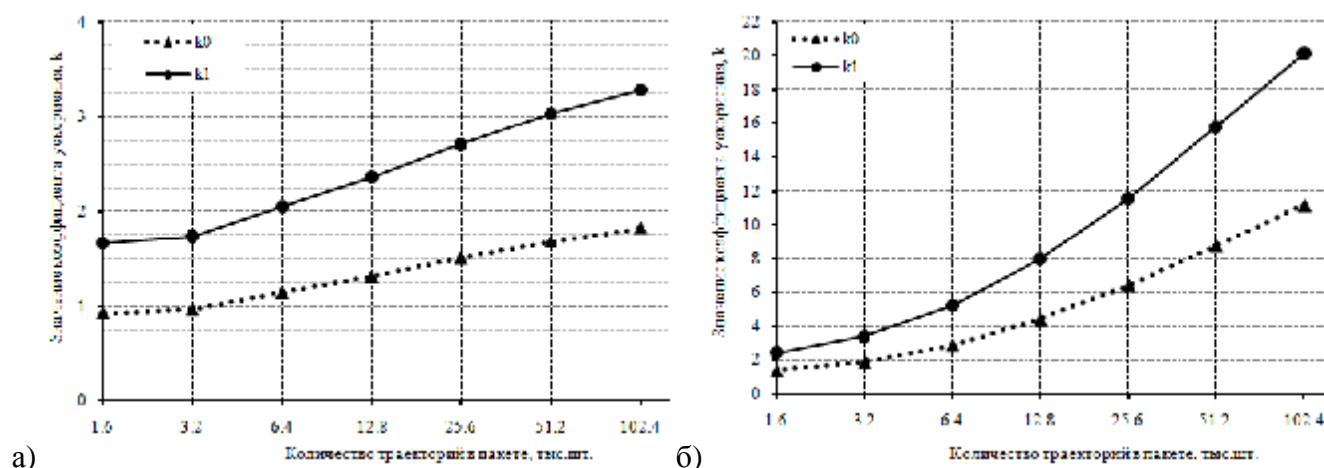


Рисунок 3 – Значения коэффициентов ускорения:

а) всей задачи, б) счетной части (без сортировки)

При количестве траекторий равного 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 таблице 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 таблице 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 рисунке 4 проиллюстрированы значения коэффициентов ускорения при расчете АЗ при различных значениях количества траекторий в пакете.

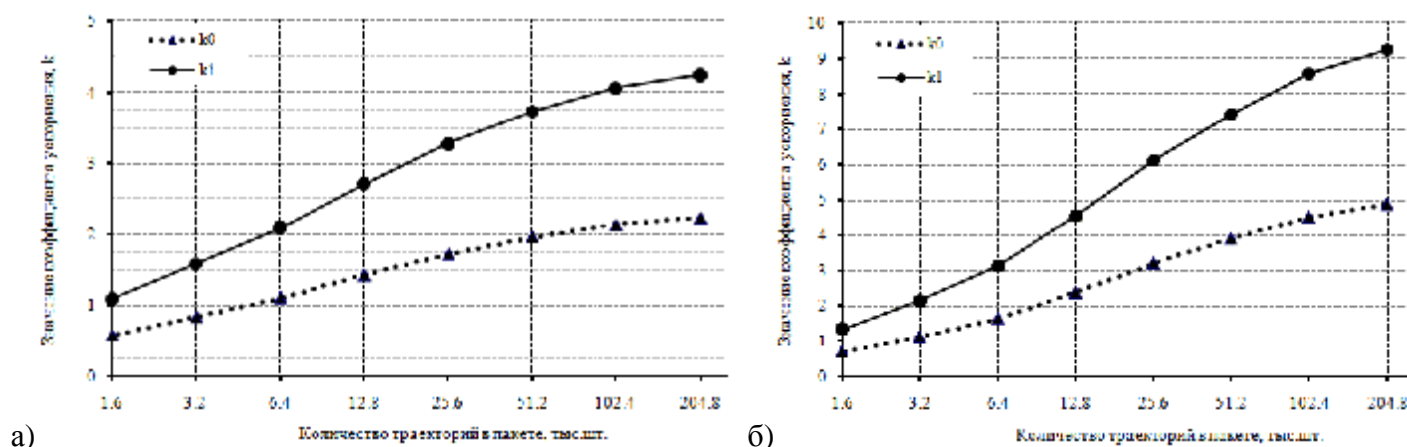


Рисунок 4 – Значения коэффициентов ускорения:
а) всей задачи, б) счетной части (без сортировки)

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».

Список использованных источников

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. Серия Математическое моделирование физических процессов. 2000. № 2. С. 49-52.
2. E.Gomin, M.Kalugin, D.Oleynik. *VVER-1000 MOX Core Computational Benchmark*. OECD 2006, NEA №6088.