

УДК 519.6

**ПРОГРАММНО-АППАРАТНЫЕ КОМПЛЕКСЫ  
НА БАЗЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ  
С АРИФМЕТИЧЕСКИМИ УСКОРИТЕЛЯМИ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ  
МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО И МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ**

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

Представлены результаты исследования возможностей создания программно-аппаратных комплексов на базе вычислительных систем, интегрирующих процессоры архитектуры x86 и арифметические ускорители, предназначенных для моделирования методом Монте-Карло и методом молекулярной динамики при решении специальных классов задач атомной энергетики.

*Ключевые слова:* гибридные вычислительные системы, арифметические ускорители, метод Монте-Карло, метод молекулярной динамики.

**Введение**

Одним из современных направлений развития средств математического моделирования является применение вычислительных систем с арифметическими ускорителями (АрУ), называемых также гибридными системами [1]. Вследствие конструктивных особенностей АрУ эти системы по сравнению с обычными универсальными микропроцессорами позволяют существенно ускорить вычислительный процесс на определенных классах задач. Такими задачами, в частности, являются расчет нейтронно-физических характеристик ядерных энергетических установок методом Монте-Карло [2] и моделирование свойств ядерного топлива и конструкционных материалов реакторов, а также транспортных упаковочных комплексов методами молекулярной (наноуровень) и кластерной (микроуровень) динамики [3].

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

- для расчета методом Монте-Карло критических параметров активных зон ядерных ре-

акторов, мест хранения ядерного топлива, транспортно-упаковочных комплексов для перевозки топлива и других средств обращения с топливом на АЭС, а также проектирования технических объектов атомной энергетики;

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

Известные отечественные программы, предназначенные для решения указанных задач методом Монте-Карло, — ПРИЗМА (РФЯЦ-ВНИИТФ) [4] и MSU (РНИЦ "Курчатовский институт") [5] — реализованы лишь для универсальных процессоров. Данные о реализации программы MCNP (Лос-Аламосская национальная лаборатория, США) [6] для гибридных вычислительных систем отсутствуют.

Зарубежным аналогом комплекса молекулярной динамики является программа Lammps (Сандийская национальная лаборатория, США) [7]. Ее адаптация для АрУ лишь анонсирована.

### Вычислительные системы с АрУ

#### Структура гибридной вычислительной системы и оценки ускорения вычислений.

Гибридная вычислительная система, также именуемая для краткости гибридным вычислителем, содержит  $q$  универсальных процессоров, реализующих MIMD-вычисления, и  $r$  АрУ, каждый из которых выполняет SIMD-вычисления. Структура гибридного вычислителя показана на рис. 1.

Гибридный вычислитель, содержащий одно ядро и один АрУ, назовем элементарным гибридным вычислителем.

Длительность вычислительного процесса, выполняемого гибридным вычислителем, зависит от соотношения длительностей процессов, выполняемых MIMD- и SIMD-компонентами.

Пусть для решения задачи одним универсальным процессором требуется временной интервал длительностью  $T_1$ . Полагаем, что процесс решения этой же задачи элементарным гибридным вычислителем занимает интервал длительностью

$$T_{1,1} = T_M + T_S, \quad (1)$$

где  $T_M = T_1\varphi$  — длительность вычислений, выполняемых универсальным процессором,  $0 \leq \varphi \leq 1$  — доля этих вычислений от всего вычислительного процесса (доля MIMD-фрагмента);  $T_S = (1 - \varphi)T_1/\rho$  — длительность вычислений,

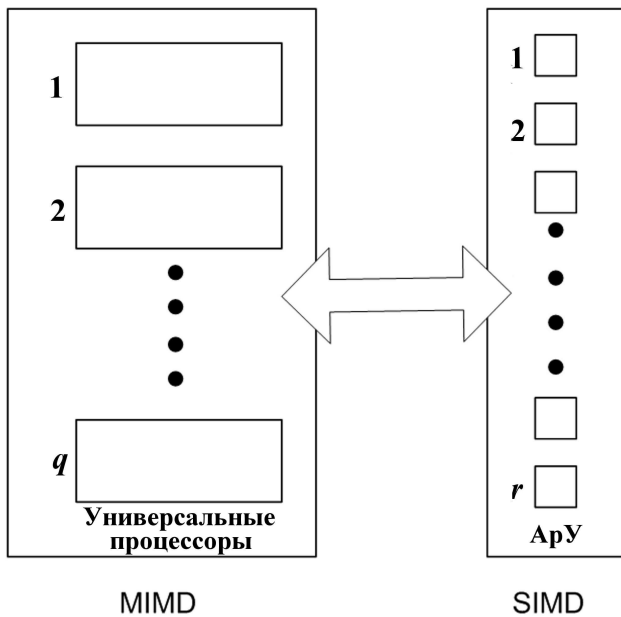


Рис. 1. Структура гибридного вычислителя

выполняемых АрУ,  $\rho > 1$  — коэффициент ускорения по сравнению с универсальным процессором, достигаемый применением АрУ (на SIMD-фрагменте).

Значения коэффициентов ускорения, достигаемых гибридными вычислителями по сравнению с одним процессором в режимах деления и умножения вычислительного процесса (закон Амдала и закон Густафсона), приведены в [8]; их формульные представления даются в табл. 1.

Отметим идентичность этих коэффициентов для обоих режимов при одинаковых количественном и качественном составах вычислителей. Целесообразность увеличения количества ядер либо ускорителей зависит от параметров вычислительного процесса. Как для режима деления, так и для режима умножения целесообразно увеличивать количество ядер, если  $\rho \geq (1 - \varphi)/\varphi$ .

Выбор тех или иных значений  $q$  и  $r$  определяется свойствами вычислительного процесса, в частности, особенностями процессов моделирования методом Монте-Карло и методом молекулярной динамики.

Таблица 1

#### Коэффициенты ускорения $K$ в режиме выполнения умножения/деления

Состав вычислителя	Коэффициент ускорения
$q$ ядер, 1 ускоритель	$K_{q,1} = \frac{q}{\varphi + (1 - \varphi)\frac{q}{\rho}}$ $\lim_{q \rightarrow \infty} K_{q,1} = \frac{\rho}{1 - \varphi}$
1 ядро, $r$ ускорителей	$K_{1,r} = \frac{r}{\varphi r + \frac{1 - \varphi}{\rho}}$ $\lim_{r \rightarrow \infty} K_{1,r} = \frac{1}{\varphi}$
$q$ ядер, $r$ ускорителей, $q > r, \mu = \frac{q}{r}$ — целое	$K_{q,r} = \frac{\mu}{\varphi + (1 - \varphi)\frac{\mu}{\rho}}$
$q$ ядер, $r$ ускорителей, $r > q, \mu = \frac{r}{q}$ — целое	$K_{q,r} = \frac{\mu}{\varphi\mu + \frac{1 - \varphi}{\rho}}$
$q$ ядер, $q$ ускорителей	$K_{q,q} = \frac{q}{\varphi + \frac{1 - \varphi}{\rho}}$

**Параметры экспериментальных образцов вычислительных систем (ЭОВС) с АрУ.** В соответствии с требованиями, предъявляемыми программными комплексами моделирования методом Монте-Карло и методом молекулярной динамики, созданы ЭОВС с АрУ двух типов.

ЭОВС первого типа содержит АрУ Tesla C2050 фирмы NVIDIA; пиковая производительность экспериментального образца 1,588 Тфлопс (64 бит), максимальная потребляемая мощность 1,3 кВт.

ЭОВС второго типа содержит АрУ ATI Radeon HD 5970 фирмы AMD; пиковая производительность образца 1,904 Тфлопс (64 бит), максимальная потребляемая мощность 1,0 кВт.

Преимуществами АрУ фирмы NVIDIA являются архитектурные особенности (меньшее количество потоковых процессоров, большее количество регистров и т. п.), большая емкость оперативной памяти, развитый инструментарий разработки прикладного программного обеспечения. Преимущества АрУ фирмы AMD — сравнительно малые значения удельной стоимости операции и потребляемой мощности.

В табл. 2 приведены значения параметров созданных ЭОВС с АрУ NVIDIA и AMD и аналогичных систем российских и зарубежных фирм.

Базовое системное программное обеспечение (БСПО) ЭОВС с NVIDIA включает набор следующих средств:

- операционную систему (ОС) Windows 2003 Server / Scientific Linux 5.3 [9] с ядром 2.6.27.38;
- систему программирования на языках высокого уровня Fortran, C, C++ INTEL v10.1.018 [10];
- коммуникационную библиотеку с реализацией MPI—MPICH 1.2.5 [11];
- драйвер и средства разработчика для исполнения программ на АрУ: для NVIDIA — CUDA v.2.3 [12], для AMD — ATI Stream SDK [13].

БСПО обеспечивает возможность подключения внешних источников и носителей данных (Ethernet, USB). Для этого в его состав входят ОС и драйверы подключаемых устройств.

Разработанные образцы не уступают анонсированным другими производителями. Удельная цена единицы производительности гибридной системы и мощность, требуемая для этой единицы, примерно на порядок меньше по сравнению с универсальными аналогами. Показатели пиковой производительности, потребляемой мощности и цены для гибридных вычислитель-

Таблица 2

**Параметры вычислительных систем с ускорителями**

Параметр	ЭОВС, NVIDIA	ЭОВС, AMD	Arbyte SC, Россия	Supermicro, США	Colfax, США
Тип универсального процессора	Intel i7920, 4 ядра	AMD	Intel Xeon 5500	Intel Xeon 5500	Intel Xeon 5500
Количество процессоров	1	1	2	2	2
Тип АрУ	Tesla C2050	AMD Radeon HD 5970	Tesla C2050	Tesla C2050	Tesla C2050
Количество АрУ	3	2	3	4	8
Теоретическая пиковая производительность, Гфлопс/с (64 разряда)	1565	1904	1625	2220	4280
Оперативная память универсального процессора, Гбайт	24	8	24	96	144
Оперативная память АрУ, Гбайт	9	4	9	12	24
Макс. потребляемая мощность, Вт	1300	1000	1300	1500	2400
Система охлаждения	Жидкостно-воздушная		Воздушная	Воздушная	Воздушная

ных систем лучше по сравнению с универсальными аналогами.

### **Параметры программно-аппаратного комплекса моделирования методом Монте-Карло**

Метод Монте-Карло является одним из основных методов для определения эффективного коэффициента размножения нейтронов активных зон ядерных реакторов, обоснования радиационной и ядерной безопасности транспортных упаковочных комплектов для перевозки и длительного хранения отработанного ядерного топлива АЭС.

В созданном экспериментальном образце программно-аппаратного комплекса Монте-Карло задействованы АрУ Tesla C2050 фирмы NVIDIA. Программное обеспечение ориентировано на трехмерное потвэльное описание активных зон реакторов.

В процессе создания комплекса с целью обеспечения его эффективности:

- получены емкости оперативной памяти АрУ, требуемые для решения методом Монте-Карло задач с различной размерностью;
- проведен анализ длительности выполнения различных фрагментов вычислительного процесса для определения целесообразности задействования АрУ на этих фрагментах;
- показано, что ускорение вычислительного процесса возрастает с увеличением размера задачи;
- разработаны соответствующие алгоритмы, написаны и отлажены программы для АрУ, реализующие эти алгоритмы.

Подробное изложение перечисленных аспектов приведено в докладе [14] и будет опубликовано в следующем выпуске журнала.

Проведены тестовые расчеты моделирования тепловыделяющей системы и активной зоны реактора ВВЭР-1000. Расчеты выполнялись на элементарной гибридной вычислительной системе, содержащей одно ядро универсального процессора и один АрУ. Активная зона реактора рассчитывалась с учетом ее пространственной симметрии. Одна шестая часть зоны включает 28 тепловыделяющих систем 7 различных типов с 331 твэлом в каждой тепловыделяющей

системе. Результаты расчетов совпадают с эталонными.

Длительность вычислительного процесса, выполняемого элементарной гибридной системой, для определенного размера задачи меньше длительности вычислительного процесса, выполняемого ядром универсального процессора, в 3–4,4 раза для расчета эффективного коэффициента размножения нейтронов ТВС и в 2,7–3,7 раза для расчета эффективного коэффициента размножения нейтронов активной зоны реактора ВВЭР-1000.

Дополнительные (пока незадействованные) возможности ускорения вычислений обусловлены модернизацией сортировки данных и декомпозицией вычислительного процесса.

Новизна результатов определяется отсутствием отечественных программ для гибридных вычислительных систем, позволяющих моделировать методом Монте-Карло параметры ядерных реакторов и других объектов атомной энергетики, для которых характерна сложная постановка расчетов. В частности, к числу особенностей разработанной программы следует отнести возможность моделирования в весьма сложных трехмерных геометриях, включающих большое количество неоднородных по составу физических областей.

### **Параметры программно-аппаратного комплекса моделирования методом молекулярной динамики**

Одним из основных инструментов изучения процессов упругопластики и поведения материалов, находящихся в условиях радиационного воздействия, является моделирование методом молекулярной динамики. Применение этого метода требует вычисления значений парных и многочастичных потенциалов.

Экспериментальный образец программно-аппаратного комплекса молекулярной динамики создан на базе вычислительной системы с АрУ Tesla C2050 фирмы NVIDIA. В процессе разработки программного обеспечения:

- проведен анализ длительности выполнения различных фрагментов вычислительного процесса;
- оптимизированы дисциплина обращения к памяти АрУ и массивы данных;
- показано, что ускорение вычислительного процесса возрастает с увеличением размера задачи;

– разработаны соответствующие алгоритмы, написаны и отлажены программы для АрУ, реализующие эти алгоритмы.

Особенности реализации программного обеспечения были изложены в докладе [15] и будут опубликованы в следующем выпуске журнала.

Проведены тестовые расчеты процессов развития радиационных каскадов с парными и многочастичными потенциалами, предназначенными для молекулярно-динамического моделирования свойств материалов тепловыделяющих элементов. Расчеты выполнялись на элементарной гибридной вычислительной системе. Результаты расчетов совпадают с эталонными.

Длительность вычислительного процесса, выполняемого элементарной гибридной системой, в 9–15 раз меньше (в зависимости от размера задачи) по сравнению с длительностью процесса, выполняемого ядром универсального процессора.

Новизна результатов определяется тем, что для гибридных вычислительных систем разработаны эффективные алгоритмы моделирования методом молекулярной динамики процессов, определяющих свойства конструкционных материалов, подвергающихся интенсивным радиационным воздействиям.

### Заключение

Область рекомендуемого внедрения описанных в данной статье программно-аппаратных комплексов — НИИ и КБ, занимающиеся проектированием объектов атомной энергетики, в частности, расчетным обоснованием режимов работы реакторов (включая аварийные режимы) и решением проблем создания композитных материалов. Перспективы внедрения программно-аппаратных комплексов определяются высокой производительностью, низкими энергопотреблением и ценой, возможностью эксплуатации в рабочем помещении без применения специальных систем электропитания и микроклимата. Разрабатываемые средства характеризуются новизной и уникальностью.

Областью применения создаваемых программно-аппаратных комплексов является решение задач математического моделирования объектов атомной энергетики, в частности, расчет критических параметров активных зон реакторов с использованием трехмерного потвального описания их геометрии, а также описание свойств ма-

териалов, находящихся в условиях мощного радиационного воздействия.

Экономическая эффективность результатов подтверждается не только техническими параметрами (производительность, мощность), конкурентоспособной ценой создаваемых вычислительных систем, не требующих специально обустроенных систем жизнеобеспечения, но и созданием комплексных программно-аппаратных средств моделирования сложных физических процессов. Их применение позволит обеспечить снижение сроков разработки и проектирования ядерных энергетических установок.

### Список литературы

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. et al.* Code TDMCC for Monte-Carlo computations of spatial reactor cores kinetics // *Monte-Carlo 2005 Topical Meeting*. Chattanooga, Tennessee. April 17–21, 2005.
3. *Воронин Б. Л., Ерофеев А. М., Копкин С. В. и др.* 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.
4. *Кандиев Я. З., Серова Е. В.* Меченые частицы в расчетах переноса излучения методом Монте-Карло по программе ПРИЗМА // *Атомная энергия*. 2005. Т. 98. Вып. 3. С. 386–393.
5. *Gomin E., Kalugin M., Oleynik D.* VVER-1000 MOX Core Computational Benchmark. Specification and Results. France, OECD Nuclear Energy Agency, 2006.
6. MCNP — A General Monte-Carlo N-Particle Transport Code. Version 4a / Ed. by J. F. Briesmeister. Los Alamos National Laboratory Report LA-12625-M. 1993.
7. Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator. <http://lammmps.sandia.gov>.
8. *Степаненко С. А.* Оценки ускорения вычислений гибридными системами // *Пленарные*

- доклады Пятой межд. конф. "Параллельные вычисления и задачи управления" (РАСО 2010). Москва, 26—28 октября 2010 г. М.: Институт проблем управления им. В. А. Трапезникова РАН, 2010. С. 61—71.
9. Официальный сайт разработчиков Scientific Linux. <http://www.scientificlinux.org/>.
  10. Компиляторы Intel. <http://software.intel.com/ru-ru/intel-compilers/>.
  11. Коммуникационная библиотека MPICH. <http://unix.mcs.anl.gov/mpi/mpich1/>.
  12. CUDA Zone. [http://nvidia.com/object/cuda\\_home.html](http://nvidia.com/object/cuda_home.html).
  13. ATI Stream SDK. <http://developer.amd.com/Downloads/>.
  14. *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 // XII Межд. семинар "Супервычисления и математическое моделирование". Саров, 11—15 октября 2010 г.
  15. *Крючков И. А., Копкин С. В.* Адаптация алгоритма расчета взаимодействия для многочастичного потенциала MEAM на гибридных вычислительных системах // XI Межд. семинар "Супервычисления и математическое моделирование". Саров, 5—9 октября 2009 г.
- Статья поступила в редакцию 12.01.11.
-