



Жуковский М.Е., Усков Р.В.

О применении графических процессоров видеоускорителей в прикладных задачах. (Часть II. Моделирование поглощения гамма-излучения.)

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Жуковский М.Е., Усков Р.В. О применении графических процессоров видеоускорителей в прикладных задачах. (Часть II. Моделирование поглощения гамма-излучения.) // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2010. № 20. 23 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2010-20>

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
им. М.В.КЕЛДЫША РАН

М.Е.Жуковский, Р.В.Усков

О ПРИМЕНЕНИИ ГРАФИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОРОВ
ВИДЕОУСКОРИТЕЛЕЙ В ПРИКЛАДНЫХ ЗАДАЧАХ
(Часть II. Моделирование поглощения гамма-излучения.)

Москва, 2010

М.Е.Жуковский, Р.В.Усков

**О ПРИМЕНЕНИИ ГРАФИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОРОВ
ВИДЕОУСКОРИТЕЛЕЙ В ПРИКЛАДНЫХ ЗАДАЧАХ. (Часть II. Модели-
рование поглощения гамма-излучения.)**

АННОТАЦИЯ

Рассмотрены основы применения технологии **nVidia© CUDA** к решению задачи о поглощении гамма излучения в многокомпонентных объектах. Обсуждаются особенности построения модификации метода Монте-Карло, ориентированной на использование в расчетах графических процессоров. Разработан и реализован подход к организации данных для эффективного использования памяти видеоадаптера.

Приведены результаты анализа эффективности распараллеливания вычислений на двух гибридных кластерах, разработанных в ИПМ и ИММ РАН.

M.E.Zhukovskiy, R.V.Uskov

**USE OF GRAPHICAL PROCESSORS OF VIDEO ACCELERATORS IN
APPLICATIONS. (Part II. Modeling of absorption of gamma radiation.)**

ABSTRACT

Basics of application of **nVidia© CUDA** technology are considered for solving the task on absorption gamma radiation in multicomponent object. Monte Carlo method modification is developed for effective use of the technology. In particular, the use of thread processors and video memory of video adapter is taken up.

Effectiveness of using the technology is investigated.

Введение

Исследование поглощающих свойств различных материалов при их облучении ионизирующим излучением актуально во многих областях науки и приложениях. Так, например, при изучении детектирующих систем важно определить чувствительность датчиков в различных энергетических диапазонах, а также влияние корпусов и конструкционных материалов на эффективность регистрации квантов излучения.

Кроме того, ионизирующее излучение может проникать через экранирующие корпуса приборов и за счет комптоновского рассеяния и фотопоглощения ионизовать материалы их конструкции. Особенно это актуально для космических аппаратов, подверженных солнечным излучениям [1]. Радиоэлектронное оборудование, входящее в состав систем управления ядерного реактора, обычно исследуется на стойкость к воздействию гамма-излучения [2]. Особенно важны такие исследования для полупроводниковых приборов. Измеренная или рассчитанная поглощенная доза излучения в районе $p-n$ перехода позволяет оценить, в какой мере он будет нарушен. Поглощенная доза определяет, по сути, степень ионизации материала и показывает изменение проводимости.

Поглощение ионизирующего излучения сопровождается образованием потока комптоновских и фотоэлектронов. Эти электроны, покидая плотные материалы оболочки объектов, могут образовывать потоки заряженных частиц вокруг и внутри объекта, что приводит к формированию радиационного электромагнитного поля. Указанное поле может заметно влиять на работу электронной аппаратуры, содержащейся внутри объектов. Анализ спектра поглощенной энергии позволяет оценить энергетическое распределение электронного потока, образующегося под действием гамма излучения.

В настоящей работе рассматриваются алгоритмы моделирования поглощения ионизирующего излучения в многокомпонентных объектах, обладающих осевой симметрией и заданных аналитически в виде набора поверхностей второго порядка. Эти алгоритмы строятся на основе экономичного

подхода для описания объектов, эффективного способа трассировки объекта и модификаций метода Монте-Карло для моделирования процессов рассеяния и поглощения квантов излучения в плотных материалах оболочек компонент объектов. Построенные алгоритмы адаптированы для параллельной реализации с применением технологии CUDA. В работе рассмотрены основные способы такой адаптации.

Постановка задачи.

Рассматривается вычислительный эксперимент, в котором многокомпонентные объекты, имеющие кусочно-гомогенную структуру, облучаются рентгеновским или гамма излучением. При этом все однородные компоненты объекта обладают осевой симметрией с общей осью и ограничены поверхностями второго порядка и плоскостями.

В качестве источников используются точечные изотропные источники или плоские источники излучения.

Искомой величиной является энергия излучения, поглощенная в фиксированном фазовом объеме $(\Delta\vec{r}, \Delta E)$, играющем роль детектора. Для анализа пространственного распределения поглощенной энергии используется набор таких детекторов.

Физическая модель. Процессы взаимодействия гамма-излучения с материалами компонент объекта описываются на основе общепринятых моделей поглощения и рассеяния квантов излучения в веществе. Для гамма-излучения с энергией до 1 МэВ преобладающими процессами взаимодействия фотонов с веществом являются фотоэффект, комптоновское и когерентное рассеяние. Для больших энергий заметный вклад дает процесс рождения электрон-позитронных пар.

Дифференциальное сечение комптоновского рассеяния неполяризованного фотона на электроне, свободном от связи с другими частицами, зависит от энергии и направления рассеиваемого фотона и выражается формулой Клейна-Нишины-Тамма [3]:

$$\sigma_{KN}(\cos \theta, \varepsilon) = \frac{r_0^2}{2} \frac{1}{[1 + \varepsilon(1 - \cos \theta)]^2} \left[1 + \cos^2 \theta + \frac{\varepsilon^2 (1 - \cos \theta)^2}{1 + \varepsilon(1 - \cos \theta)} \right] \quad (1.1)$$

где $r_0 = e^2/m_0c^2 = 2.818 \cdot 10^{-15} \text{ м}$, $\varepsilon = E/m_0c^2 = E/511 \text{ Кев}$, связь между углом рассеяния θ и энергиями фотона ε до и ε' после рассеяния: $\varepsilon' = \varepsilon/(1 + \varepsilon(1 - \cos \theta))$.

Угловое распределение фотонов при комптоновском рассеянии определяется в соответствии с (1.1) следующей формулой:

$$p_{KN}(\cos \theta, \varepsilon) = \frac{\sigma_{KN}(\cos \theta, \varepsilon)}{\sigma(\varepsilon)}, \quad (1.2)$$

где $\sigma(\varepsilon) = \int_{-1}^1 \sigma_{KN}(s, \varepsilon) ds$ - полное сечение комптоновского рассеяния.

Если импульс, передаваемый электрону, много меньше m_0c (при $\lambda \gg 1$ для всех направлений или при $(1 - \cos \theta) \ll 1$ для всех энергий, λ - длина волны фотона), то формула (1.1) переходит в формулу Томсона:

$$\sigma_T(\cos \theta) = \frac{r_0^2}{2} [1 + \cos^2 \theta], \quad (1.3)$$

а угловое распределение будет описываться следующей формулой:

$$p_T(\cos \theta) = \frac{3}{8} (1 + \cos^2 \theta) \quad (1.4)$$

Предположение о свободном и покоящемся электроне справедливо только при условии, что импульс, передаваемый электрону, намного превышает импульс его первоначального движения в атоме $\lambda_e \ll \lambda/\sin(\theta/2)$, где λ и λ_e - первоначальные длины волн фотона и электрона соответственно. Наличие связей и первоначального движения атомных электронов приводит к уменьшению вероятности комптоновского рассеяния и исчезновению жесткого соотношения между λ, λ' и θ (так называемый «*binding*» эффект). В этом случае дифференциальное сечение некогерентного комптоновского взаимодействия можно рассчитать, введя поправку к распределению Клейна-Нишины-Тамма:

$$\sigma_C(Z, \cos \theta, \varepsilon) = I(Z, \nu(\cos \theta, \varepsilon)) \sigma_{KN}(\cos \theta, \varepsilon), \quad (1.5)$$

где $I(Z, \nu)$ - соответствующая нерелятивистская функция рассеяния Хартри-Фока [4], учитывающая эффект связи электронов. В приведенных формулах:

$$\nu(\cos \theta, \varepsilon) = \sin(\theta / 2) / \lambda = k \cdot \varepsilon \cdot \sqrt{1 - \cos \theta}, \quad k = 10^{-8} m_0 c / (h\sqrt{2}) \approx 29 \text{ см}^{-1}.$$

Угловое распределение рассеянных фотонов в этом случае будет определяться следующей формулой:

$$p_C(Z, \cos \theta, \varepsilon) = \frac{I(Z, \nu(\cos \theta, \varepsilon)) \sigma_{KN}(\cos \theta, \varepsilon)}{\sigma_C(Z, \varepsilon)}, \quad (1.6)$$

$$\text{где } \sigma_C(Z, \varepsilon) = \int_{-1}^1 \sigma_C(Z, \cos \theta, \varepsilon) d \cos \theta.$$

Дифференциальное сечение когерентного рассеяния вычисляется путем введения релятивистского атомного форм-фактора Хартри-Фока [4] $C(Z, \nu)$, учитывающего эффект связанности электронов в атоме:

$$\sigma_R(Z, x, \varepsilon) = C^2(Z, \nu(\cos \theta, \varepsilon)) \sigma_T(\cos \theta). \quad (1.7)$$

Угловое распределение рассеянных фотонов аналогично (1.6) определяется по следующей формуле:

$$p_R(Z, \cos \theta, \varepsilon) = \frac{C^2(Z, \nu(\cos \theta, \varepsilon)) \sigma_{KN}(\cos \theta, \varepsilon)}{\sigma_R(Z, \varepsilon)}, \quad (1.8)$$

$$\text{где } \sigma_R(Z, \varepsilon) = \int_{-1}^1 \sigma_R(Z, \cos \theta, \varepsilon) d \cos \theta.$$

Учет форм-фактора C для когерентного рассеяния и функции I для некогерентного (комптоновского) рассеяния (binding-эффектов) приводит к увеличению интенсивности рассеянного излучения по сравнению со случаем, когда эти эффекты не учитываются. Соответствующее изменение интенсивности зависит как от плотности облучаемого материала, так и от энергии проникающего излучения, в частности, для более жесткого излучения влияние исследуемых эффектов меньше. В то же время для тяжелых элементов учет указанных факторов более важен, чем для легких.

Фотоэффект приводит к поглощению фотона и рождению электрона. Существуют различные формулы для сечения этого процесса [5], однако на практи-

ке используют табулированные значения коэффициента поглощения гамма-излучения, которые можно найти, например, на сайте www.nist.gov.

Поглощение энергии излучения E детектором (передача энергии фотонов электронам материала детектора) происходит в результате фотопоглощения или комптоновского рассеяния квантов. Поэтому искомая расчетная величина E определяется следующим образом.

Пусть $f_C(\varepsilon)$ - плотность распределения энергии излучения, поглощенной в детекторе в результате комптоновского рассеяния, а $f_{ph}(\varepsilon)$ - плотность распределения энергии, поглощенной в результате фотоэффекта. Тогда

$$E = \int \varepsilon (f_C(\varepsilon) + f_{ph}(\varepsilon)) d\varepsilon.$$

Алгоритмы моделирования взаимодействия ионизирующего излучения с материалами многокомпонентных объектов.

Эффективная методика моделирования процессов распространения и поглощения излучения в многокомпонентных объектах, ориентированная на современные многопроцессорные вычислительные комплексы должна включать в себя следующие основные части:

- экономичный, с точки зрения объема требуемых вычислительных ресурсов, способ описания трехмерных многокомпонентных объектов. В рассматриваемой задаче таким способом является описание объектов с помощью задания замкнутых оболочек [6], разделяющих гомогенные части объекта, которое учитывает априорную информацию о внутренней структуре объектов. Описание объекта является необходимым элементом моделирования, обеспечивающим адекватное задание свойств используемых материалов;
- эффективный алгоритм для многократного вычисления координат точек пересечения луча «источник-детектор» с разделяющими гомогенные части объекта поверхностями (алгоритм трассировки объекта);
- метод моделирования взаимодействия проникающего излучения с материалами объектов, допускающий эффективное распараллеливание с при-

менением современных технологий, включая использование графических процессоров.

Использование алгоритмов статистического моделирования [7] на основе экономичных модификаций метода Монте-Карло является оптимальным для решения сложных граничных задач моделирования взаимодействия и трансформации ионизирующего излучения в многокомпонентных объектах сложной внутренней структуры.

Применение метода Монте-Карло для моделирования взаимодействия фотонного излучения с материалами и трансформации этого излучения при прохождении через сложные многокомпонентные объекты обусловлено высокой гибкостью и приспособленностью этого метода к решению сложных граничных задач. Кроме того, интенсивное развитие в настоящее время высокопроизводительных многопроцессорных суперкомпьютеров в сочетании с возможностью эффективного распараллеливания метода Монте-Карло дает мощный и эффективный инструмент для математического моделирования рассматриваемых процессов.

Описание объекта. Как указывалось выше, в рассматриваемой задаче используется описание объектов с помощью задания замкнутых оболочек, разделяющих гомогенные части объекта. Однако, в отличие от работы [6], для определения этих оболочек применяется не триангуляционная модель, а аналитические формулы. Класс рассматриваемых объектов ограничен многокомпонентными структурами, граничные поверхности которых состоят из поверхностей вращения и плоскостей, перпендикулярных одной общей оси вращения (рис.1).

Такой выбор определяется большим количеством практически важных задач, в которых изучаются свойства объектов, технология изготовления которых подразумевает указанные свойства симметрии.

Естественно, такое ограничение класса объектов не принципиально, и выбрано в качестве примера для анализа эффективности применения графических ускорителей в расчетах.

Далее. Рассматриваются многокомпонентные объекты, имеющие слоистую структуру с кусочно-постоянными свойствами. Описание таких структур строится следующим образом. Задается совокупность замкнутых оболочек $\{Q_k\}_{k=1}^K$ и соответствующая последовательность приоритетов материалов $\{p_k\}$. Считается, что материал с меньшим p «вытесняет» материал с большим p (рис.1). Приоритетом $p=0$ всегда обладают пустоты (воздух, вакуум и т.д.).

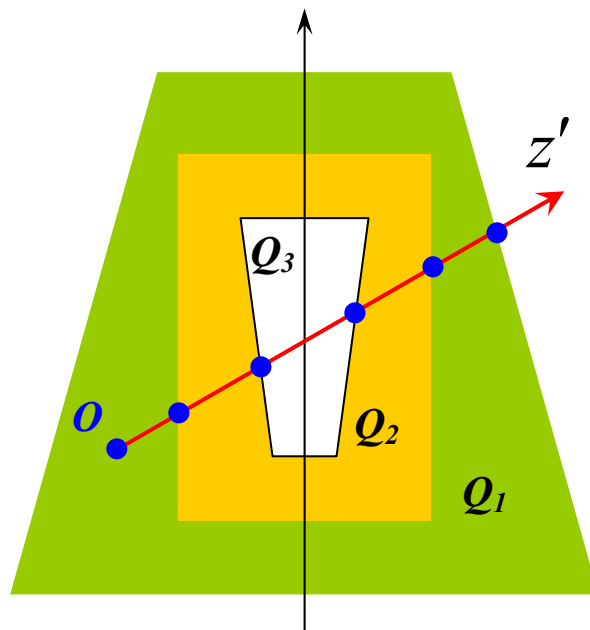


Рис.1. Описание многокомпонентного объекта и его трассировка.

Например, на рис.1 материал оболочки Q_3 имеет приоритет $p_3 = 0$, вещество оболочки Q_2 имеет приоритет $p_2 = 1$, а Q_1 имеет приоритет $p_1 = 2$. В этом примере внутри оболочки Q_3 – пустота, между оболочками Q_3 и Q_2 – материал 2, между Q_1 и Q_2 – материал 1.

Такой способ описания объекта является экономичным и удобным как с точки зрения минимизации вычислительных ресурсов, требуемых для его определения, так и в силу необходимости многократной (до 10^{10} и более раз) трассировки облучаемого объекта.

Трассировка объекта. Задачей трассировки является определение точек пересечения траекторий фотонов с граничными поверхностями объекта для определения оптической толщины соответствующих отрезков траектории фотона.

Разработан экономичный алгоритм трассировки, основанный на определении точек пересечения лучом каждой из оболочек объекта вдоль фотонной траектории после очередного взаимодействия фотона с веществом.

Вначале рассчитываются все точки пересечения текущего луча с оболочками объекта, причем начало этого луча, если оно находится внутри какой-либо оболочки объекта, считается первой точкой пересечения с соответствующей компонентой объекта («вхождение» в вещество той компоненты, в которой находится начало очередного звена траектории; точка O на рис. 1). Затем найденные точки (синие точки на рис. 1) упорядочиваются по возрастанию координаты z' системы координат, связанной с началом луча и полярной осью, направленной вдоль движения фотона.

При трассировке простейшие составляющие комплексных объектов рассматриваются отдельно. Кроме этого определяются точки пересечения траектории фотона с горизонтальными граничными поверхностями.

Отметим, что, как следует из вышеизложенного, трассировка объекта требует решения огромного числа квадратных уравнений, поскольку каждая траектория фотона состоит из нескольких лучей, а общее число таких траекторий может достигать 10^9 и более. Приведенный в [8] пример показывает, в частности, высокую эффективность применения графических ускорителей для отыскания корней квадратных уравнений.

Процесс моделирования облучения объекта требует многократного решения задачи о пересечении луча, идущего вдоль траектории частицы из источника излучения, с объектом. При этом выбор направления первоначального движения фотона определяется в случае, например, плоского или точечного изотропного источника случайным образом (в соответствии с равномер-

ным распределением либо координат начала луча на плоскости, либо распределением направлений внутри соответствующего телесного угла).

В такой ситуации важным является вопрос о минимизации количества «лишних» запущенных частиц, траектории которых не пересекают объект. В общем случае, решение этого вопроса является нетривиальным. Поэтому при построении рассматриваемого метода решения исходной задачи был разработан алгоритм **засветки объекта** фотонами, который является в некотором смысле «оптимальным». В настоящей работе мы не будем на этом останавливаться.

Алгоритм построения траекторий частиц.

Рассмотрим вначале **однопроцессорный** вариант реализации рассматриваемого алгоритма.

В этом варианте расчетный алгоритм представляет собой последовательное независимое моделирование заданного числа случайных траекторий фотонов с последующей обработкой результатов (оценкой математического ожидания искомого распределения). Каждая траектория состоит из различного числа прямолинейных участков – звеньев – между точками взаимодействия квантов с веществом (рассеяния или поглощения - в этом случае траектория обрывается). В процессе моделирования случайной траектории определяется аддитивный вклад каждого звена траектории в общий результат.

Вычислительная схема моделирования на каждом «звене» траектории одинакова, различает расчеты лишь состояние фотона в начале звена.

Такие алгоритмы, имеющие большое число независимых вычислительных ветвей (в данном случае фотонных историй), легко параллелятся и масштабируются (больше фотонных историй — выше точность результатов), причем на любых архитектурах, в том числе на тех, в которых присутствуют лишь минимальные способы взаимодействия между параллельными ветвями. К таковым, как было показано в [8], относится и технология CUDA, реализуемая на аппаратных средствах, изначально предназначенных для совершения большого числа однотипных независимых операций.

Таким образом, естественной представляется попытка реализовать описанный алгоритм решения рассматриваемой задачи с использованием указанной технологии.

Простой вариант параллельного алгоритма.

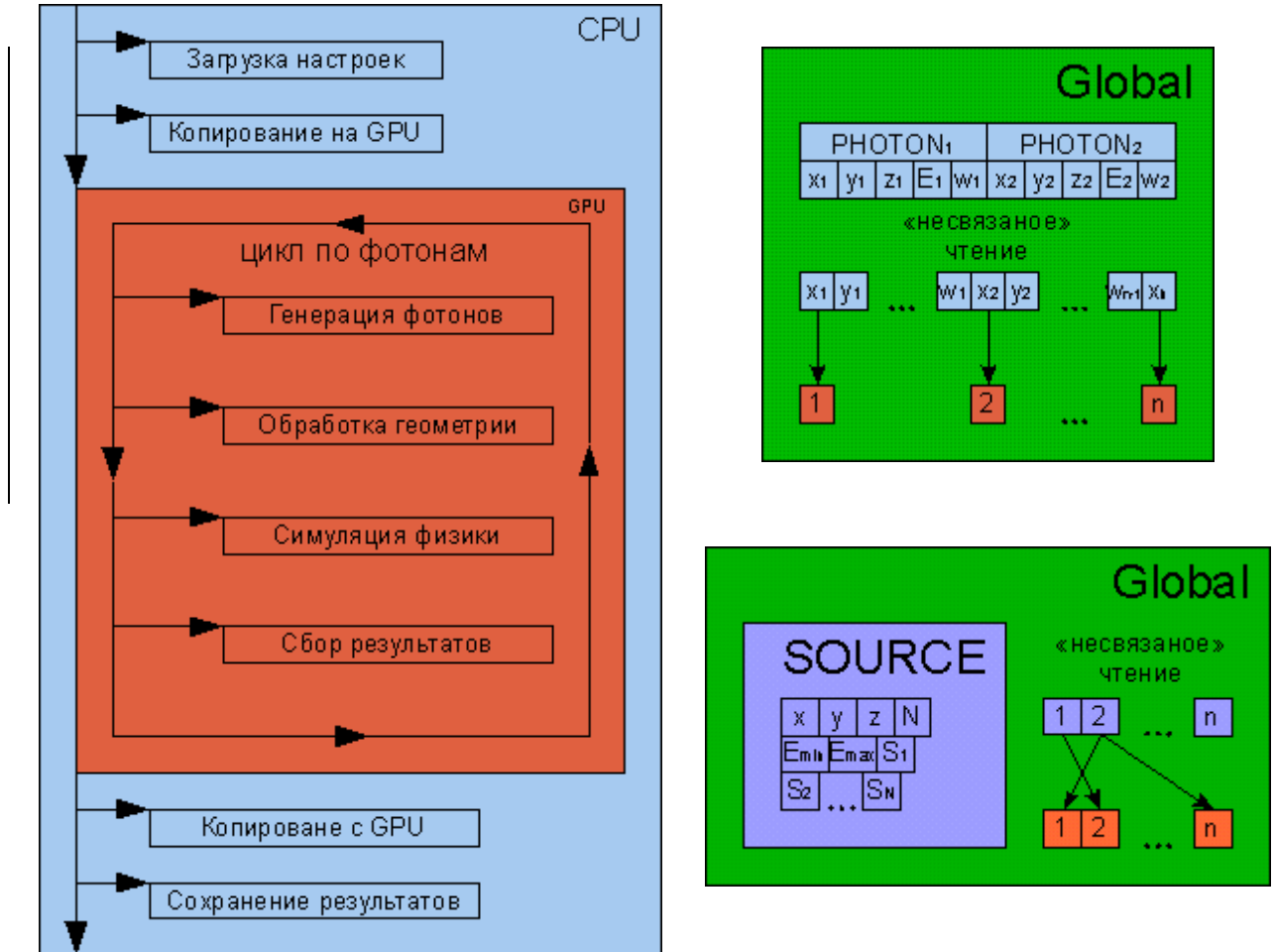


Рис.2. Схема простого варианта параллельной реализации.

Реализация простого варианта параллельной версии описанного алгоритма представляет собой единственное ядро (левая часть рис. 2), в каждом потоке которого циклически обрабатываются случайные фотонные траектории. Быстрая разделяемая память (Shared, см. рис.6 из [8]) практически не используется, а все данные хранятся в глобальной памяти (Global, справа на рис. 2), в структурах, идентичных использованным в однопроцессорной версии. В результате, кроме того, что все обращения осуществляются к медленному типу памяти (Global), более 90% из них являются «не связанными» (см. рис.8 из [8]).

Таким образом, работа с памятью в данной реализации не оптимизирована с учётом особенностей архитектуры и является неэффективной.

Вычислительная схема метода простых испытаний (моделирование естественных процессов методом Монте-Карло) порождает сильно расходящиеся потоки (ветви, рис. 3), то есть потоки, для которых исполняемый код зависит от обрабатываемых ими данных из-за обилия условных переходов. Это обстоятельство заметно уменьшает эффективность выполнения параллельных вычислений аппаратными средствами.

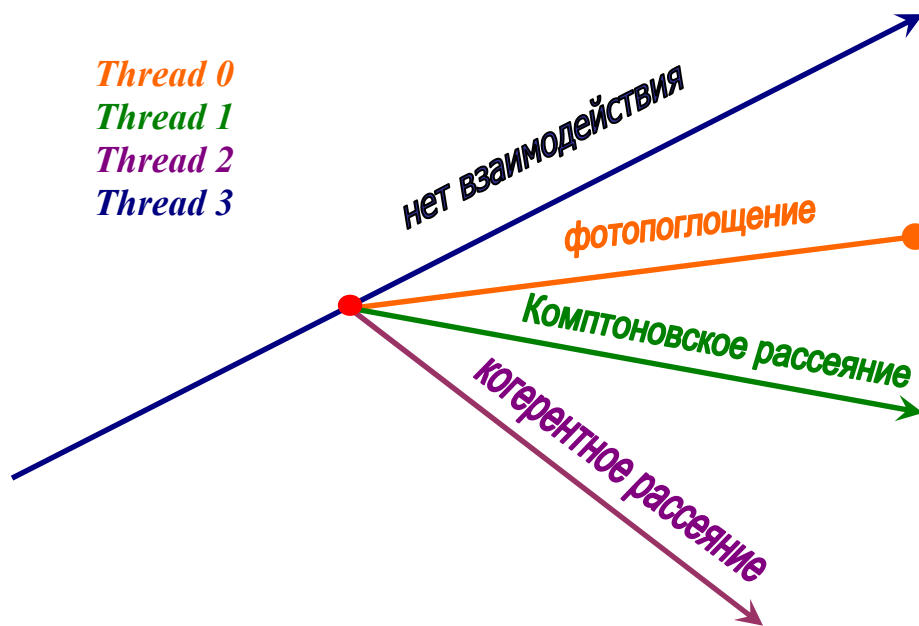


Рис.3. Схема метода простых испытаний

В результате такого подхода 90% времени либо видеоускоритель «ожидает память», либо одни потоки «ждут» окончания выполнения других. Эффективность параллельной версии алгоритма в такой реализации составила трехкратное увеличение скорости расчета по сравнению с однопроцессорным вариантом. При этом загрузка аппаратных средств (графической системы) составила около 10%.

Эффективный вариант параллельного алгоритма.

Более глубокое изучение аппаратной части (возможностей видеоадаптера) и средств программирования, предоставляемых технологией CUDA, по-

зволяет разработать принципиально новую схему построения параллельной версии рассматриваемого алгоритма.

В этой схеме были проведены следующие усовершенствования вычислительного алгоритма и его программной реализации:

- Разработана весовая модификация метода Монте-Карло, в которой моделирование случайной траектории фотона проводится «по столкновениям». То есть предполагается, что в каждой точке взаимодействия фотон «выживает» с весом, равным вероятности не поглотиться [6]. При этом число столкновений для каждой траектории одно и то же и выбирается из априорных соображений, либо путем предварительного вычислительного эксперимента. Такой вариант алгоритма позволяет, во-первых, уменьшить дисперсию результатов и, во-вторых, минимизировать число условных операторов в программной реализации.
- Предложен и реализован «многоядерный» вариант кода. В этой схеме каждый этап моделирования отдельного звена траектории фотона (трассировка, моделирование физических процессов, сбор данных) рассчитывается отдельным ядром. Это дает возможность добиться большой степени однородности потоков ядра и, тем самым, максимально упростить обработку данных в пределах одного ядра. С учетом того, что загрузка и выгрузка ядра практически не требует дополнительный ресурсов, такой подход оказывается оптимальным. Отметим, однако, что его реализация требует тщательной проработки вычислительной схемы и аккуратное выделение однородных частей алгоритма.
- Основное внимание было уделено работе с памятью системы, поскольку обменные операции являются наиболее тяжеловесными при программировании с применением технологии CUDA. Анализ алгоритма и программных, а также аппаратных средств, позволил оптимизировать использование различных видов памяти графического адаптера, что дало более чем десятикратное увеличение эффективности параллельной

программы.

Алгоритм моделирования траекторий квантов разрабатывался с учетом двух основных требований, предъявляемых к расчетам методом Монте-Карло вообще, и к реализации соответствующего программного кода на графическом ускорителе в частности.

Напомним, что в рассматриваемой задаче искомой величиной является энергия, поглощенная в облучаемом объекте. Поглощение энергии рентгеновского или гамма-излучения (с энергией квантов до 1 МэВ) идет по двум каналам – фотопоглощение и комптоновское рассеяние. Стандартный метод простых испытаний подразумевает розыгрыш одного из вероятных событий (комптоновское или когерентное рассеяние или фотопоглощение, рис. 3) в каждой точке взаимодействия кванта с веществом объекта. Такой подход порождает обилие условных переходов при вычислении характеристик соответствующего процесса и обладает достаточно медленной сходимостью. В результате случайного выбора одного из возможных процессов энергия, отдаваемая фотоном объекту, вычисляется либо как результат фотопоглощения, либо как разница между энергиями фотона до и после комптоновского рассеяния, либо поглощения энергии не происходит вовсе (в случае, когда происходит когерентное рассеяние). Таким образом, в каждой точке взаимодействия кванта с веществом (узле траектории) происходит только один процесс, причем не все они приводят к поглощению энергии.

Гораздо более эффективным является метод, относящийся к классу «весовых» модификаций метода Монте-Карло, когда полагают, что в каждом узле траектории для кванта реализуются обе возможности – рассеяние и поглощение. При этом поглощенному фотону приписывается «вес», равный вероятности поглощения, а рассеянному – вес, равный вероятности «выжить». Тип рассеяния разыгрывается (при этом, если происходит комптоновское рассеяние, учитывается соответствующая энергия, отданная веществу) и траектория продолжается.

После очередного взаимодействия с веществом объекта (если только это взаимодействие не было поглощением) квант может остаться в объекте, а может покинуть его. Это порождает дополнительные условные переходы в алгоритме. Поэтому в предложенном алгоритме считается, что фотон никогда не вылетает из объекта. Для этого его вес умножается на вероятность «невывлета».

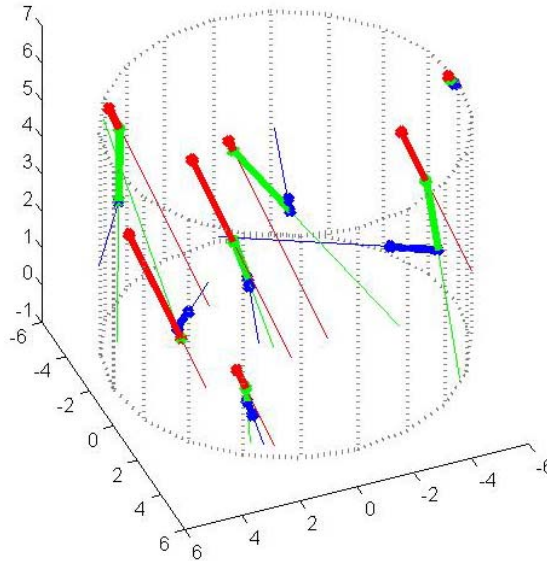


Рис. 4. Траектории фотонов в цилиндре.

Описанная модификация позволяет учитывать вклад каждого звена траектории в поглощенную энергию (тем самым снижается дисперсия статистической оценки искомой величины). Кроме того, количество звеньев для каждой траектории оказывается одинаковым, что минимизирует количество «ветвей» и логических переходов в алгоритме. На рис. 4 в качестве примера изображены траектории фотонов в цилиндрическом объекте. При этом число звеньев траектории ограничено тремя (на рисунке – красный, зеленый, синий цвета соответствуют номеру звена траектории).

Общая схема параллельной реализации рассматриваемого алгоритма изображена на рис. 5. С целью оптимизации работы видеоускорителя была предложена и реализована *многоядерная* схема проведения вычислений. Анализ алгоритма позволил выделить четыре более или менее однородных части (см. ниже), для каждой из которых строится соответствующее ядро. Слева в

синем прямоугольнике изображено содержание и порядок запуска ядер с центрального процессора на ГПУ.

1. **Генерация фотонов** — в рамках данного ядра, в каждом из потоков на основе характеристик источника, задаваемых настройками, генерируется «текущий» фотон. Для него определяются положение, направление движения, начальная энергия и спектральный вес. В зависимости от настроек поддерживаются конусный и плоский источники, групповой и линейчатый типы спектра.
2. **Обработка геометрии** — это ядро, в котором все потоки, на основе характеристик соответствующего «текущего» фотона, а также параметров объектов, задаваемых в настройках, генерируют (рассчитывают) набор интервалов пересечения траектории фотона с объектами. Интересно отметить, что максимальный коэффициент ускорения по сравнению с однопроцессорным вариантом достигается именно на расчетах с большим количеством объектов.
3. **Симуляция физики**. В данном ядре, на основе интервалов пересечения, полученных на предыдущем шаге, а также характеристик «текущих» фотонов, происходит моделирование взаимодействий последних с объектами. В рамках такого моделирования проводится расчет вероятности взаимодействия, вычисление условных вероятностей различных типов взаимодействия, розыгрыши координат точки, вида взаимодействия, нового направления движения фотона (если разыгранный тип взаимодействия – рассеяние), пересчет направления движения «текущего» фотона. В результате моделирования меняются характеристики «текущего» фотона, а также сохраняется необходимая информация о поглощенной энергии для каждого из каналов (фотопоглощение, рассеяние).
4. **Сбор результатов**. На основе энергетических характеристик «текущих» фотонов, а также информации о поглощенной энергии, определяется вклад последних взаимодействий фотонов в общий результат.

В начале работы необходимо произвести загрузку настроек — на данном этапе загружается информация об объектах, источнике, табличные данные, а также задаются параметры источника для обеспечения наиболее эффективной «засветки» объектов; и копирование необходимой информации на ГПУ. В конце работы ЦПУ собирает информацию с ГПУ и сохраняет результаты расчетов.

Предложенная многоядерная схема вычислений позволяет оптимизировать работу с памятью ГПУ (см. ниже), а также минимизировать количество условных переходов в расчетном алгоритме.

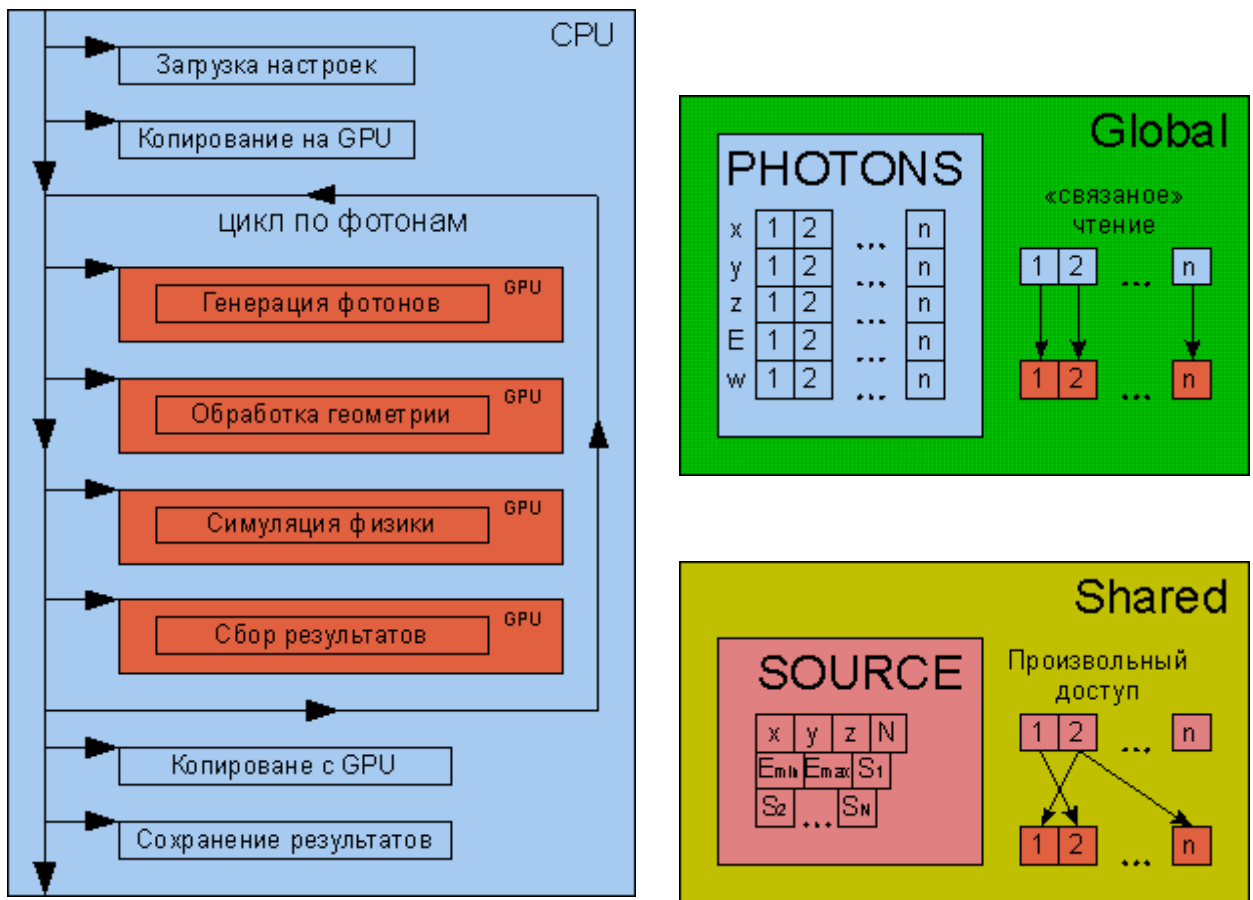


Рис.5. Схема многоядерной реализации алгоритма.

В правой части рисунка 5 схематично изображена работа с *памятью* ГПУ. Анализ исходных данных, а также величин, рассчитываемых в процессе моделирования, позволил условно разбить их на две группы – группа «детерминированных» данных (то есть данных, запрос к которым детерминирован и происходит одновременно для всех потоков) и группа данных со случайным

доступом (выбор случайной величины из массива значений и в разное время обращения).

К первой группе данных относятся, например, «фотонные» характеристики - энергия, координаты, статистический вес, направление движения и другие. Эти данные размещаются в «глобальной» памяти графического ускорителя. При этом они организуются таким образом, чтобы запросы к ним были связанными [8].

Данные, к которым предполагался случайный доступ (таблицы рассеяния и ослабления, характеристики объектов) и для которых невозможно обеспечить «связанность» запросов, помещаются в быструю разделяемую память, отлично подходящую для такого рода работы.

Многоядерная структура алгоритма в совокупности с организацией размещения данных позволяет загружать в быструю память одновременно только те данные, которые необходимы на данном этапе алгоритма (в данном ядре), что существенно добавляет свободы в выборе объемов табличных данных, задании числа объектов и т.п. Это увеличивает потенциальную масштабируемость набора исходной информации.

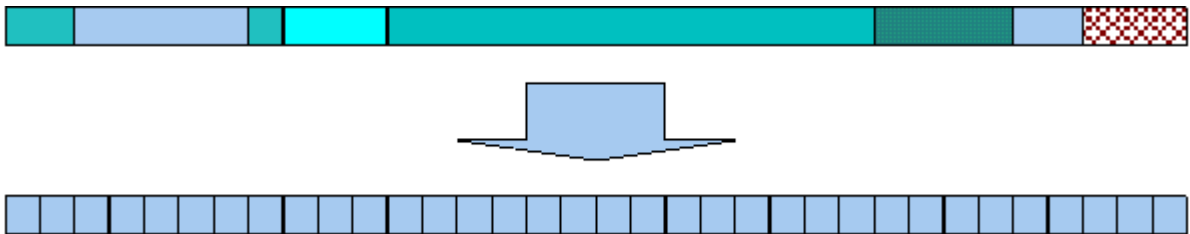


Рис.6. Выравнивание и «гомогенизация» данных.

Оптимизация способа загрузки данных в быструю память ГПУ была достигнута следующим способом.

Во-первых, размер каждой структуры, загружаемой в эту память, в «словах» был выровнен путём добавления в конец незначащих байтов до кратного количеству потоков в блок (рис. 6). Во-вторых, структуры разнородных данных представлялись как массивы «слов»; загрузка осуществлялась порциями, в которых каждый поток отвечал за загрузку единственного эле-

мента, отвечающего его номеру в блоке. После загрузки в быструю память осуществлялся обратный переход к разнородным данным (рис. 7).

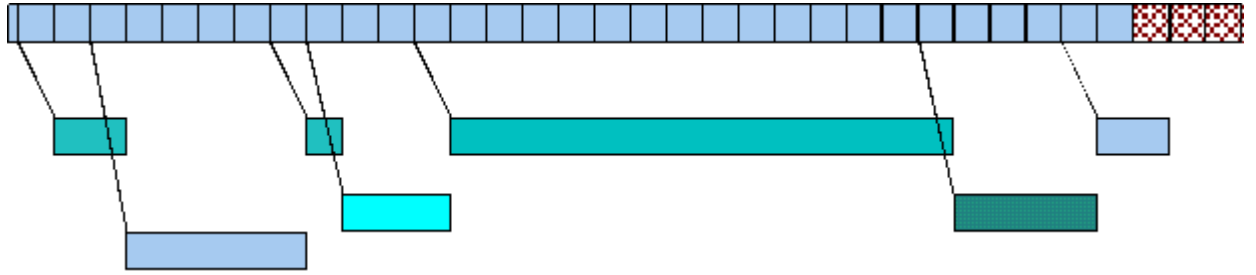


Рис.7. Переход к разнородным данным.

Пример расчета с использованием гибридных кластеров.

В качестве примера использования гибридных кластеров для решения актуальных прикладных задач, рассмотрим задачу определения спектральной плотности энергии, поглощенной в объекте, облучаемом гамма-излучением. Такие распределения важны в ряде областей исследования взаимодействия излучения с веществом, в частности, при интерпретации результатов измерений, при оценке спектра быстрых электронов, порождаемых в материале объекта в результате фотопоглощения и комптоновского рассеяния фотонов и др.

Если записать связь между энергетическим распределением исходного гамма-излучения и спектром поглощенной энергии в операторном виде:

$\varphi(E_{ab}) = Af(E_\gamma)$ и определить функцию с помощью соотношения $G(E_{ab}, E_\gamma) = A\delta(E_{ab} - E_\gamma)$, то $\varphi(E_{ab}) = \int G(E_{ab}, E_\gamma) f(E_\gamma) dE_\gamma$, где, $\varphi(E_{ab})$ - спектр поглощенной энергии, $f(E_\gamma)$ - спектр исходного гамма-излучения [2].

Имея это в виду, легко видеть, что для проведения серии оценок спектральной плотности поглощенной энергии для различных спектров гамма-излучения, достаточно один раз рассчитать функцию $G(E_{ab}, E_\gamma)$.

Пример такого расчета приведен на рис. 8. На этом рисунке изображена структура распределения поглощенной энергии по энергетическим ячейкам $\{\Delta E_{ab}, \Delta E_\gamma\}$, которая является графическим изображением функции $G(E_{ab}, E_\gamma)$.

Приведенные результаты получены с помощью разработанного авторами алгоритма статистического моделирования процессов взаимодействия гамма-излучения с веществом многокомпонентных объектов. В основе этого алгоритма лежит описанная выше модификация метода Монте-Карло, учитывающая особенности использования графических ускорителей для проведения параллельных вычислений на гибридных кластерах.

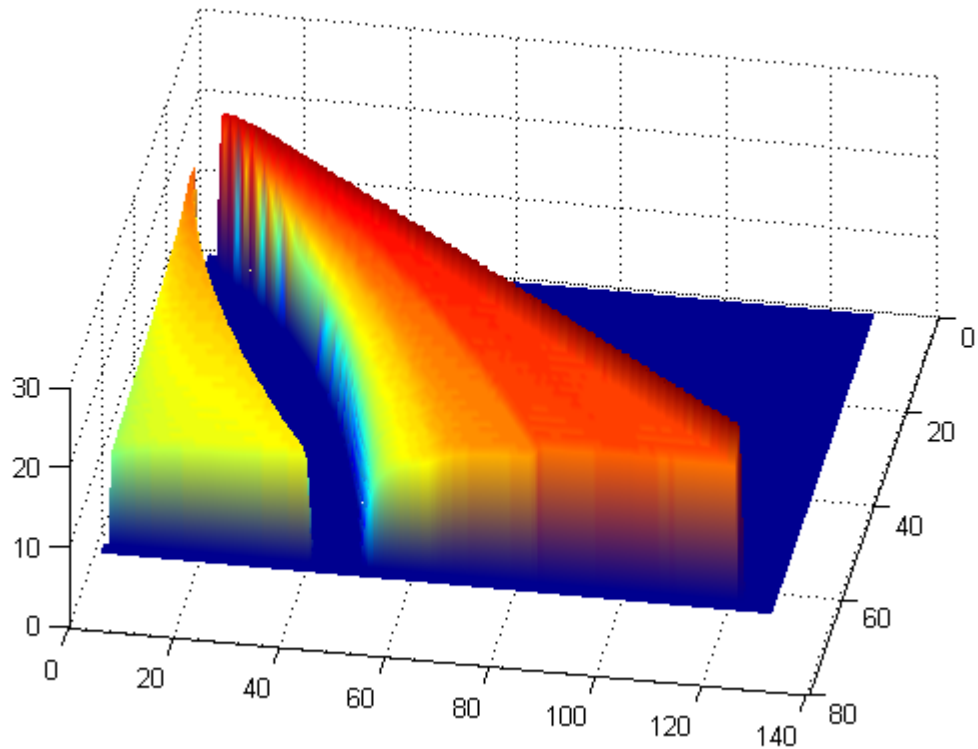


Рис. 8. Структура распределения поглощенной энергии по энергетическим ячейкам. Расчет проводился на 4х узлах гибридного кластера. Всего использовано – 8 GeForce 295GTX

Полученное ускорение: с использованием одного видеоадаптера nVidia GeForce GTX 275 ~80 раз, при использовании ускорителя nVidia Tesla ~320 раз, при использовании четырёх узлов гибридного кластера (http://www.kiam.ru/MVS/research/mvs_express.html) ~570 раз.

С помощью рассчитанной функции $G(E_{ab}, E_\gamma)$ получено распределение спектра поглощения по глубине объекта. На рис. 9 и 10 изображены графики спектральной плотности поглощенной энергии вблизи облучаемой поверхно-

сти пластины (рис.9) и у противоположной граничной поверхности (рис.10). Толщина пластины соответствует приблизительно длине пробега фотона.

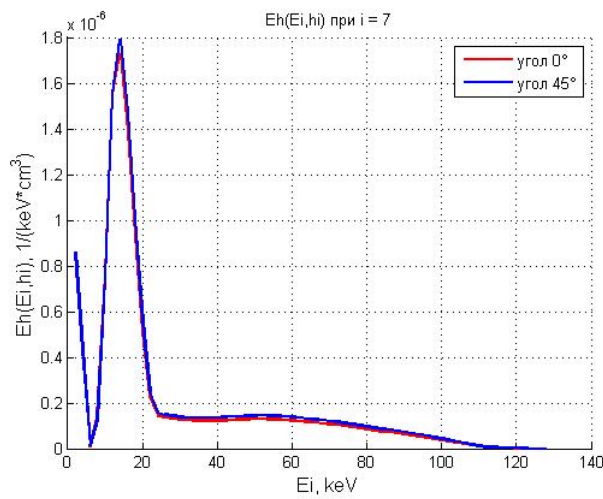


Рис.9. Спектр поглощенной энергии вблизи облучаемой поверхности объекта.

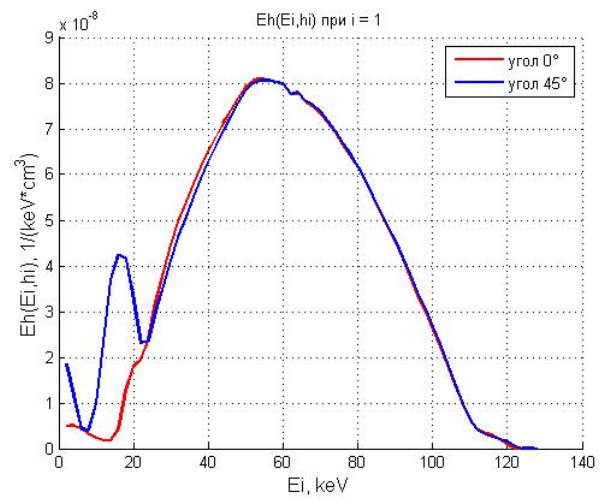


Рис.10. Спектр поглощенной энергии у «дальней» поверхности объекта.

Расчеты проведены для двух случаев: нормальное падение потока гамма-квантов и падение под углом 45 градусов к нормали к поверхности.

Результаты расчетов соответствуют предварительным интегральным оценкам поглощенной энергии. Проведенные исследования позволяют оценить, в частности, спектральные характеристики рождающихся внутри материала объекта быстрых фото- и комптоновских электронов.

Заключение.

Разработаны и реализованы подходы к построению алгоритмов и созданию соответствующих кодов для проведения параллельных расчетов на гибридных вычислительных комплексах при моделировании поглощения ионизирующего излучения в многокомпонентных средах. Построены эффективные модификации метода Монте-Карло, ориентированные на использование графических ускорителей. Разработан способ организации данных для эффективного использования памяти видеоадаптера.

Анализ результатов параллельных вычислений на двух гибридных кластерах, имеющих в ИПМ и ИММ РАН, показали высокую эффективность как разработанных подходов к построению алгоритмов, так и перспектив-

ность использования гибридной вычислительной техники в прикладных исследовательских задачах.

Литература.

1. А.И. Чумаков. Действие космической радиации на интегральные схемы. – М.: Радио и связь, 2004.
2. В.К. Федоров, Н.П. Сергеев, А.А. Кондрашин. Контроль и испытания в проектировании и производстве радиоэлектронных средств. М.: Техносфера, 2005.
3. А.И.Ахиезер, В.Б.Берестецкий. «Квантовая электродинамика», Издательство «Наука», Москва, 1969.
4. Hubbell J.H., Veigele W.J., Briggs E A., Brown R.T., Cromer D.T., and Howerton R.J. Atomic Form Factors, Incoherent Scattering Functions, and Photon Scattering Cross Sections. J. Phys. Chem. Ref. Data 4, 471-538 (1975); erratum in 6, 615-616 (1977).
5. Экспериментальная ядерная физика, под ред. Э. Сегре, Издательство «Иностранной литературы», Москва, 1955.
6. В.П.Загонов, М.Е.Жуковский, С.В.Подолько, М.В.Скачков, Г.-Р.Тиллак, К.Беллон. Применение поверхностно ориентированного описания объектов для моделирования трансформации рентгеновского излучения в задачах вычислительной диагностики. // М., Математическое моделирование. - 2004, т.16, №5, с.103-116.
7. С.М.Ермаков, Г.А.Михайлов. Статистическое моделирование. - М.: Наука, 1982.
8. М.Е.Жуковский, Р.В.Усков. О применении графических процессоров видеоускорителей в прикладных задачах. // Препринт Института прикладной математики им. М.В.Келдыша РАН, №2, 2010.