

Cálculos de Monte Carlo aplicado a problemas neutrónicos en GPUs

Esteban Luis Pellegrino

Instituto Balseiro - Comisión Nacional de Energía Atómica

Año 2011

*Introducción y
presentación del
problema*

Presentación del problema

Ecuación de Boltzmann de Transporte de Neutrones

- ▶ Describe y caracteriza el campo de neutrones en espacio, energía, dirección y tiempo ($\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t$).

Formas de resolverlas

- ▶ *Métodos determinísticos*: Discretización de todas las variables, lo que da lugar a matrices gigantes. Limitado en el tratamiento energético y en la geometría.
- ▶ *Métodos estocásticos*: Simulaciones por Monte Carlo, muy costosas pero se pueden modelar geometrías complejas y realizar un tratamiento continuo en energía. Código de referencia: MCNP5 (Los Alamos National Lab.)

Presentación del problema

Ecuación de Boltzmann de Transporte de Neutrones

- ▶ Describe y caracteriza el campo de neutrones en espacio, energía, dirección y tiempo ($\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t$).

Formas de resolverlas

- ▶ *Métodos determinísticos*: Discretización de todas las variables, lo que da lugar a matrices gigantes. Limitado en el tratamiento energético y en la geometría.
- ▶ *Métodos estocásticos*: Simulaciones por Monte Carlo, muy costosas pero se pueden modelar geometrías complejas y realizar un tratamiento continuo en energía. Código de referencia: MCNP5 (Los Alamos National Lab.)

Presentación del problema

Monte Carlo de Neutrones

- ▶ Correcciones en experimentos y estimación de parámetros integrales de transporte de un reactor.
- ▶ Interés genuino en acelerar las simulaciones y hacerlas más “rutinarias”.

Aceleración con GPU

- ▶ Evaluar la *performance* de simulaciones en GPUs.
- ▶ *Plantear* un problema lo suficientemente complejo como para que represente una situación práctica, y lo suficientemente simple como para programarlo en CUDA en un tiempo razonable.

Presentación del problema

Monte Carlo de Neutrones

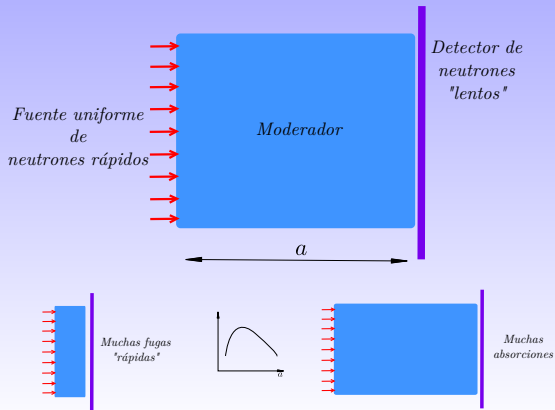
- ▶ Correcciones en experimentos y estimación de parámetros integrales de transporte de un reactor.
- ▶ Interés genuino en acelerar las simulaciones y hacerlas más “rutinarias”.

Aceleración con GPU

- ▶ Evaluar la *performance* de simulaciones en GPUs.
- ▶ *Plantear* un problema lo suficientemente complejo como para que represente una situación práctica, y lo suficientemente simple como para programarlo en CUDA en un tiempo razonable.

Espesor óptimo de flujo térmico

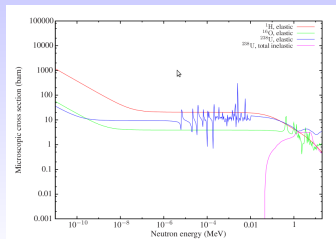
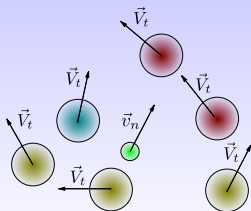
- ▶ Encontrar el espesor de modo que el conteaje de neutrones "lentos" sea máximo.



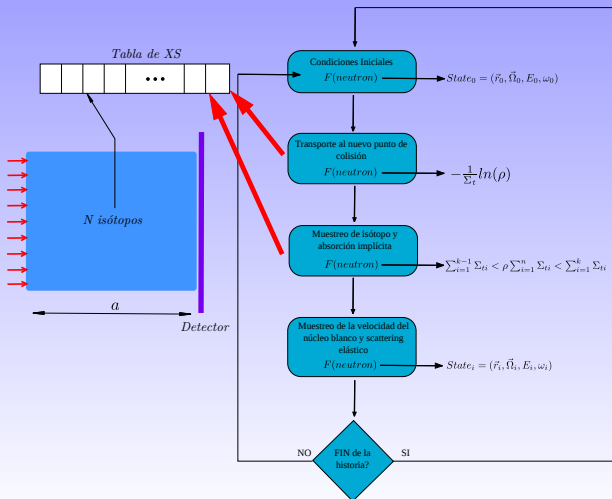
Interacción de neutrones con la materia

Secciones eficaces

- ▶ Caracterizan la probabilidad de las reacciones (absorción, scattering, fisión, etc.). Son de naturaleza isotópica.
- ▶ Datos evaluados y recomendados tabulados en extensas tablas en un determinado formato (ACE).



Resumen del problema



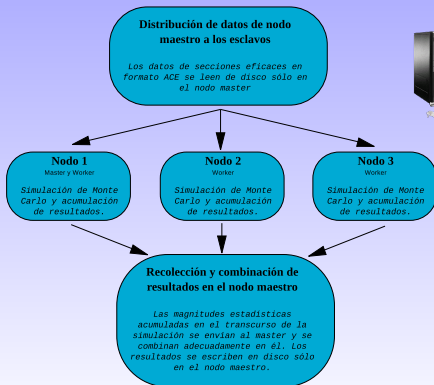
Generalidades del código utilizado

Características del código desarrollado

Características y limitaciones

- ▶ Prisma de dimensiones arbitrarias.
- ▶ Fuente de neutrones en una de las caras.
- ▶ Detector de neutrones (en función de la energía) en otra cara.
- ▶ Tratamiento de XS a partir de archivos en formato ACE. Colapso de grilla energética dentro de una grilla “gruesa” equiespaciada en escala logarítmica. Búsqueda binaria.

Distribución del trabajo con MPI



Hardware disponible

Tres nodos HP Workstation Z400 - Intel Xeon Quad Core W3520 2.66 Ghz conectados en una red Ethernet. Cada uno tiene una tarjeta gráfica NVIDIA Quadro 600 (96 cores - Compute Capability 2.1)

Memoria global

Acceso a las tablas de XS

- ▶ Cálculo analítico de la porción de la tabla y búsqueda binaria. Obtención de la energía e interpolación de los valores.
- ▶ *Pocos isótopos*: Dentro de la caché (Fermi).

PROBLEMA

- ▶ Muchos isótopos requiere accesos aleatorios a memoria global.
- ▶ Buscar una solución para versiones *futuras*.
- ▶ Algoritmos de búsquedas en paralelo con “*cacheo*” previo en *Shared Memory? Texture memory?*

Memoria global

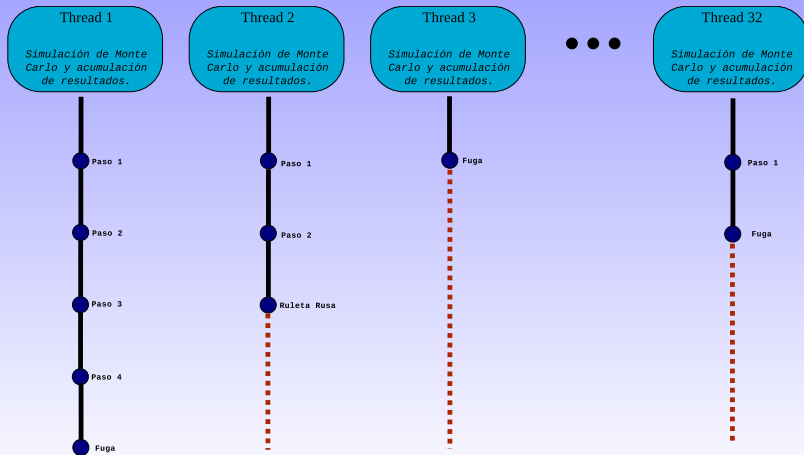
Acceso a las tablas de XS

- ▶ Cálculo analítico de la porción de la tabla y búsqueda binaria. Obtención de la energía e interpolación de los valores.
- ▶ *Pocos isótopos*: Dentro de la caché (Fermi).

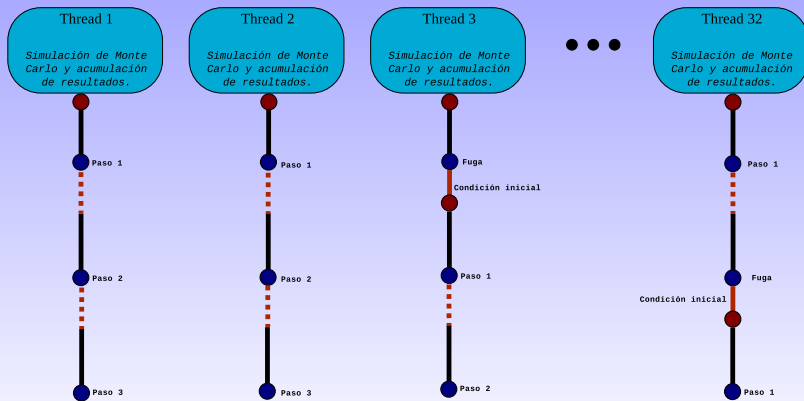
PROBLEMA

- ▶ Muchos isótopos requiere accesos aleatorios a memoria global.
- ▶ Buscar una solución para versiones *futuras*.
- ▶ Algoritmos de búsquedas en paralelo con “*cacheo*” previo en *Shared Memory? Texture memory?*

Divergencia de threads



Divergencia de threads



Divergencia de threads

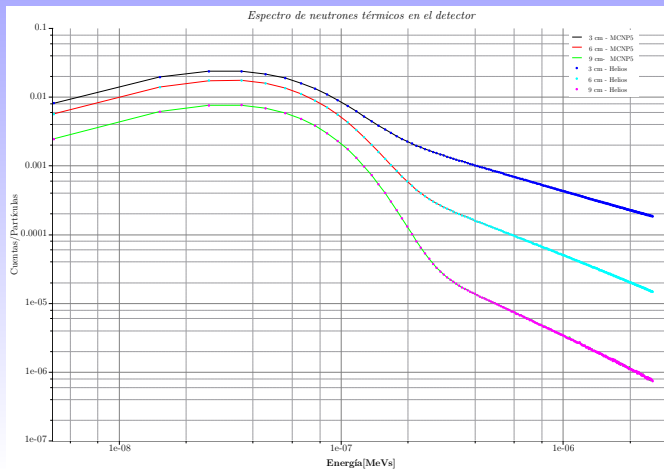
PROBLEMA

- ▶ Si la fuente es complicada, lo anterior no sirve.
- ▶ Para geometrías complicadas, hay mucha divergencia en el cálculo de distancia (un thread está rodeado de distintas superficies dependiendo de \vec{r}).
- ▶ La GPU no es “amiga” de métodos de rechazo. Hay que buscar otras alternativas.

Resultados obtenidos

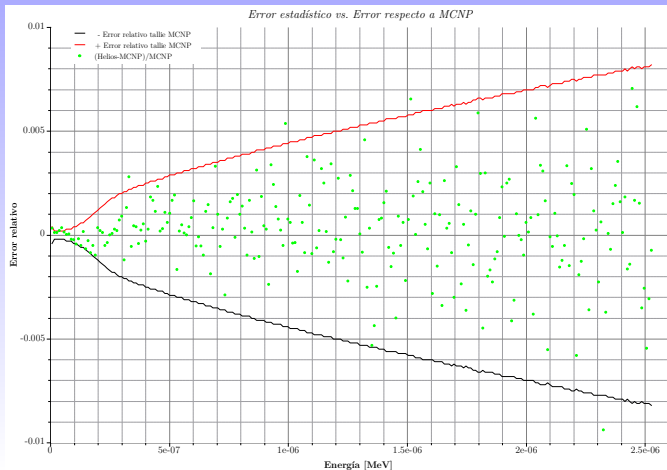
Espectro en muestra de Polimetilmetacrilato (PMMA)

- ▶ Espectro de *neutrones* térmicos en PMMA.



Error con respecto a MCNP

- ▶ Los cálculos son estadísticamente equivalentes



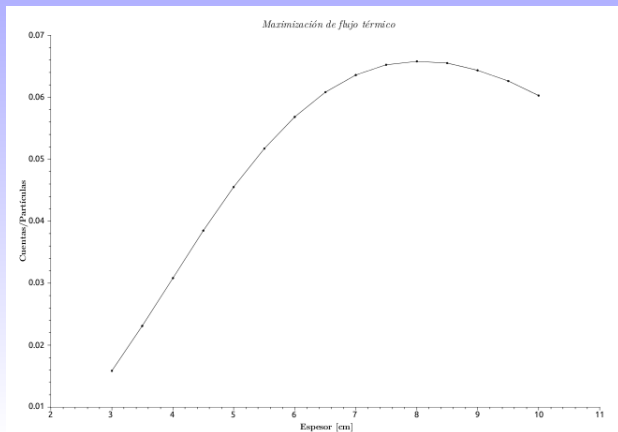
Tiempos de cálculo

- ▶ Rapidísimo... :-)

Espesor	Helios (Quadro 600)	MCNP (4 Cores)
3 cm	52 segundos	173 minutos
6 cm	111 segundos	246 minutos
9 cm	154 segundos	325 minutos

Curva de optimización

- Barrido en espesores de la muestra. Cálculo que lleva del orden de un día de trabajo. Con 3 x Quadro = 15 min.



Conclusiones

Conclusiones y trabajos futuros

Conclusiones (en cuanto al problema del prisma)

- ▶ Muy buenos resultados con valores estadísticamente equivalentes a MCNP.
- ▶ Mismos resultados con 15 minutos de cálculo.
- ▶ Punto de partida para códigos de propósitos más generales.

Vale la pena programar en CUDA. Sin embargo...

- ▶ Si el problema es muy complicado (fuente, geometría y muchos isótopos) *una historia le queda MUY GRANDE al thread.*
- ▶ Próximo código: *Historia/Bloque.*

Conclusiones y trabajos futuros

Conclusiones (en cuanto al problema del prisma)

- ▶ Muy buenos resultados con valores estadísticamente equivalentes a MCNP.
- ▶ Mismos resultados con 15 minutos de cálculo.
- ▶ Punto de partida para códigos de propósitos más generales.

Vale la pena programar en CUDA. Sin embargo...

- ▶ Si el problema es muy complicado (fuente, geometría y muchos isótopos) *una historia le queda MUY GRANDE al thread.*
- ▶ Próximo código: *Historia/Bloque.*

