

文章编号: 2096-1618(2024)01-0037-06

MOC/SN 耦合三维中子输运程序的并行优化

何 琴¹, 杨 昊^{1,2}, 周世杰², 周 航¹, 文 武¹

(1. 成都信息工程大学计算机学院, 四川 成都 610225; 2. 电子科技大学信息与软件工程学院, 四川 成都 610054)

摘要: KYCORE 程序是中国核动力研究设计院开发的径向特征线法与轴向离散纵标法耦合三维中子输运程序。KYCORE 程序采用几何区域并行方法, 可并行计算不同区域的数据。但由于其庞大的计算量以及内存占用量, KYCORE 基于几何区域并行取得的时间增益不高, 且程序无法再对区域中输运模块二级并行。MPI 二维拓扑通信结构将不同维度的计算划分至不同通信域, 适用于二维计算问题。将其应用至 KYCORE 程序, 使几何区域和输运模块独立开, 实现了在不破坏原有一维几何区域并行结构的情况下, 可以进一步实现区域内部输运模块即二维维度上的并行优化。针对输运模块中的特征线法求解模块, 特征线两级并行优化算法自适应地为各个进程划分能群计算任务, 且各个进程动态负载均衡。针对 C5G7 基准例题测试, 对于不同大小的算例, 输运特征线法模块的并行效率达 70% 及以上, 测试表明该结构与方法取得了明显的加速效果, 具有精确性、高可扩展性。

关键词: KYCORE 程序; MPI 二维拓扑通信结构; 特征线并行算法

中图分类号: TP301.6

文献标志码: A

doi: 10.16836/j.cnki.jcuit.2024.01.007

0 引言

所有裂变反应堆内的主要核过程都是中子与核反应堆内各种核素的相互作用过程。而中子输运理论^[1]是反应堆理论和反应堆计算方法发展的基础。输运方程在反应堆物理、天体物理、大气辐射输运中都有广泛的应用。近年来, 对输运方程的求解从二维逐渐发展为三维, 求解三维输运方程相对二维来说求解方法更为复杂, 因其求解的复杂性导致程序的计算量以及内存占用量相对二维输运都更加庞大, 所以计算三维输运程序的计算效率会下降。面对庞大的计算量以及内存占有量, 仅从数学算法上提高计算效率是远远不够的。因此三维中子输运程序不能仅限于单核处理器上, 并行算法是输运方程求解必须要考虑的。

KYCORE^[2]程序是中国核动力研究设计院开发的径向特征线法与轴向离散纵标法耦合三维中子输运程序。KYCORE 是目前可工程化应用于三维中子输运计算中精度最高的方法之一。KYCORE 使用径向特征线方法(method of characteristics, MOC)与轴向离散纵标法(discrete-ordinates method, SN)的三维中子输运耦合, 并通过粗网有限差分(coarse mesh finite difference, CM-FD)^[3-5]首次实现了 MOC 与 SN 耦合的快速收敛, 推导了任意二维几何的泄漏项计算方法, 给出高效率 2D MOC/1D SN 耦合计算的计算流程。KYCORE 同时具有三维计算近似少、几何适应性强和精度高、计算效率高

的特点, 加速效果明显优于国外同类软件^[2]。

由于 KYCORE 求解的复杂性导致程序的计算量以及内存占用量相对二维输运都更加庞大, 虽然采用了几何区域^[6-8]并行的做法但达不到对三维中子输运程序的时间要求。KYCORE 程序各个区域内部的输运模块依然是串行计算, 还有较大优化空间。为进一步提高 KYCORE 程序计算效率, 使 KYCORE 能有效地部署于国产高性能计算机, 设计了 MPI (message passing interface) 二维拓扑通信结构。该结构可将不同维度的计算独立开, 使各个维度的计算更具独立性、操作性, 适用于二维计算问题的并行。将 MPI 二维拓扑通信结构应用至 KYCORE 程序, 可将区域计算部分视为一维计算, 区域中的输运计算视为二维计算。该结构实现了在不破坏原有一维几何区域并行结构的情况下, 可以进一步地实现区域内部输运模块即二维维度上的并行优化, 且在进行输运模块即二维并行计算时, 不再考虑输运模块和几何区域模块之间的数据关联。

特征线法是求解双曲型偏微分方程的一种近似计算方法。特征线法常用于输运方程的求解, 但由于输运方程的复杂性, 其求解时间较长。针对上述问题, 提出特征线两级并行优化算法, 算法使用 MPI (message passing interface)^[9-10]和 OpenMP (open multi-processing)^[11]混合编程, 充分发挥了 SMP 集群的计算能力, 且该算法能针对不同堆芯输入自适应地为各个进程划分任务, 各个进程均动态负载均衡^[12-15]; 此外, 采用非阻塞方式进行进程间的数据通信, 尽可能减少通信时

区域计算部分视为一维计算,区域中的输运计算视为二维计算。该结构实现了在不破坏原有一维几何区域并行结构的情况下,可以进一步实现区域内部输运模块即二维维度上的并行优化,且在进行输运模块即二维的并行计算时,不再考虑输运模块和几何区域模块之间的数据关联。前后的架构框架如图 2 所示。

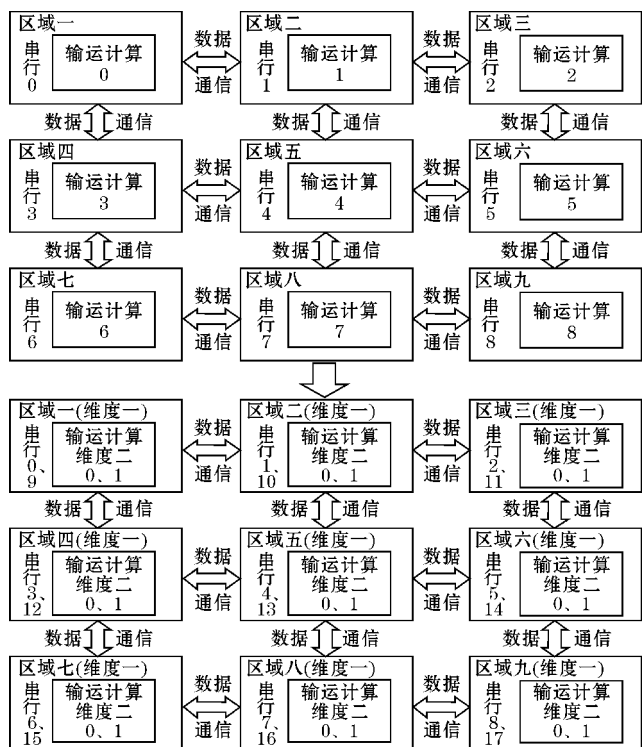


图 2 KYCORE 前后架构对比

原来程序是几何区域并行,区域内部的输运计算和区域计算在同一个通信域内,并且并行核数只能是区域个数那么多,在这样的情况下,输运模块的并行无法开展。应用 MPI 二维拓扑通信结构后,将维度一和维度二分别创建多个通信域,使区域和输运模块的通信域分割开。同时,对几何区域中计算任务相同的进程分为输运部分同一通信组,输运中的同一通信组的进程就可以用于后续的并行扩展计算。图 2 中,在区域一中执行相同任务的进程 0、进程 9 在二维维度上即输运模块为同一通信组的进程 0、进程 1;输运模块中的进程 0、进程 1 可做后续输运任务分配。此后,所有的数据通信以及任务划分等都将在同一通信组内展开。

2.2 特征线两级并行优化算法

MPI 和 OpenMP 是两种常用的并行计算编程模型,都可以用于实现并行计算。MPI 是一种消息传递编程接口,用于在多个计算机之间进行通信。它可以用于实现分布式计算,即多台计算机之间进行并行

计算。OpenMP 是一种多处理编程模型,用于在单台计算机上的多个处理器之间进行并行计算。

特征线两级并行优化算法采取 MPI+OpenMP 混合方法实现特征线法的并行计算。在 MPI 和 OpenMP 混合编程中,可以将 MPI 用于实现分布式计算,而将 OpenMP 用于实现在单台计算机上的多处理器之间的并行计算。这样,就可以利用 MPI 和 OpenMP 各自的优势,实现更为高效的并行计算。应用到 KYCORE 程序上,使输运模块中的 MOC 计算中的能群和角度计算实现两级并行,如图 3 所示。

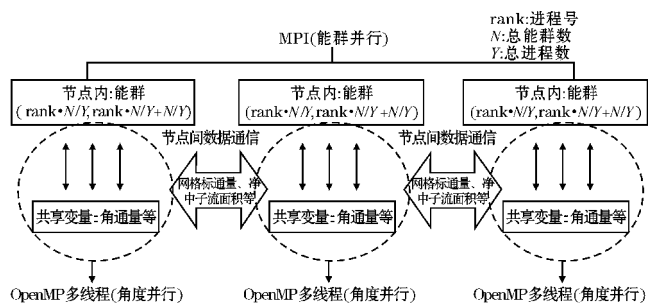


图 3 特征线两级并行优化算法

能群之间采用 MPI 的方式并行,每个进程计算的能群起始为 $(\text{rank} \cdot \frac{N}{Y}, \text{rank} \cdot \frac{N}{Y} + N/Y)$, 每个进程的能群任务量为

$$T_1 = \frac{N}{Y} \quad (1)$$

$$T_2 = \frac{N}{Y} + 1 \quad (2)$$

当 $N\%Y$ 为 0 时,每个进程的任务量都为 T_1 ; 当 $N\%Y$ 为 R 时,那么前 R 个进程的任务量为 T_2 , 后 $N-R$ 个进程的任务量为 T_1 。

算法能够自适应地为各个进程划分能群任务,不是手动设置任务量,而是通过总的核心数和能群数计算得来;且各个进程动态负载均衡,各进程的任务量差距不会超过一个单位的计算任务。各个进程计算完成后,因其计算的能群号不一致,计算所得的网格标通量、净中子流面积等也不一致;为了程序后面串行部分的正确进行,数据通信必不可少。考虑到程序的内存需求较大,MPI 数据通信也会消耗时间,随着输入数据量的增大,数据通信占比会逐渐递增,程序效率可能会降低。因此,本文使用非阻塞通信的方式对需要通信的数据进行进程间的传递,使通信变量在被程序下次运用之前都能进行通信,其他的计算也能同时进行;尽可能地屏蔽数据通信的时间以期望实现计算与通信的重叠。角度计算基于 OpenMP,因其内存共享的特性,不需要额外再做数据通信。

3 测试结果与分析

3.1 加速比与并行效率

在计算机科学中,程序的加速比是一种评估程序性能的指标,它表示使用加速算法后程序执行速度与不使用加速算法的执行速度之间的比值。程序的加速比可以通过使用下面的公式计算:

$$s = T_{\text{串行}} / T_{\text{并行}}$$

(3)

程序加速比可以用于评估程序加速的程度。加速比为 1,则程序没有加速;加速比大于 1,则程序加速;加速比小于 1,则程序变慢。

在实际应用中,程序加速比的计算通常需要在相同的硬件平台上,对相同的数据集使用相同的算法,以确保评估结果的准确性。程序加速比的评估是一个复杂的问题,需要考虑多种因素,包括硬件资源(如处理器速度和内存容量)、软件资源(如编译器优化和并行处理)和数据集的特征(如数据大小和复杂度)。一般,随着问题规模变大,加速比会增加。但根据阿姆达尔定律^[16],加速比总是受限的。

程序的并行效率是指程序在并行计算环境下的性能表现:

$$E = s / p$$

(4)

式中: s 为程序的加速比, p 为程序运行核心数。KY-CORE 程序并不是纯串行的程序,式(4)不能准确地反映 KYCORE 程序二次并行后的并行效率。使用强可扩展并行效率:

$$E = (n_1 \cdot t_1) / (n_2 \cdot t_2)$$

(5)

式中: n_1 为二次并行前的核心数, t_1 为二次并行前的运行时间; n_2 为二次并行后的核心数, t_2 为二次并行后的运行时间。并行效率由多个因素决定:硬件资源的利用效率,程序的架构和代码实现,以及任务分配和协调方面的策略。最终的并行效率决定了程序在并行计算环境中的速度和可靠性。

3.2 C5G7 基准例题

C5G7 三维基准例题由 OECD/NEA 发布,是一种核燃料热力学模型,用于模拟核燃料燃烧过程中的中子输运,在国际上被广泛用于检验计算程序求解非均匀堆芯的能力。

C5G7 例题是核工业和核燃料循环研究领域的重要工具,帮助研究人员评估不同的核燃料热力学模型和核能计算程序。它们还被用于开发新的核燃料热力学模型和核能计算程序,以提高核能系统的安全性和效率。C5G7 例题通常包括一系列标准的核燃料燃烧情形,如多层温度分布、不同的中子束流密度和能量谱、不同的核燃料形状和布置方式、不同的冷却条件等。通过运行 C5G7 例题,可以对核燃料燃烧过程中的中子输运行为进行详细分析,从而更好地了解核能系统的性能。

本文基于 C5G7 三维基准例题来验证程序的加速比、并行效率以及正确性,使用 3 种不同规模以及不同核数的算例进行测试,算例信息如表 1 所示。

表 1 算例信息

算例	区域数	轴向层数	网格数	能群数	极角数
C5G7-I	9	1	9248	45	8
C5G7-II	64	18	9248	45	8
C5G7-III	64	18	9248	8	8

根据 MPI 二维拓扑通信结构可知,当 C5G7-I 几何区域数为 9、程序输入总核心数为 9 时,各个区域内输运模块实际核心数为 1;几何区域数为 9、程序输入总核心数为 27 时,各个区域内输运模块实际核心数为 3。同理,C5G7-II、C5G7-III 几何区域数为 64、程序输入总核心数为 192 核心时,区域内输运模块实际核心数为 3。通过 3 个不同规模的算例、1~9 个核心数对输运模块中 MOC 子模块的测试,得出 MOC 子模块计算时间和加速比如表 2 所示。

表 2 并行后 MOC 运行时间

输运核数	C5G7-I		C5G7-II		C5G7-III	
	时间/s	加速比	时间/s	加速比	时间/s	加速比
1	306.60	1	5671.66	1	9601.62	1
3	87.1	3.52	1972.23	2.88	4144.23	2.32
5	62.31	4.92	1378.29	4.11	4091.34	2.35
7	42.8	7.16	1138.97	4.98	1547.39	6.21
9	31.29	9.80	943.05	6.01	1525.67	6.29

随着输运模块核心数的增加,不同算例时间相比串行运行均有明显的提升。图 4 直观展示了 MOC 子

模块的加速比和并行效率。

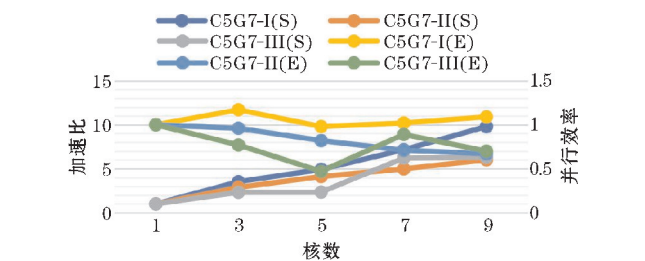


图 4 MOC 子模块的加速比以及并行效率

由表 2 和图 4 可知,随着核数的增加,加速比呈线性增长趋势,比较接近理想的线性加速比;并行效率保持平稳趋势,具有强可扩展性。KYCORE 程序的输运模块有了明显的加速效果。

K_{eff} 值为有效增值因数,定义为新生一代的中子数和产生它的直属上一代中子数之比。 K_{eff} 值是 KYCORE 程序的重要求解之一。表 3 为并行前后 KYCORE 程序 K_{eff} 值对比。

表 3 并行前后的 K_{eff} 值对比

算例	并行前 K_{eff} 值	并行后 K_{eff} 值
C5G7-I	1.017555736555	1.017555736555
C5G7-II	1.104127038916	1.104127038916
C5G7-III	1.241650770689	1.241650770689

由表 3 可知,并行前后 K_{eff} 值精度不变,证实本文提出的 MPI 二维拓扑通信结构以及特征线两级并行优化算法无精度损失。经以上性能以及正确性测试表明,本文基于 MPI 二维拓扑通信结构划分的特征线两级并行优化算法具有高精度性以及强可扩展性。

4 结束语

针对 KYCORE 程序耗时长、输运模块无法扩展并行等问题,提出了 MPI 二维拓扑通信结构,该结构对不同维度创建不同通信域以及通信组,可应用于二维问题并行计算,无须额外进行组间通信。将其运用于以实现区域分解并行的 KYCORE 程序后,KYCORE 程序区域内部的输运模块能够得到多余的核心进行并行扩展优化。在此基础上,提出特征线两级并行优化算法,该算法能够自适应地划分特征线能群、角度任务,且满足动态负载均衡。通过不同规模算例、输运模块 1~9 核数、程序 9~576 总核心数的测试,表明二次并行后的 KYCORE 程序无任何精度损耗;程序随着核数的增加加速比大致呈线性增长,并行效率也保持在 70% 左右。以上测试数据表明,MPI 二维拓扑通信结构以及优化算法具有高扩展性、高精度以及大规模并行计算能力。

参考文献:

[1] Mokhtar-Kharroubi M. Mathematical topics in neutron transport theory: new aspects [M]. World Scientific, 1997.

[2] 唐霄,李庆,柴晓明,等. MOC/SN 耦合三维中子输运程序 KYCORE 开发与初步验证[J]. 强激光与粒子束, 2017, 29(3): 5.

[3] Zhang G, Li Z, Liu J. A linearized coarse mesh finite difference preconditioner for the within-group Krylov subspace iteration based on two-dimensional method of characteristics [J]. Annals of Nuclear Energy, 2020, 151.

[4] Masiello E. "On the fly" stabilization of the Coarse-Mesh Finite Difference acceleration for multidimensional discrete-ordinates transport calculations [J]. Journal of Computational Physics, 2018, 373: 1-27.

[5] Shen W. On the better performance of the coarse-mesh finite-difference method for CANDU-type reactors [J]. Annals of Nuclear Energy, 2012, 46: 169-178.

[6] Shapira Y. Domain decomposition multigrid for unstructured grids [R]. Los Alamos National Lab (LANL), Los Alamos, NM (United States), 1997.

[7] Toselli A, Widlund O B. Domain Decomposition Methods—Algorithms and Theory [M]. 北京: 科学出版社, 2006.

[8] Zhao J, Lianghui P, Zhaoyuan L, et al. Calculation and Analysis of C5G7 Benchmark by SN2D Code [J]. Atomic Energy ence & Technology, 2013, 47 (增刊).

[9] Forum T M. MPI: a message passing interface [M]. Oregon Graduate Institute School of Science & Engineering, 1994.

[10] Gropp, Lusk W, Skjellum E, et al. Using MPI-Portable Parallel Programming with the Message Passing Interface 2e [J]. scientific programming, 2014, 5(3): 275-276.

[11] Chandra R, Dagum L, Kohr D, et al. Parallel Programming in OpenMP [M]. Morgan Kaufmann Publishers, 2001.

[12] Hoskin N E, Abbott M B. An Introduction to the Method of Characteristics [J]. Mathematical Gazette, 1968, 52(380): 207.

- [13] Ganapol B D. A more efficient implementation of the discrete-ordinates method for an approximate model of particle transport in a duct[J]. *Annals of Nuclear Energy*, 2015, 86:13–22.
- [14] Sayyadikord Abadi R, Shojaei A F, Tatafei F E, et al. Theoretical Study of Octreotide Derivatives as Anti-Cancer Drugs using QSAR, Monte Carlo Method and formation of Complexes[J]. *Russian Journal of Physical Chemistry B*, 2022, 16(1): 127–137.
- [15] Karpeev A. Dynamic load balancing algorithm for continuum mechanics problems with essential redistribution of workloads among the processes[J]. *Journal of Physics: Conference Series*, 2022, 2154(1):12007.
- [16] Pacheco P. An introduction to parallel programming[M]. Elsevier, 2011.

Parallel Optimization of MOC/SN Coupled Three-Dimensional Neutron Transport Program

HE Qin¹, YANG Hao^{1,2}, ZHOU Shijie², ZHOU Hang¹, WEN Wu¹

(1. College of Computer Science, Chengdu University of Information Technology, Chengdu, 610225, China; 2. School of Information and Software Engineering, University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu, 610054, China)

Abstract: KYCORE program is a three-dimensional neutron transport program developed by Nuclear Power Research Institute of China, which is coupled with radial characteristic line method and axial discrete longitudinal scale method. KYCORE program adopts geometric domain parallel method, which can compute data of different domains in parallel. However, due to its huge computational load and memory occupation, the time gain obtained from KYCORE based on geometric domain parallelism is insufficient, and the program can no longer parallel the transport module level in the domain. To address this issue, MPI 2D topological communication structure divides the computation of different dimensions into different communication domains, which is suitable for 2D computation problems. By applying it to KYCORE program, the geometric domain and the transport module become independent, and the parallel optimization of the transport module within the domain, namely the two-dimensional dimension, can be further realized without destroying the original parallel structure of the one-dimensional geometric domain. For the method of characteristics module in the transport module, the two-level parallel optimization algorithm adaptively divides the energy group computing tasks for each process, each process dynamically balances the load. Finally, for the C5G7 benchmark example test, the parallel efficiency of the transport of method of characteristics module reaches 70% or more for the cases of varying sizes.

Keywords: KYCORE program; MPI 2D topology communication structure; parallel algorithm of method of characteristics