

# 二维非结构网格中子输运方程并行 $S_n$ 计算

张俊, 吴宏春\*

(西安交通大学 能源与动力工程学院, 陕西 西安 710049)

**摘要:** 文章针对三角形非结构网格, 在几何区域分解并行的基础上, 利用  $S_n$  方法求解中子输运方程的源迭代过程中各方向的计算是独立的这一特点, 考虑各方向扫描的并行性, 设计了各方向同时扫描的并行流水线算法, 并对一单群  $S_8$  输运计算问题进行了验证。结果表明: 当处理器个数为 32 时, 加速比达 23.57, 并行效率为 0.736。

**关键词:** 中子输运; 非结构网格; 并行计算;  $S_n$  方法

中图分类号: TL323

文献标志码: A

文章编号: 1000-6931(2009)01-0062-05

## Parallel $S_n$ Algorithm for 2-D Transport Equations Based on Unstructured Grid

ZHANG Jun, WU Hong-chun\*

(School of Energy and Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

**Abstract:** Aiming at the triangle unstructured grid, based on the domain decomposition technique, a new direction parallel  $S_n$  sweeping algorithm was developed with the utilization of the independence of different neutron flight directions during the  $S_n$  sweeping process. It was verified with a mono-group  $S_8$  neutron transport calculation problem. The results show that when the CPU number is 32, the speedup ratio is 23.57, and the parallel efficiency is 0.736.

**Key words:** neutron transport; unstructured grid; parallel algorithm;  $S_n$  method

基于非结构网格的几何区域分解的并行计算研究是目前对 neutron 输运方程<sup>[1]</sup>进行并行计算的研究热点。美国 Los Alamos 国立实验室的 Shaw<sup>[2]</sup>在非结构网格上采用了低复杂性低排序启发式算法来决定任意网格划分上的扫描排序, 在 126 个处理机时得到了 53 倍的加速效果。北京应用物理与计算数学研究所的莫则尧

等<sup>[3]</sup>提出了基于非结构网格区域分解的并行流水线  $S_n$  扫描算法, 通过设计具有不同内在并行度和通信面体比的区域分解方法和队列插入算法, 对 44 群、 $S_4$  (16 个方向)、网格规模分别为 750 个网格单元和 2 500 个网格单元的两个物理模型分别使用两台并行计算机的 92 个和 256 个 CPU 进行计算, 获得 72 倍和 78 倍以上

收稿日期: 2007-09-08; 修回日期: 2008-01-22

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (10475064, 10605017)

作者简介: 张俊 (1982-), 男, 山西应县人, 硕士研究生, 核能科学与工程专业

\* 通信作者: 吴宏春 (1964-), 男, 教授, E-mail: hongchun@mail.xjtu.edu.cn

(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. <http://www.cnki.net>

的加速效果。国防科学技术大学的研究人员<sup>[4]</sup>结合按群划分和按区域分解的方法设计了并行程序,对问题规模为 900 个网格、24 群、\$S\_4\$ 角度方向的测试模型,在 96 个 CPU 的 PC 机群上运行时,达到了 45% 的并行效率。由于已有的并行算法的消息传递次序强烈依赖于扫描方向,使得通信和计算重叠的几率很小。实际应用中,只有所计算问题的能群数较大时才能得到较好的并行效果,而在计算核工程中常见的少群问题时并行效果不理想。

这样,就需要在几何区域分解并行的基础上,开发利用方向扫描时的并行性来提高并行计算效果。事实上,使用 \$S\_n\$ 方法解中子输运方程,在源迭代扫描计算过程中各方向的计算是无关的。本工作利用这一特点研究设计基于区域分解的各方向同时计算的并行 \$S\_n\$ 计算模型,并对一单群 \$S\_8\$ 输运计算问题进行测试。

### 1 中子输运方程及数值解法

二维 Cartesian 坐标系下多群中子输运方程的稳态一般形式是:

$$\begin{aligned} \Omega \cdot \Delta \psi_g(r, \Omega) + \Sigma_{r,g} \psi_g(r, \Omega) = & \\ \sum_{g'=1}^G \int_{\Omega'} \Sigma_{s,g' \rightarrow g}(r, \Omega' \rightarrow \Omega) \times \psi_{g'}(r, \Omega') d\Omega' + & \\ \frac{\chi_g}{4\pi} \sum_{g'=1}^G \int_{\Omega'} \Sigma_{r,g'}(r) \times \psi_{g'}(r, \Omega') d\Omega' + S_g(r) & \\ g = 1, G & \end{aligned} \quad (1)$$

对方向角度变量采用 \$S\_n\$ 方法进行离散:

$$\begin{aligned} \Omega_m \cdot \Delta \psi_g(r, \Omega_m) + \Sigma_{r,g} \psi_g(r, \Omega_m) = & \\ \sum_{l=0}^G \sum_{n=-l}^l (2l+1) \frac{(l-n)!}{(l+n)!} \Sigma_{r,l}(r) \phi_{l,n} Y_{l,n}(\Omega_m) + & \\ \frac{\chi_g}{4\pi} \sum_{g'=1}^G \Sigma_{s,g' \rightarrow g}(r) \phi_{0,0} + \frac{1}{4\pi} S_g(r) & \\ g = 1, G \quad m = 1, M & \end{aligned} \quad (2)$$

在几何空间上,将系统区域用三角形非结构网格剖分,并对每一个非结构网格做有限元离散。在非结构网格上,对任意单元 \$D\$, 边界为 \$\partial D\$, 单位外法线方向为 \$\mathbf{n}\$, 对给定的方向 \$\Omega\_m\$, 令 \$\partial^- D = \{\partial D: \mathbf{R} \in \partial D, \text{且 } \Omega\_m \cdot \mathbf{n} < 0\}\$ 为入射边, \$\partial^+ D = \{\partial D / \partial^- D\}\$ 为出射边, 分别表示中子通量将沿该边界输入和输出。图 1 示出了三角形非结构网格与方向之间的两种关系, 其中, \$\Omega\_m\$、\$\mathbf{n}\$ 分别用实、虚箭头表示。在区域 \$D\$ 上, 满足定

解条件的有限元方程为:

$$\begin{aligned} B \left( \sum_{k=1}^6 \alpha_k \mu_{i,k}, \mu_{i,j} \right) = F(\mu_{i,j}) \\ j = 1, \dots, 6 \quad \forall \mu_{i,j} \in P_1 \end{aligned} \quad (3)$$

其中: \$B(a, b) = \int\_S \Omega \cdot \Delta a(x, y) b(x, y) dx dy + \int\_S \Sigma a(x, y) b(x, y) dx dy\$; \$F(b) = \int\_S Q(x, y) b(x, y) dx dy\$; \$P\_1\$ 为双线性有限元空间。

上式中各物理符号的意义参见参考文献 [1-4]。

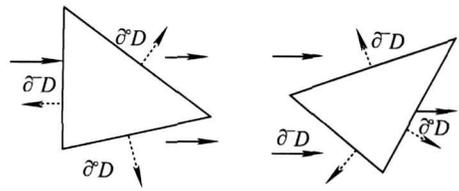


图 1 方向与非结构网格的两种关系  
Fig. 1 Relationships between unstructured mesh and direction

由方程(2)可看到, 方程右边的源项是角通量的函数, 在计算中需要对所有能群和方向的离散角通量进行积分。在实际应用中, 一般用源迭代法求解。综上所述, 非结构网格上求解中子输运方程的有限元方法描述如下。

- 1) 对所有的方向 \$\Omega\_m\$, 由上下游的依赖关系确定所有网格的计算顺序 \$I\_m\$。
- 2) 计算裂变源项 \$F\Psi\_m\$ 和散射源项 \$S\Psi\_m\$。
- 3) FOR(能群) { FOR(方向) { FOR(\$I\_m\$ 确定的单位顺序, 对各个单元网格) {

(3.1) 合成相应网格的刚度矩阵、右端向量, 并引入定解条件。

(3.2) 解线性方程(3)得到相应能群、相应方向此网格所有节点的通量。

(3.3) 更新本方向本网格内所有节点的通量矩。}}}

$$4) \text{ 用公式 } k^n = \frac{\int_V \Sigma_r \psi^n dV}{\int_V \Sigma_t \psi^{n-1} dV} \text{ 求出 } k_{\text{eff}},$$

更新 \$k\_{\text{eff}}\$ 及标通量。

- 5) 判断 \$k\_{\text{eff}}\$ 及标通量是否收敛, 若否, 转到 2) 继续计算。

## 2 基于网格区域分解的所有方向同时扫描并行 $S_n$ 计算模型

串行  $S_n$  扫描算法在实际应用中被证明是行之有效的,能正确地求解中子输运方程。因此,考虑中子输运方程的并行计算时,希望不改变该算法的数值收敛性质,从而保证并行算法和串行算法的数值计算结果的一致性。大量的研究表明,只有设计基于区域分解的并行算法才能实现中子输运方程的可扩展并行计算。同时,由式(1)可看到,在使用源迭代法计算的过程中,由于将右端各项均定义为已知,使得各方向的扫描计算过程无关,这样,设计基于几何区域分解的所有方向同时扫描的并行  $S_n$  算法是可行的。

由以上讨论可知,在每个网格单元上,定义了  $M_n$  个方向,将单元与各个方向匹配,称之为元素。在扫描过程中,各元素的计算存在依赖关系,对于任意的元素  $E$  和  $F$ ,如果元素  $F$  依赖于元素  $E$ ,则称  $F$  为  $E$  的下游元素, $E$  为  $F$  的上游元素。区域划分后,在本进程中下游元素的元素为出口元素,没有上游元素的元素为入口元素。在并行计算过程中,出口元素和入口元素处会发生消息的传递。

依据串行计算过程,设计基于几何区域分解的所有方向同时计算的并行计算过程描述如下。

1) 按区域分解算法将所有网格分解为  $P$  个互不重叠的子区域,分配给  $P$  个进程。

2) FOR(方向){得到本处理器相应方向的入口元素数组、出口元素数组。}

3) 计算裂变源项  $F\Psi_m$  和散射源项  $S\Psi_m$ 。

4) WHILE(仍有元素没有被计算){

(4.1) 对所有的方向  $\Omega_m$ ,按排序算法,依次得到本进程各方向可计算元素,并确定这些元素的计算顺序  $I_m$ 。

(4.2) FOR(方向){

FOR( $I_m$  确定的单位顺序,对各个单元网格){

FOR(群){

(4.2.1) 合成相应网格的刚度矩阵、右端向量,并引入定解条件。

(4.2.2) 解线性方程(3)得到相应能群、相应方向此元素所有节点的通量。

(4.2.3) 更新本方向本网格内所有节点的

通量矩。}

(4.2.4) IF(元素是出口元素){传递本元素出射边的角通量及节点编码到需要的处理器。}}

(4.3) 接收所有到达的消息,同时更新相应节点的通量矩。}

5) 计算各处理器的分源及标通量的最大误差,并全交换这两个数据。用公式  $k^n =$

$$\frac{\int_V \Sigma_f \Psi^n dV}{\int_V \Sigma_f \Psi^{n-1} dV} k^{n-1}$$
 求出  $k_{\text{eff}}$ 。

6) 得到  $k_{\text{eff}}$  的误差及全区域的标通量最大误差。

IF(如果二者不满足收敛要求)GOTO 3)。

显然,网格区域分解算法和元素的计算次序产生算法是影响并行  $S_n$  扫描的性能关键。

为了减少计算时的等待,发挥各方向同时计算的优势,本工作设计了如下的区域分解算法:以某一给定点作为原点,依据网格中心与坐标原点的连线与  $x$  轴所成的夹角,按由小到大的次序(夹角相同,离原点近的优先)依次排列所有的网格单元,然后均分成连续的  $P$  段,分配给  $P$  个进程。在实际应用中,选择系统区域内部的点为原点。区域划分后,每一个进程都有位于系统区域外边界上的元素。由于每一个方向都是从系统区域外边界开始扫描的,这样,在程序开始阶段,每个进程都可以开始计算,从而减少了各进程的等待用时,提高了并行计算效率。

放弃以前的优先级插入算法,设计元素的计算次序产生算法如下:首先从入口元素出发,利用元素之间的相互依赖关系,按照宽度优先原则,产生初始元素计算次序;然后从出口元素出发,利用元素之间的反向依赖关系,对初始元素计算次序进行校正,从而实现各出口元素的无冗余依次计算。

针对图 2 所示的元素依赖关系和区域划分,具体描述元素计算次序的产生过程。首先,处理器 1 中的入口元素有元素 1 和元素 2,从这两个元素出发,按宽度优先的原则,得到处理器 1 的各元素的初始计算次序如图 3a 所示;然后从出口元素 7、10、16、22 出发反向校正,分离各出口元素的计算,得到最后的计算次序如图

3b 所示。在所得到的计算次序中,处理器 1 在第 3、7、9、15 步计算后向处理器 2 传递消息。

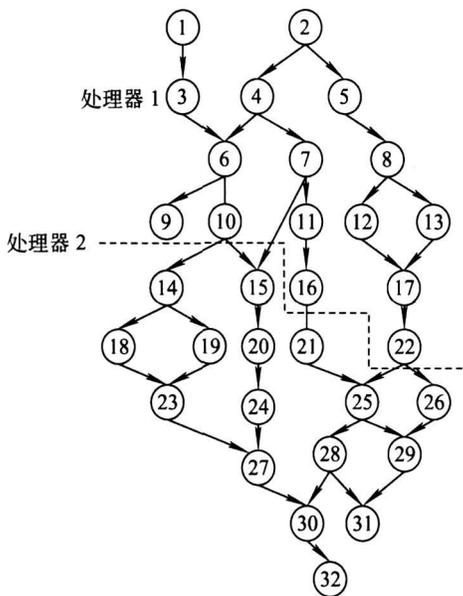


图 2 元素依赖关系示意图<sup>[2]</sup>

Fig. 2 Dependency graph of element<sup>[2]</sup>

同时扫描  $S_n$  并行算法主要由通量扫描(第 4 步)与源项更新(第 5 步)构成。基于区域分解,源项的计算是线性可扩展的,故算法的可扩展性将直接由通量扫描的扩展能力决定。下面将分析所有方向同时扫描并行  $S_n$  算法中通量扫描的可扩展性,以及它对并行机性能的要求。

通量扫描并行计算过程的计算时间主要包括:1) 区域分解后各区域的扫描计算时间;2) 消息传递时间;3) 由于区域分解以及排序计算而增加的计算时间。实践表明,第 3 部分在总时间中所占的比重很少,一般低于 1%,可不予考虑。所以,要提高并行算法的可扩展性,必须降低消息传递过程所用时间在总时间中的比重。

假设  $L$  为点对点的通信延迟,  $o$  为单位字节的平均点对点网络传输时间,1 次  $n$  个字节的点对点消息传递所需要的时间为:

$$t_n = L + n \times o \quad (4)$$

假设  $N$  为总的网格个数,  $M$  为总方向,  $G$  为总能群数,  $P$  为网格区域分解的子区域个数或者是进程的个数,  $\tau$  为每次迭代中单网格单方向单能群的平均计算时间,则通量扫描所需的总计算时间为  $N \times M \times G \times \tau$ ; 假设  $\gamma_p$  为所有进程的平均面体比。则总消息传递次数为  $N \times M \times G \times \gamma_p$ , 而每次消息传递时间为  $L + 16G \times o$ ; 假设算法的理论加速比为  $S_p$ , 则一次并行通量扫描的执行时间可近似写为:

$$T_p = N \times M \times \left[ \alpha_p \frac{\tau G}{S_p} + (1 - \rho) \times \frac{\gamma_p (L + 16G \times o)}{\beta_p} \right] \quad (5)$$

其中:参数  $\alpha_p$  为 Cache 命中率对执行时间的影响;参数  $\beta_p$  为平均可并行执行的消息传递个数,在非阻塞通信算法中,一部分通信是和计算重合的;参数  $\rho$  表示平均的通信计算重叠率。

在实际使用过程中,消息传递开销主要由并行机网络延迟  $L$  决定。据此,上式可简化为:

$$T_p = N \times M \times \left[ \alpha_p \frac{\tau G}{S_p} + (1 - \rho) \times \frac{\gamma_p L}{\beta_p} \right] \quad (6)$$

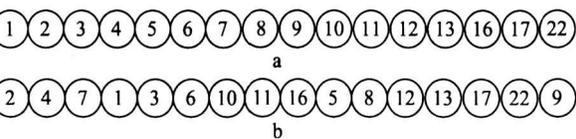


图 3 初始扫描次序(a)和最后扫描次序(b)

Fig. 3 Initial sweeping queue (a) and resultant sweeping queue (b)

本算法有如下几个优点:一方面,由于本算法实现了各出口元素的无冗余分离计算,如果此时有处理机在等待边界数据通信的话,这样做就可以尽可能早地拿到所需数据开始计算,从而减少了处理机等待时间;同时,当 1 台处理机计算完 1 个边界元素的值以后,就可以同时开始发送数据和计算位于该台处理机的其它元素,实现了处理机间通信和计算的重叠;另一方面,由于按照宽度优先原则产生初始计算次序,这样,就保证反向校正后离入口元素距离最短的出口元素优先计算,使消息传递提前。这样做大幅提高了并行计算效率。

### 3 可扩展性能分析与并行性能测试

由上一节可知,基于区域分解的所有方向

式(6)中,前一项是计算部分所用时间,后

一项是通信时间。在已有的算法中,由于消息传递次序强烈依赖于扫描方向,故  $1 < \beta_p \ll P$ ,  $0 < \rho \ll 1$ 。这时,只有能群数  $G$  较大时,才能使  $\alpha_p \frac{\tau G}{S_p} \gg (1 - \rho) \times \frac{\gamma_p L}{\beta_p}$ ,从而降低通信过程用时在总时间中的比重,得到较高并行计算效率。本工作所设计的所有方向同时扫描并行计算中,消息传递次序不再依赖于通量扫描方向,平均可并行执行的消息传递数目与已有算法相比大为增加,使得  $1 \ll \beta_p < P$ ,并且通信和计算重叠率也大幅增加。这样,在能群数较少时,也有  $\alpha_p \frac{\tau G}{S_p} > (1 - \rho) \times \frac{\gamma_p L}{\beta_p}$ ,得到较高的并行计算效率。

基于 MPI 并程序设计环境,本工作研制了中子输运并行  $S_n$  计算程序 PEFZF。并行计算环境为联想深腾 1800 集群计算机,通信延迟为  $9 \mu\text{s}$ ,计算节点为 61。将 1 个长为 96 cm、宽为 86 cm、5 区域的单能群问题剖分为 18 380 个网格,用  $S_8$  角方向进行并行计算性能测试。加速比计算结果如表 1 所列。

表 1  $S_8$  时并行计算性能

Table 1 Parallel performance for  $S_8$

处理器数目	运行时间/s	并行加速比	并行效率
1	4 246.077	1.00	1.00
8	473.781	9.71	1.12
16	278.759	15.23	0.952
24	214.492	19.80	0.825
32	180.139	23.57	0.736

从表 1 可看到,基于区域分解的所有方向同时扫描的并行算法获得了良好的加速比,甚至出现了超线性加速比(受计算机高速 Cache 的影响)。

## 4 结论

本工作在几何区域分解的基础上,附加考虑方向上的并行性,设计了一个基于几何区域分解的各方向同时扫描的并行计算模型。计算结果表明,本算法在计算能群较少的问题时,仍然能得到较好的并行加速效果。

西安交通大学理学院智能信息处理与计算实验室为本研究提供了帮助,在此表示衷心的感谢。

## 参考文献:

- [1] 谢仲生,邓力.中子输运理论数值计算方法[M].西安:西北工业大学出版社,2005.
- [2] SHAWN D P. An algorithm for parallel  $S_n$  sweeps on unstructured meshes[J]. Nuclear Science and Engineering, 2002, 140(2): 111-136.
- [3] 莫则尧,傅连祥,阳述林.非结构网格上求解中子输运方程的并行流水线  $S_n$  扫描算法[J].计算机学报,2004,27(5):587-595.  
MO Zeyao, FU Lianxiang, YANG Shulin. Parallel pipelined  $S_n$  sweeping algorithm for neutron transport on unstructured grid [J]. Chinese Journal of Computers, 2004, 27(5): 587-595(in Chinese).
- [4] 陈静.二维输运方程离散纵标方法的并行计算研究[D].长沙:国防科学技术大学,2006.