МОДЕЛИ ПОКРЫТИЯ ДЛЯ ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАЗЛОЖЕНИЯ В ПРОГРАММЕ AMTRAN

Джон Комптон и Кристофер Клаус

Ливерморская национальная лаборатория им. Лоуренса

Представлено на совместную российско-американскую конференцию пяти лабораторий по вычислительной математике и физике

Вена, 2005 г.

UCRL-PRES-212696

Данная работа выполнена при поддержке Министерства энергетики США Ливерморской национальной лабораторией им. Лоуренса Университета штата Калифорния по контракту № W-7405-Eng-48.

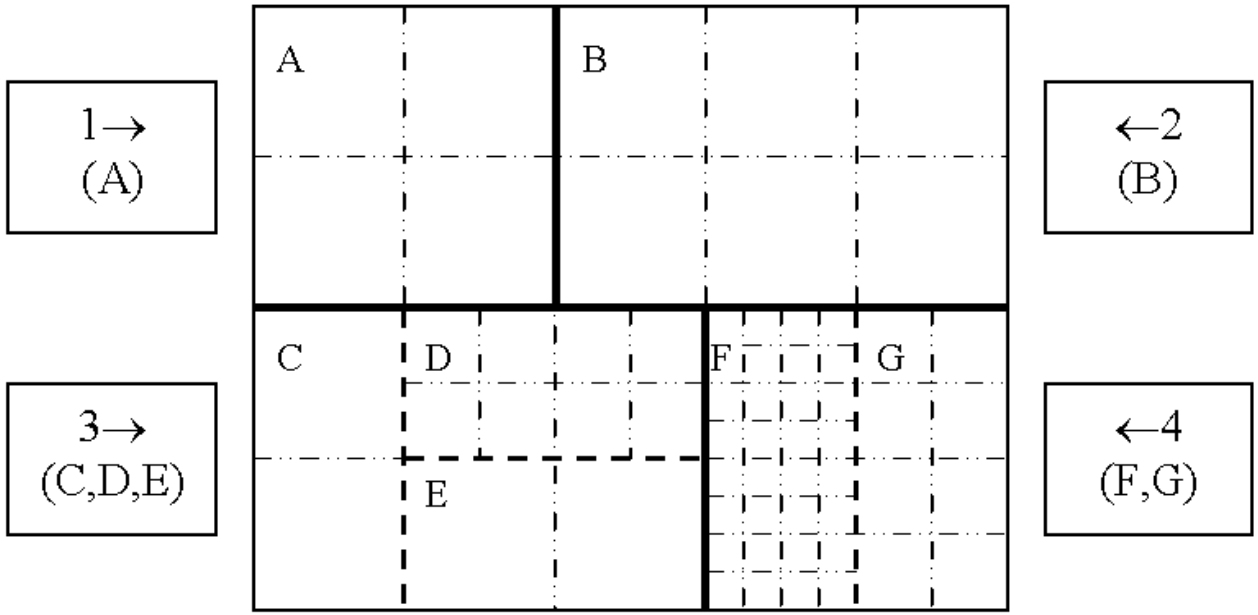
Обзор программы AMTRAN

- Программа AMTRAN является детерминированной (Sn) программой для расчета переноса нейтронов.
- Расчеты выполняются на наборе декартовых конечно-элементных сеток.
- Используются сетки с различными шагами, определяемыми локальным значением средней длины свободного пробега нейтронов.
- Стационарное ур-ние переноса имеет след. форму: $\vec{\Omega} \bullet \vec{\nabla} \Psi_g^m + \sigma_{tot} \Psi_g^m = S(\psi)$
- Оно решается с помощью набора сопряженных уравнений переноса для группы одинаковых энергий, каждое из которых может быть решено параллельно (напр., 32 отдельных группы энергии).
- Далее оно дискретизируется по углам, и каждое из полученных при этом уравнений может решаться независимо схожим образом (обычно от 3 до 16 углов).
- В нашей версии группы энергии распределяются между различными процессорами, а углы распределяются между различными потоками.
- Наиболее существенный остающийся потенциальный источник параллелизма заключается в пространственном разложении областей (теоретически неограниченно, в настоящее время реализовано для 512 областей).

Определения

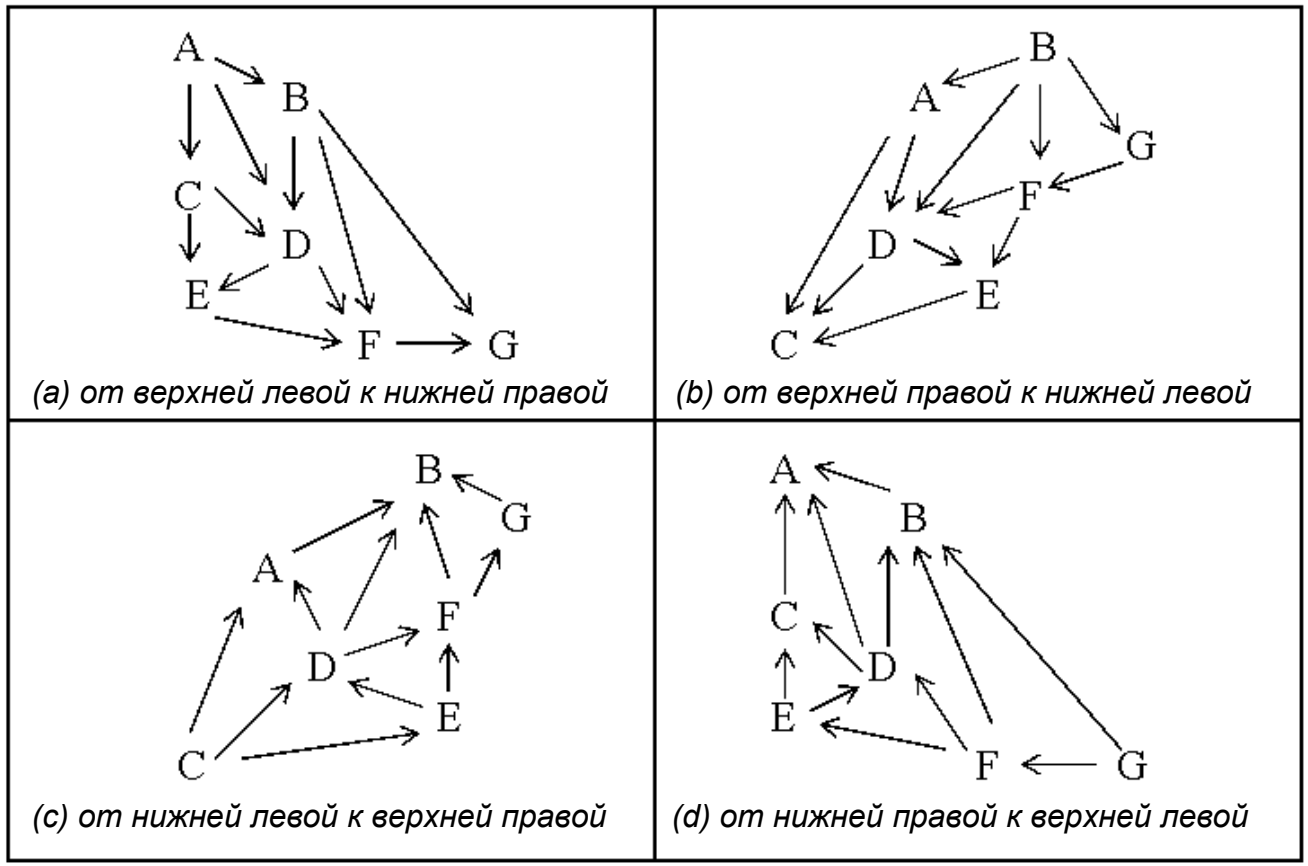
- Сетка: прямоугольная призма (блок), разделенный на отдельные зоны в соответствии с однородной декартовой сеткой.
- Область: набор сеток, заполняющий прямоугольную призму (блок), которая представляет собой часть моделируемого физического пространства.
- Главный класс («мастер-класс»): класс эквивалентности областей, расположенных на одном процессоре или параллельно на группе процессоров.
- Проход: расчет для сетки, связанный с направлением (+1 или -1 для каждой из декартовых осей).
- Под-итерация: наименьшая единица (состоящая из нескольких проходов), которая может быть выполнена без обмена сообщениями между процессорами.
- Итерация: набор под-итераций (в промежутке между которыми происходит обмен сообщениями), при котором в каждой области выполняются проходы во всех возможных направлениях.
- Цикл: набор итераций, сходящийся к решению.

Простой пример разбиения для двумерной области



Процессор	Главный класс	Области	Сетки	Группы энергии
1	1	1,4	A,F,G	a,b
2		1,4	A,F,G	c,d
3	2	2	B	a,b
4		2	B	c,d
5	3	3	C,D,E	a,b
6		3	C,D,E	c,d

Пример зависимости проходов (соотношения предшествования) для семи сеток в четырех областях



- В верхней левой и нижней правой клетках показаны обратные зависимости.
- Аналогичные зависимости показаны в нижней левой и верхней правой клетках.

Упрощающие предположения

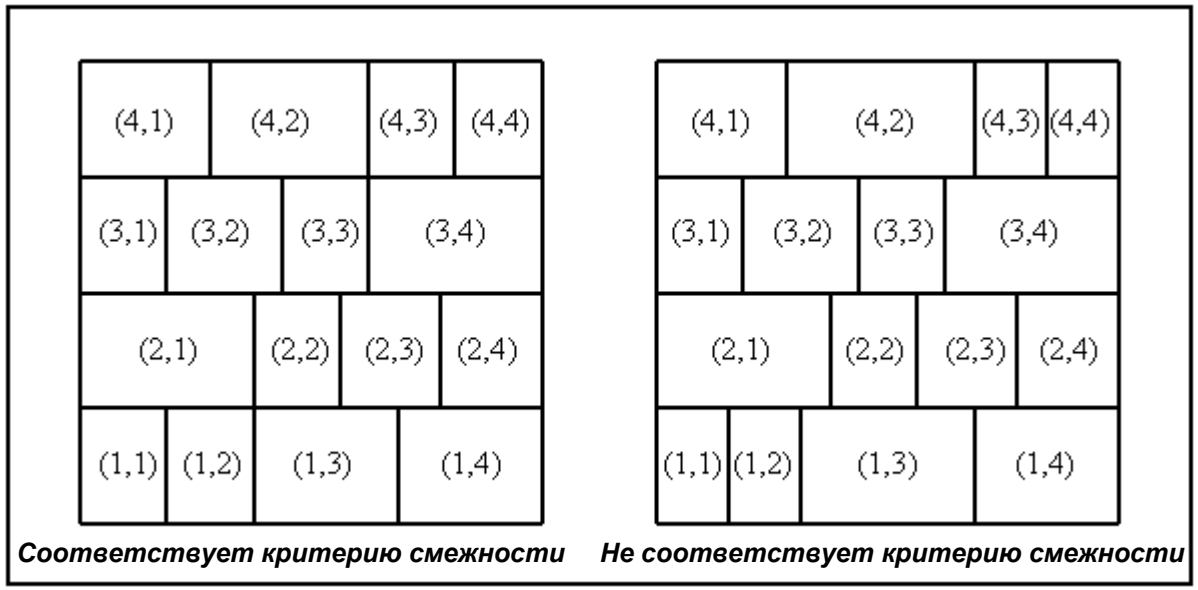
- Цель заключается в получении набора канонических конфигураций с известными свойствами.
- Все сетки в области рассматриваются как единая вычислительная единица без особых свойств.
- Разделение областей выполняется в строгой последовательности для получения однородного второго порядка по каждой оси.
- Любая пара процессоров либо действует в одних и тех же областях (возможно, составляющих в физическом пространстве области, не являющиеся непрерывными), либо не имеет общей области, т.е. принадлежит классам эквивалентности согласно своим главным классам.
- Количество областей в главном классе одинаково, и имеется второй порядок, что определяется конкретной конфигурацией разбиений.
- Выбор проходов для выполнения во время той или иной под-итерации определяется сценарием вычислений с целью разделения работы на одинаковые временные пакеты.

Порядок и степень разбиения согласно количеству областей

Количество измерений	Количество областей	Количество делений областей вдоль Оси 1	Оси 2	Оси 3
2	4	2	2	
2	8	2	4	
2	16	4	4	
3	8	2	2	2
3	16	2	2	4
3	32	2	4	4
3	64	4	4	4
3	128	8	4	4
3	256	8	8	4
3	512	8	8	8

- Бинарное разделение определяется приблизительной взвешенной схемой (имеющей точность до ±20%).
- Выбор 1-й, 2-й и 3-й оси из числа декартовых осей (x,y,z) основан на геометрических соображениях и наличии плоскостей симметрии.
- Порядок вычислений тесно связан с порядком разложения.

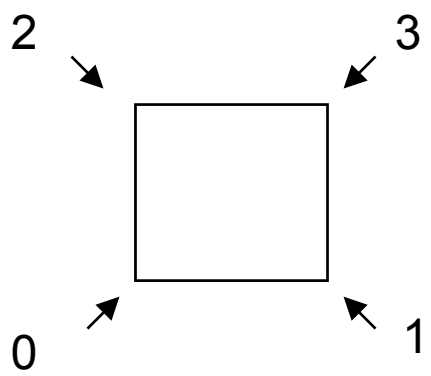
Иллюстрация критерия смежности областей



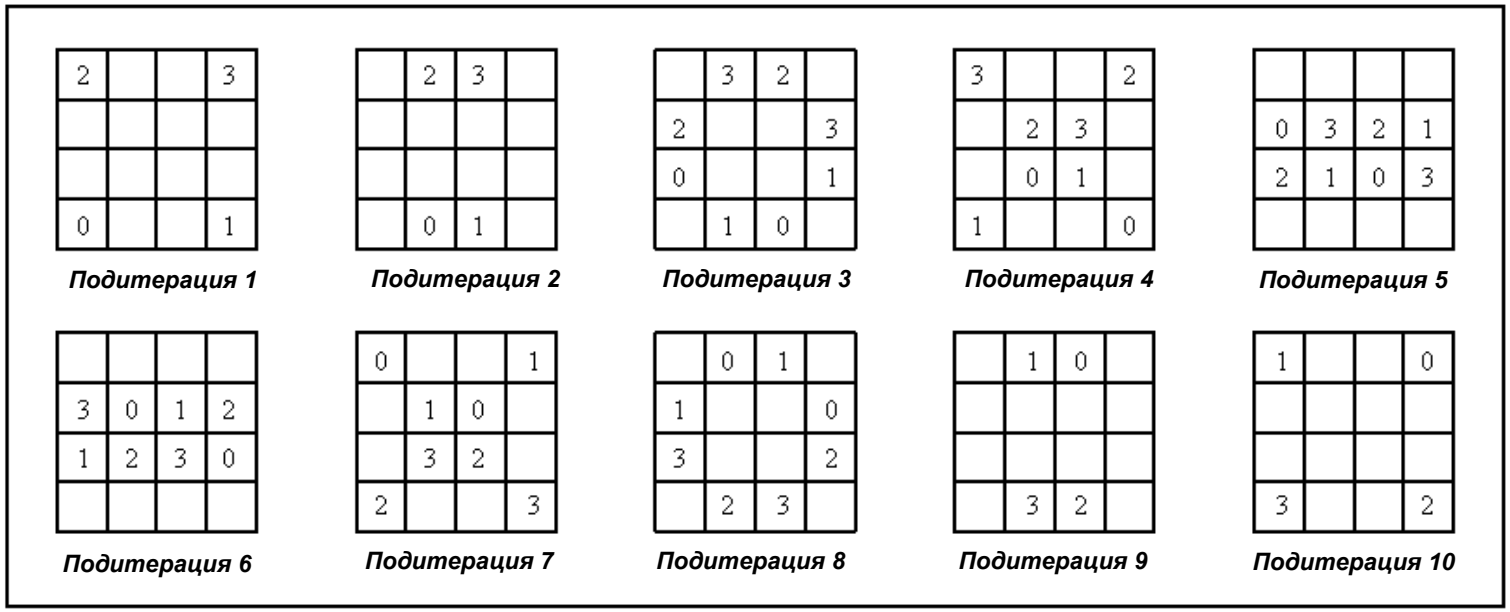
- Для того, чтобы удовлетворить критерию смежности, области, у которых имеется смежная граница, должны иметь в каждом направлении координаты, отличающиеся не более чем на единицу.
- В приведенном выше примере первоначальное разложение в вертикальном направлении обеспечивает выполнения критерия для первой координаты.
- В приведенном справа примере области (4,2) и (3,4) имеют общую границу, что нарушает критерий по второй координате.

Численное представление направлений прохода

Направление прохода	Количество измерений	Интерпретация
0	2	*Снизу слева вверх направо*
1	2	*Снизу справа вверх налево*
2	2	*Сверху слева вниз направо*
3	2	*Сверху справа вниз налево*
0	3	*Снизу слева спереди вверх направо назад*
1	3	*Снизу справа спереди вверх налево назад*
2	3	*Снизу слева сзади вверх направо вперед*
3	3	*Снизу справа сзади вверх налево вперед*
4	3	*Сверху слева спереди вниз направо назад*
5	3	*Сверху справа спереди вниз налево назад*
6	3	*Сверху слева сзади вниз направо вперед*
7	3	*Сверху справа сзади вниз налево вперед*



Порядок проходов для 16 областей в двух направлениях



- Вертикальные линии не обязательно совпадают, но критерий смежности соблюдается.
- Неотмеченные области означают отсутствие вычислений.
- В каждой области выполняется проход в каждом из четырех направлений.
- Общий коэффициент эффективности составляет всего 40% (4 прохода на 10 под-итераций).

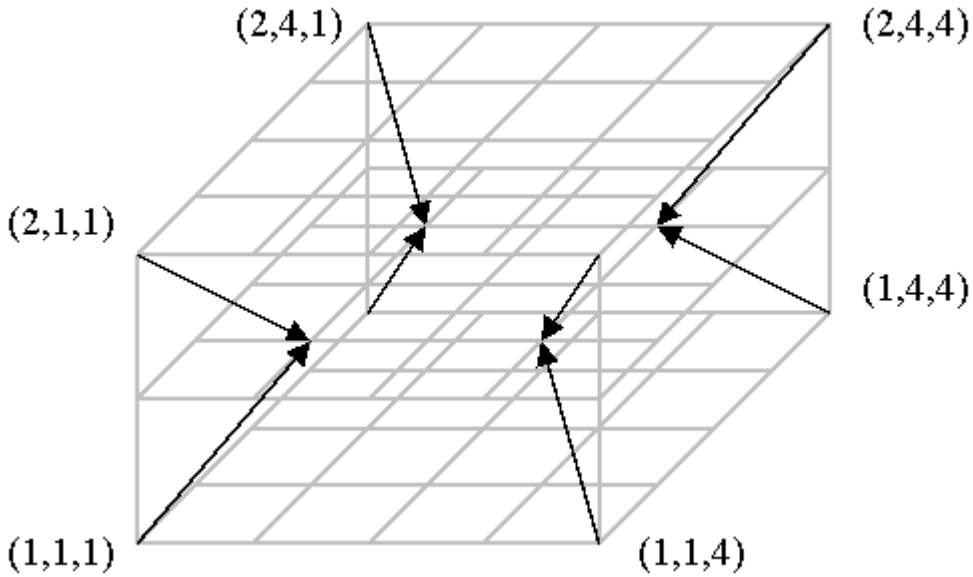
Направления проходов для набора из 4x4 областей

Гл. класс	Область	Под-итерация									
(без областей со слишком большим объемом вычислений)											
		1	*2*	*3*	*4*	*5*	*6*	*7*	*8*	*9*	*10*
		Направления проходов									
1	(1,1)	0			1			2			3
2	(1,2)		0	1					2	3	
3	(1,3)		1	0					3	2	
4	(1,4)	1			0			3			2
5	(2,1)			0		2	1		3		
6	(2,2)				0	1	2	3			
7	(2,3)				1	0	3	2			
8	(2,4)			1		3	0		2		
9	(3,1)			2		0	3		1		
10	(3,2)				2	3	0	1			
11	(3,3)				3	2	1	0			
12	(3,4)			3		1	2		0		
13	(4,1)	2			3			0			1
14	(4,2)		2	3					0	1	
15	(4,3)		3	2					1	0	
16	(4,4)	3			2			1			0

Гл. класс	Область	Под-итерация									
(с областями со слишком большим объемом вычислений)											
		1	*2*	*3*	*4*	*5*	*6*	*7*	*8*	*9*	*10*
		Направления проходов									
1	(1,1),**(3,1)**	0		**2**	1	**0**	**3**	2	**1**		3
2	(1,2),**(3,2)**		0	1	**2**	**3**	**0**	**1**	2	3	
3	(1,3),**(3,3)**		1	0	**3**	**2**	**1**	**0**	3	2	
4	(1,4),**(3,4)**	1		**3**	0	**1**	**2**	3	**0**		2
5	(2,1),**(4,1)**	**2**		0	**3**	2	1	**0**	3		**1**
6	(2,2),**(4,2)**		**2**	**3**	0	1	2	3	**0**	**1**	
7	(2,3),**(4,3)**		**3**	**2**	1	0	3	2	**1**	**0**	
8	(2,4),**(4,4)**	**3**		1	**2**	3	0	**1**	2		**0**

- Слева представлены 16 главных классов (и областей) со средней эффективностью 40%.
- Справа представлено наложение верхней и нижней половин левой стороны, дающее 8 главных классов (также для 16 областей) с эффективностью 80%.
- Левая сторона может рассматриваться как покрытие, не являющееся непрерывным и покрывающее плоскость на ±8 единиц в вертикальном направлении и ±8 единиц в горизонтальном направлении (как и справа).

Схематический вид 32 областей в конфигурации 4x4x2



- Стрелками показаны проходы в первой под-итерации.
- Некоторые угловые области пронумерованы согласно их координатам.
- Порядок координат представляет порядок бинарного разложения согласно оси.

Табличное представление проходов для 32 областей при разбиении 4x4x2

Гл. класс	Область	Субитерация																	
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
		Направления проходов																	
1	(1,1,1),**(1,3,1)**	0		**2**	1	**0**	**3**	2	**1**	4	3	**6**	5	**4**	7	6	**5**		7
2	(1,1,2),**(1,3,2)**		0	1	**2**	**3**	**0**	**1**	2	3	4	5	**6**	7	**4**	**5**	6	7	
3	(1,1,3),**(1,3,3)**		1	0	**3**	**2**	**1**	**0**	3	2	5	4	7	**6**	**5**	**4**	7	6	
4	(1,1,4),**(1,3,4)**	1		**3**	0	**1**	**2**	3	**0**	5	2	7	4	**5**	**6**	7	**4**		6
5	(1,2,1),**(1,4,1)**	**2**		0	**3**	2	1	**0**	3	**6**	**1**	4	7	6	5	**4**	7		**5**
6	(1,2,2),**(1,4,2)**		**2**	**3**	0	1	2	3	**0**	**1**	**6**	7	4	5	6	7	**4**	**5**	
7	(1,2,3),**(1,4,3)**		**3**	**2**	1	0	3	2	**1**	**0**	7	**6**	5	4	7	6	**5**	**4**	
8	(1,2,4),**(1,4,4)**	**3**		1	**2**	3	0	**1**	2	7	**0**	5	**6**	7	**4**	**5**	6		**4**
9	(2,1,1),**(2,3,1)**	4		**6**	5	**4**	7	6	5	0	7	**2**	1	0	**3**	2	**1**		3
10	(2,1,2),**(2,3,2)**		4	5	**6**	7	**4**	**5**	6	7	0	1	**2**	**3**	**0**	**1**	2	3	
11	(2,1,3),**(2,3,3)**		5	4	7	**6**	**5**	**4**	7	6	1	0	**3**	**2**	**1**	**0**	3	2	
12	(2,1,4),**(2,3,4)**	5		7	4	**5**	**6**	7	**4**	1	**6**	**3**	0	**1**	**2**	3	**0**		2
13	(2,2,1),**(2,4,1)**	**6**		4	7	6	5	**4**	7	**2**	**5**	0	**3**	2	1	**0**	3		**1**
14	(2,2,2),**(2,4,2)**		**6**	7	4	5	6	7	**4**	**5**	**2**	**3**	0	1	2	3	**0**	**1**	
15	(2,2,3),**(2,4,3)**		7	**6**	5	4	7	6	**5**	**4**	**3**	**2**	1	0	3	2	**1**	**0**	
16	(2,2,4),**(2,4,4)**	7		5	**6**	7	4	**5**	6	3	**4**	1	**2**	3	0	**1**	2		**0**

- 16 главных классов, 2 области на главный класс, 18 под-итераций.
- 2 копии - горизонтально, ½+½+½+½ - вертикально (итого 4).
- Теоретическая эффективность = 16/18 (89%).

Табличное представление проходов для 64 областей при разбиении 4x4x4

Гл. класс	Область	Субитерация																					
		1	*2*	*3*	*4*	*5*	*6*	*7*	*8*	*9*	*10*	*11*	*12*	*13*	*14*	*15*	*16*	*17*	*18*	*19*	*20*	*21*	*22*
		Направления проходов																					
1	(1,1,1),(3,1,1)	0			1	4		2	5	0	3	6	1	4	7	2	5		3	6			7
2	(1,1,2),(3,1,2)		0	1			4	5	2	3	0	1	6	7	4	5	2	3			6	7	
3	(1,1,3),(3,1,3)		1	0			5	4	3	2	1	0	7	6	5	4	3	2			7	6	
4	(1,1,4),(3,1,4)	1			0	5		3	4	1	2	7	0	5	6	3	4		2	7			6
5	(1,2,1),(3,2,1)			0		2	1	4	3	6	5	0	7	2	1	4	3	6	5		7		
6	(1,2,2),(3,2,2)				0	1	2	3	4	5	6	7	0	1	2	3	4	5	6	7			
7	(1,2,3),(3,2,3)				1	0	3	2	5	4	7	6	1	0	3	2	5	4	7	6			
8	(1,2,4),(3,2,4)			1		3	0	5	2	7	4	1	6	3	0	5	2	7	4		6		
9	(1,3,1),(3,3,1)			2		0	3	6	1	4	7	2	5	0	3	6	1	4	7		5		
10	(1,3,2),(3,3,2)				2	3	0	1	6	7	4	5	2	3	0	1	6	7	4	5			
11	(1,3,3),(3,3,3)				3	2	1	0	7	6	5	4	3	2	1	0	7	6	5	4			
12	(1,3,4),(3,3,4)			3		1	2	7	0	5	6	3	4	1	2	7	0	5	6		4		
13	(1,4,1),(3,4,1)	2			3	6		0	7	2	1	4	3	6	5	0	7		1	4			5
14	(1,4,2),(3,4,2)		2	3			6	7	0	1	2	3	4	5	6	7	0	1			4	5	
15	(1,4,3),(3,4,3)		3	2			7	6	1	0	3	2	5	4	7	6	1	0			5	4	
16	(1,4,4),(3,4,4)	3			2	7		1	6	3	0	5	2	7	4	1	6		0	5			4
17	(2,1,1),(4,1,1)	4			5	0		6	1	4	7	2	5	0	3	6	1		7	2			3
18	(2,1,2),(4,1,2)		4	5			0	1	6	7	4	5	2	3	0	1	6	7			2	3	
19	(2,1,3),(4,1,3)		5	4			1	0	7	6	5	4	3	2	1	0	7	6			3	2	
20	(2,1,4),(4,1,4)	5			4	1		7	0	5	6	3	4	1	2	7	0		6	3			2
21	(2,2,1),(4,2,1)			4		6	5	0	7	2	1	4	3	6	5	0	7	2			3		
22	(2,2,2),(4,2,2)				4	5	6	7	0	1	2	3	4	5	6	7	0	1	2	3			
23	(2,2,3),(4,2,3)				5	4	7	6	1	0	3	2	5	4	7	6	1	0	3	2			
24	(2,2,4),(4,2,4)			5		7	4	1	6	3	0	5	2	7	4	1	6	3	0		2		
25	(2,3,1),(4,3,1)			6		4	7	2	5	0	3	6	1	4	7	2	5	0	3		1		
26	(2,3,2),(4,3,2)				6	7	4	5	2	3	0	1	6	7	4	5	2	3	0	1			
27	(2,3,3),(4,3,3)				7	6	5	4	3	2	1	0	7	6	5	4	3	2	1	0			
28	(2,3,4),(4,3,4)			7		5	6	3	4	1	2	7	0	5	6	3	4	1	2		0		
29	(2,4,1),(4,4,1)	6			7	2		4	3	6	5	0	7	2	1	4	3		5	0			1
30	(2,4,2),(4,4,2)		6	7			2	3	4	5	6	7	0	1	2	3	4	5			0	1	
31	(2,4,3),(4,4,3)		7	6			3	2	5	4	7	6	1	0	3	2	5	4			1	0	
32	(2,4,4),(4,4,4)	7			6	3		5	2	7	4	1	6	3	0	5	2		4	1			0

- 32 главных класса, 2 области на главный класс, 22 подитерации.
- 4 копии - горизонтально, 2 - вертикально (итого 8).
- Копируется на 4 единицы в горизонтальном направлении, на 16 единиц в вертикальном.
- Теоретическая эффективность = 16/22 (73%).

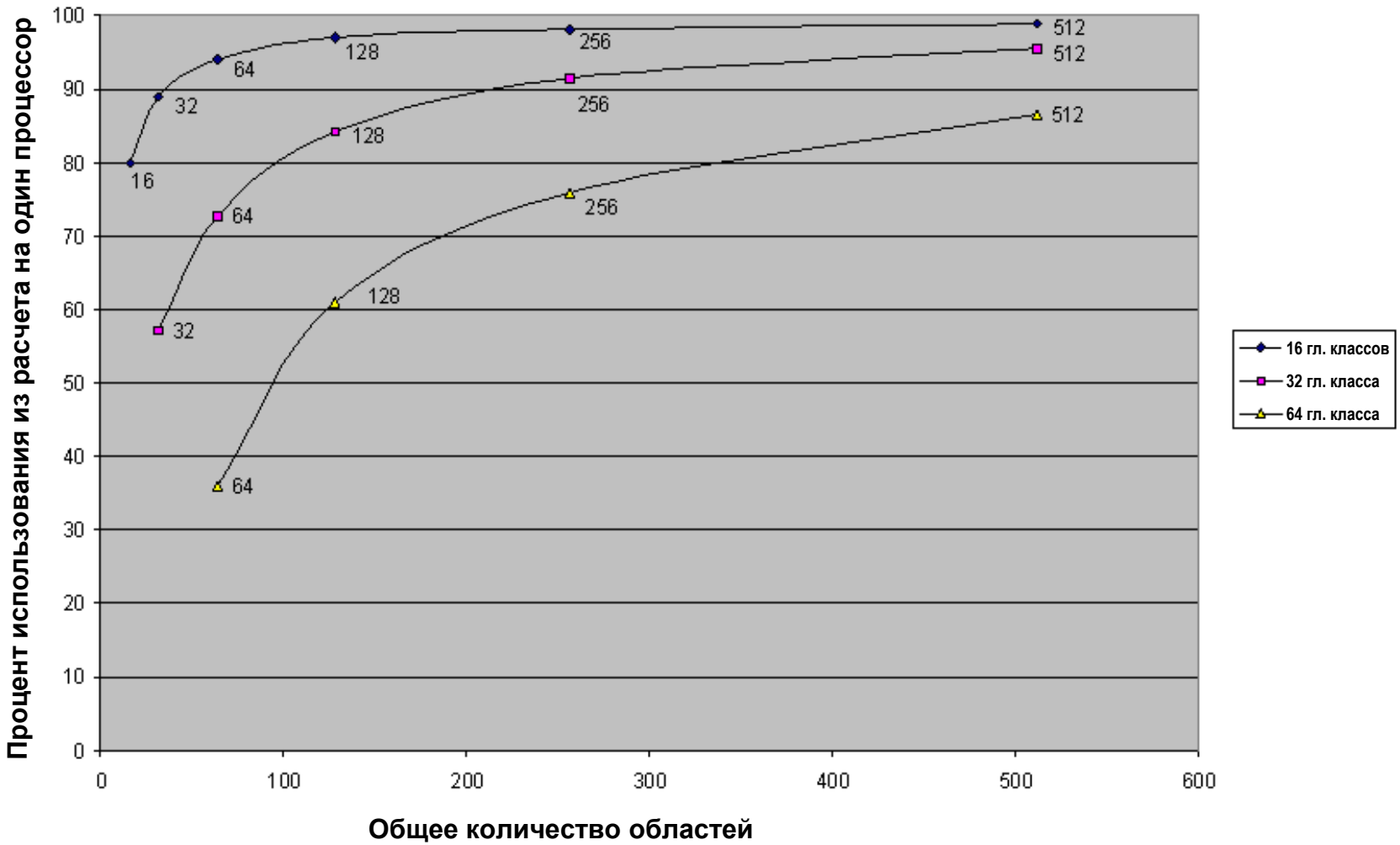
Теоретическая эффективность различных стратегий разложения областей

Размеры	Гл. классы	Область	Кол. областей на гл. класс	Активные подитерации	Итого подитераций	Эффектив-ность, %
2	4	4	1	4	4	100
2	8	8	1	4	6	67
2	8	16	2	8	10	80
2	16	16	1	4	10	40
3	8	8	1	8	8	100
3	16	16	1	8	10	80
3	16	32	2	16	18	89
3	16	64	4	32	34	94
3	16	128	8	64	66	97
3	16	256	16	128	130	98
3	16	512	32	256	258	99
3	32	32	1	8	14	57
3	32	64	2	16	22	73
3	32	128	4	32	38	84
3	32	256	8	64	70	91
3	32	512	16	128	134	96
3	64	64	1	8	22	36
3	64	128	2	16	26	61
3	64	256	4	32	42	76
3	64	512	8	64	74	86
3	128	512	4	32	50	64
3	128	1024	8	64	82	78
3	128	2048	16	128	146	88
3	128	4096	32	256	274	93

- Были реализованы почти все конфигурации, кроме крупнейших.
- “Теоретическая” означает при идеальном распределении объема вычислений и в отсутствие затрат на обмен данными.

Значения эффективности вычислений

Максимальное теоретическое использование процессора для различных конфигураций областей

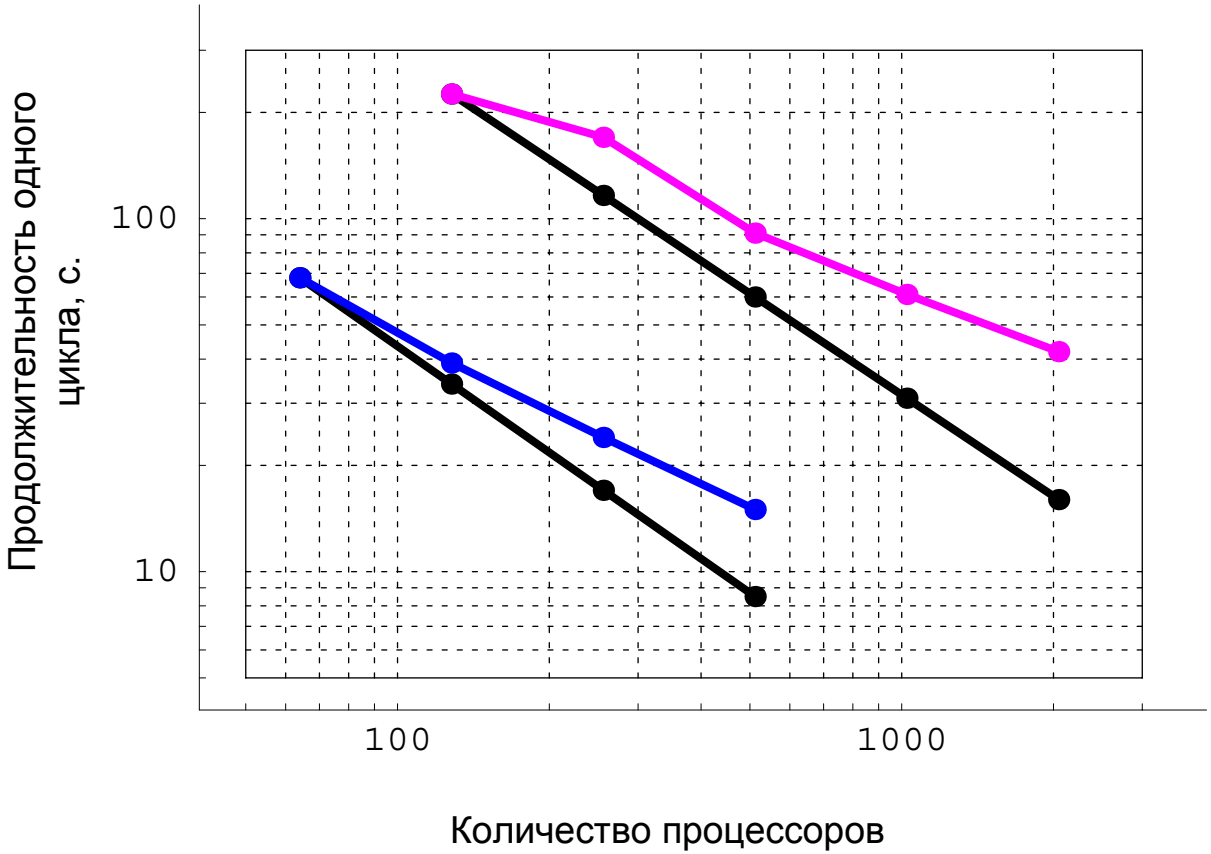


Сравнение значений теоретической эффективности в части времени вычислений при наличии областей со слишком большим объемом вычислений

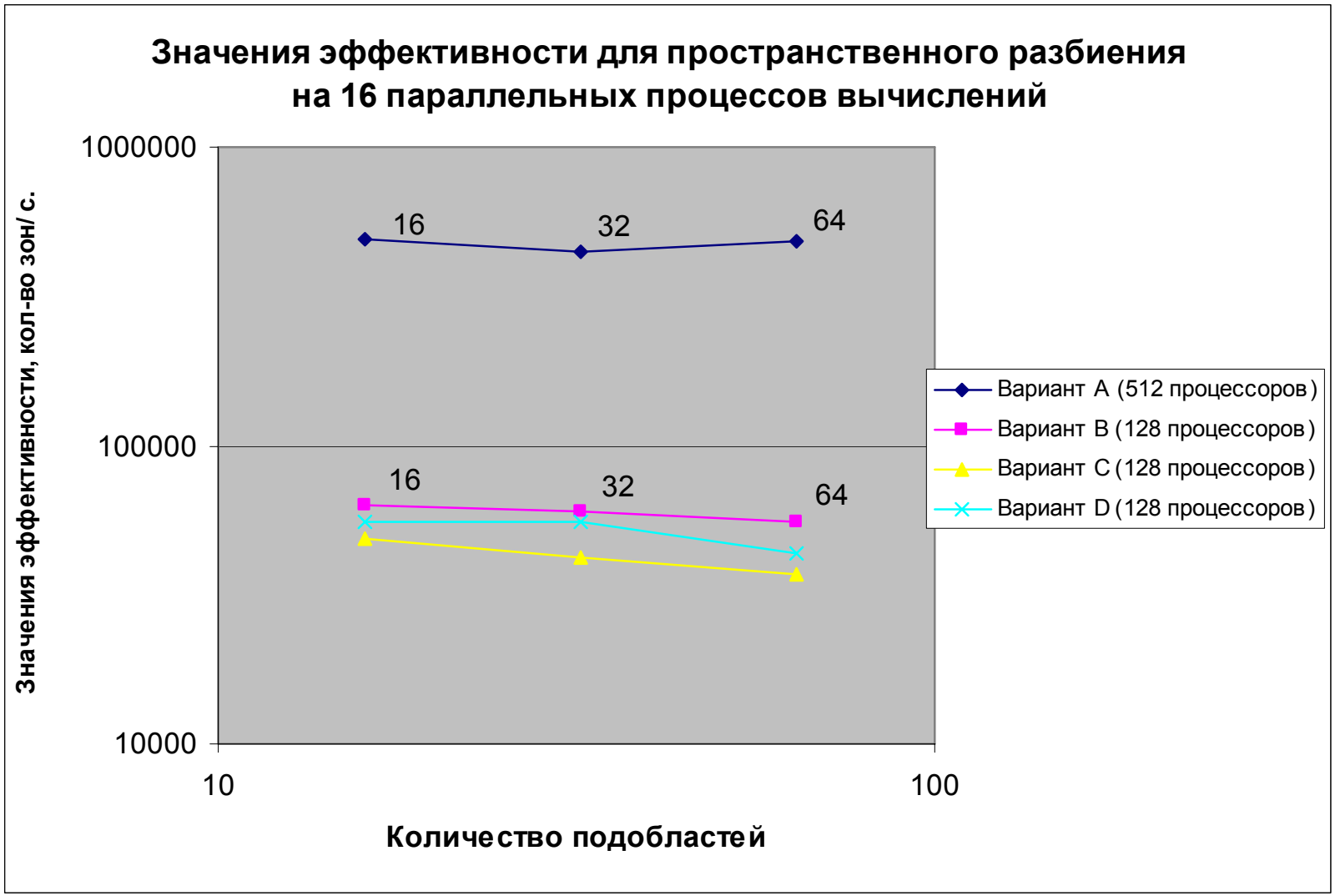
Количество гл. классов	Количество областей	Время в секундах	Теоретическая эффективность	(Эффективность) x (Время)
16	16	1440	.80	1150
16	32	1330	.89	1184
16	64	1272	.94	1196

- Задача ставится в квадрате 8x8 для 32 групп энергии и четырех осей симметрии.
- Соответствует времени ~1200 секунд при эффективности 100%.
- Как и предполагается, произведение эффективности на время почти постоянно.
- При более низком уровне симметрии достичь таких результатов труднее.
- В целом более крупные конфигурации (с большим количеством областей) требуют более мелких сеток (для точного разбиения с целью наилучшего распределения объема вычислений).
- Результаты других исследований времени проведения вычислений дают в целом такие же результаты, как и представленные здесь.
- Были успешно проверены тестовые расчеты для конфигураций, содержащих до 512 областей.

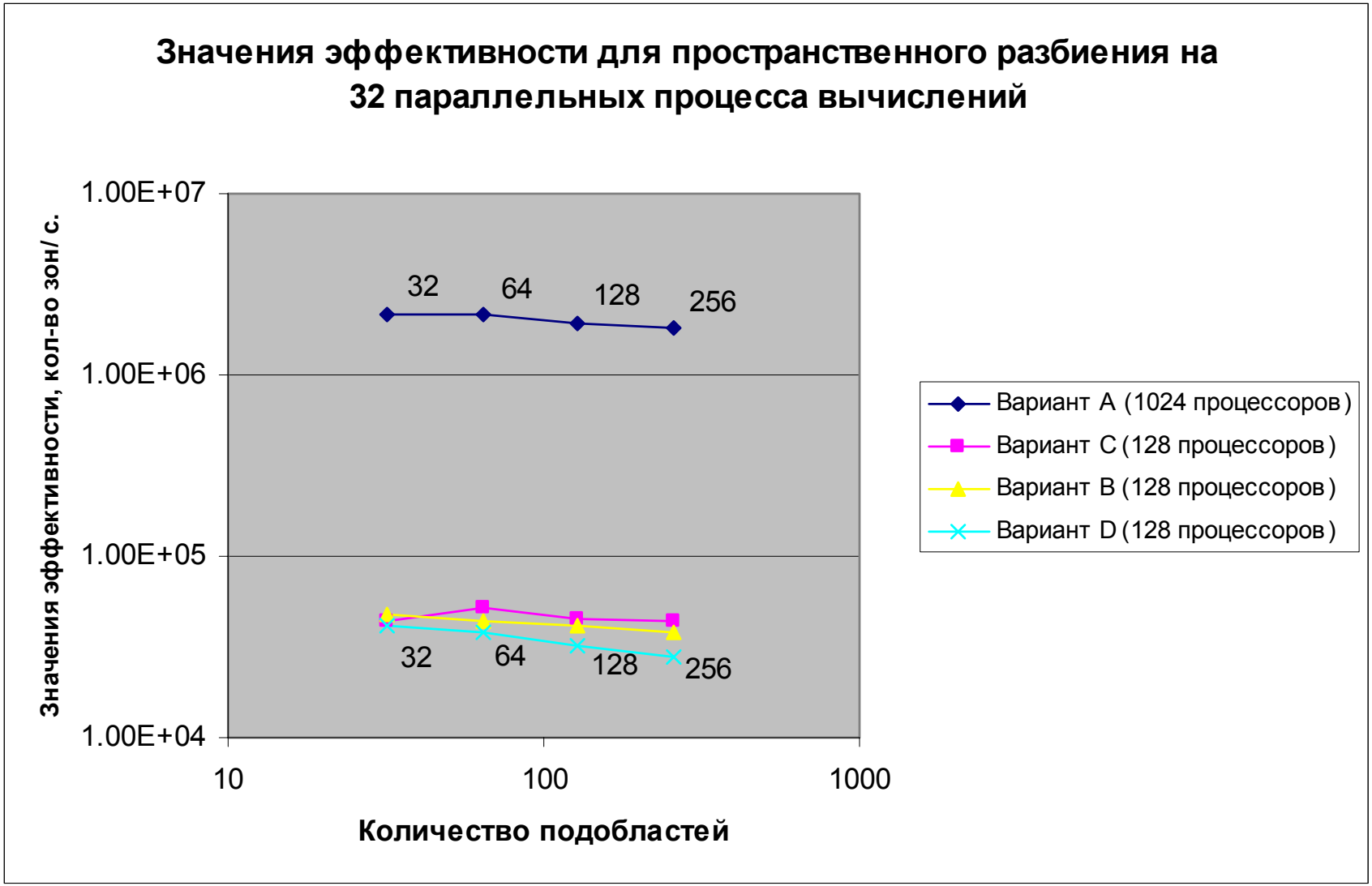
Потеря эффективности при увеличении количества процессоров, между которыми распределена одна и та же задача.



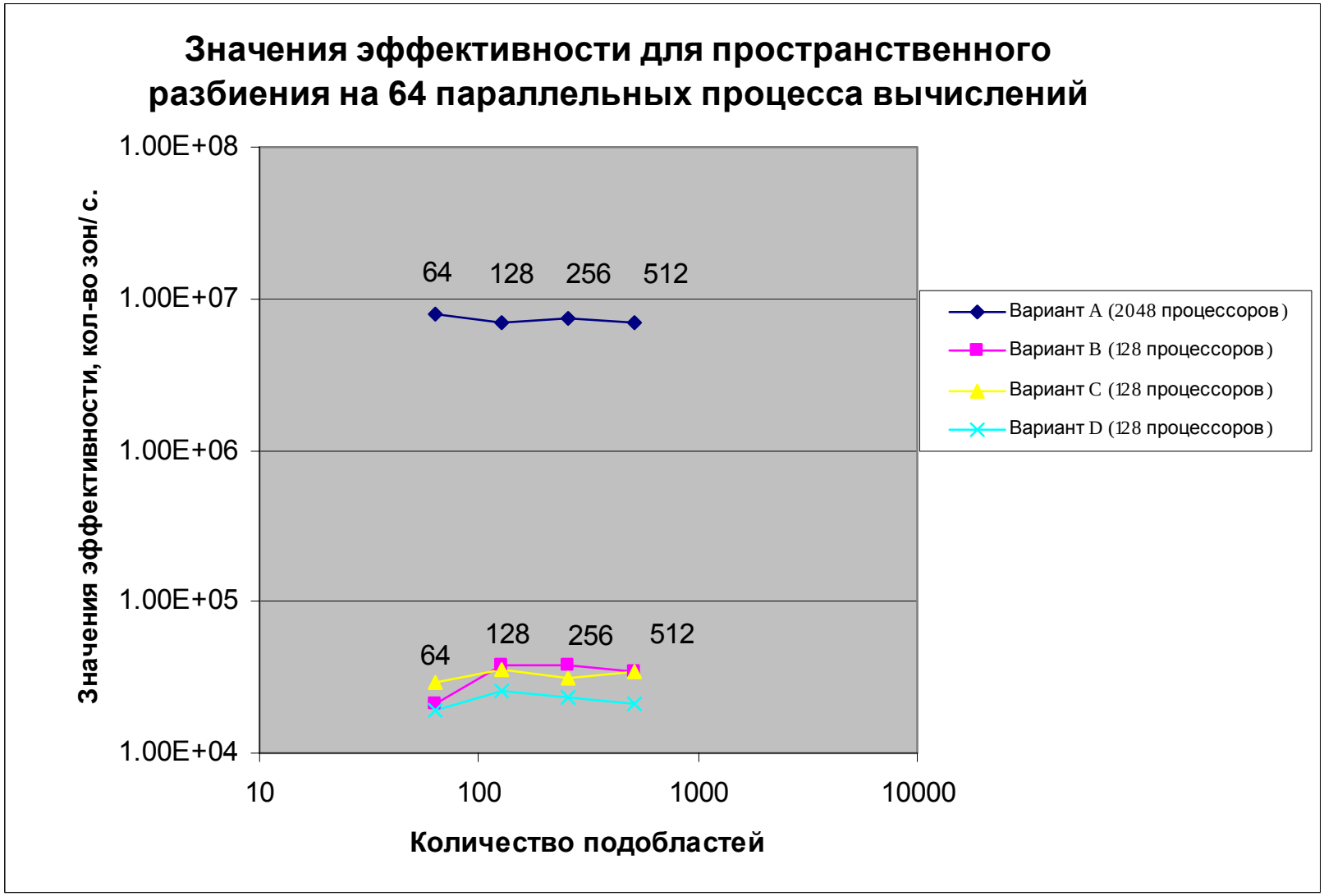
Влияние перегрузки областей для пространственного разбиения на 16 параллельных процессов вычислений



Влияние перегрузки областей для пространственного разбиения на 32 параллельных процесса вычислений



Влияние перегрузки областей для пространственного разбиения на 64 параллельных процесса вычислений



Прочие соображения и выводы

- Динамическое выравнивание распределения объемов вычислений (после первоначального разложения) было проверено и найдено эффективным для малого количества областей.
- Соблюдение критерия смежности за счет нарушения идеального распределения объема вычислений эффективно, поскольку в противоположном случае невозможно выработать сценарий проходов и возникают глобальные конфликты в плане времени.
- Для большого количества областей важно обеспечить отсутствие таких областей, для которых вычисления занимают слишком много времени, поскольку именно такие области определяют ход расчетов.
- Автоматический алгоритм выравнивания распределения объемов вычислений был проверен при выравнивании распределения объемов вычислений вручную для подтверждения его эффективности.
- Новая схема позволила провести расчеты для намного большего, чем раньше, числа параллельных процессов вычислений.