

**Высокопроизводительные вычисления - объединенный
семинар ЦКП ССКЦ СО РАН и НГУ**

**Параллельная реализация
алгоритмов стохастического
моделирования в задачах фотоники**

К.К. Сабельфельд, А.Е. Киреева

**Институт вычислительной математики и математической
геофизики СО РАН**

Параллельная реализация алгоритмов моделирования для следующих задач фотоники:

- стационарная задача моделирования катодolumинесценции в объёме полупроводника с одной дислокацией;
- нестационарная задача моделирования катодolumинесценции в объёме полупроводника с несколькими дислокациями.

Уравнение дрейфа-диффузии-реакции в стационарном случае

$$D\Delta n + \nabla \cdot (\mathbf{v}n) - \frac{n}{\tau} + Q = 0. \quad (1)$$

n – концентрация экситонов,

D – коэффициент диффузии экситонов,

\mathbf{v} – постоянная скорость внешнего поля,

τ – среднее время жизни экситонов,

Q – источник экситонов.

Граничные условия: $(\mathbf{J} \cdot \boldsymbol{\nu}_k + S_k n) \Big|_{\Gamma_k} = 0, \quad \mathbf{J} = D\nabla n + \mathbf{v}n,$

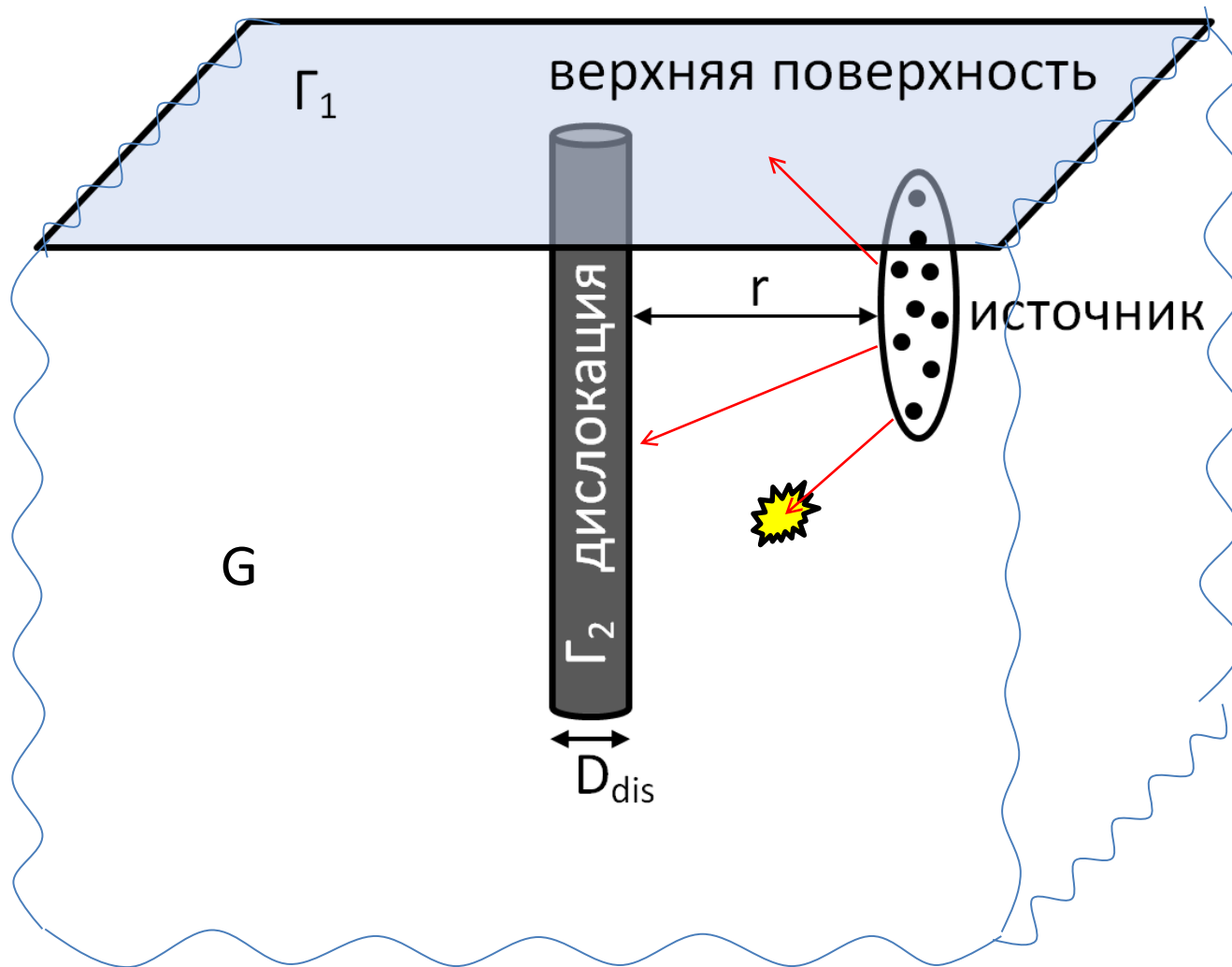
\mathbf{J} – поток экситонов на границе, $\boldsymbol{\nu}_k$ – внешняя нормаль к поверхности границы, S_k – скорость рекомбинации на границе Γ_k .

$k = 1$: верхняя плоскость, $k = 2$: цилиндрическая дислокация.

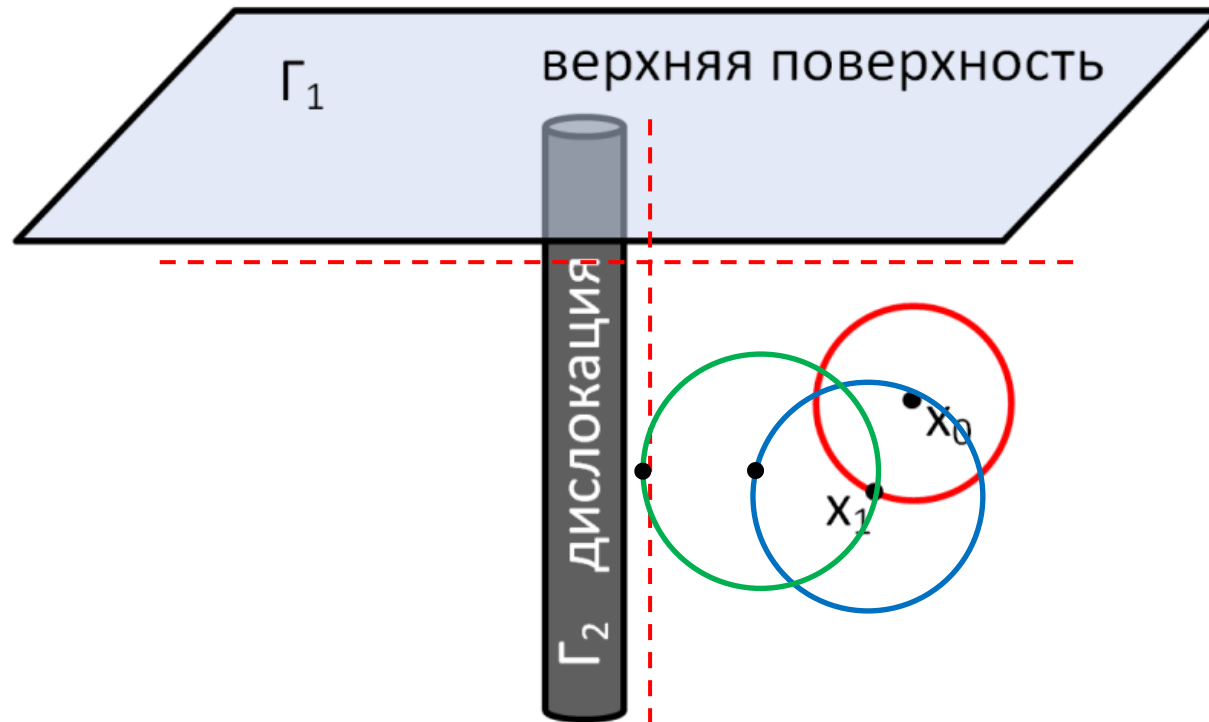
Количество экситонов, поглотившихся на границе Γ_k :

$$I_k = - \int_{\Gamma_k} \mathbf{J} \cdot \boldsymbol{\nu}_k d\sigma_k$$

Область моделирования



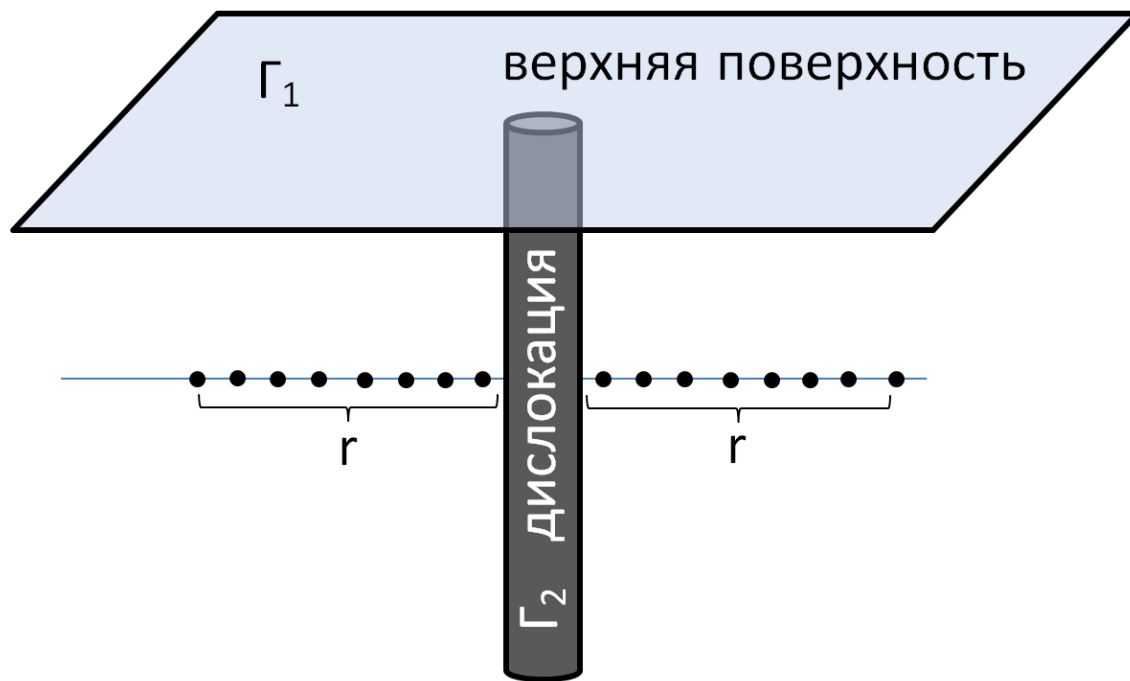
Алгоритм блуждания по сферам для решения уравнения дрейфа-диффузии



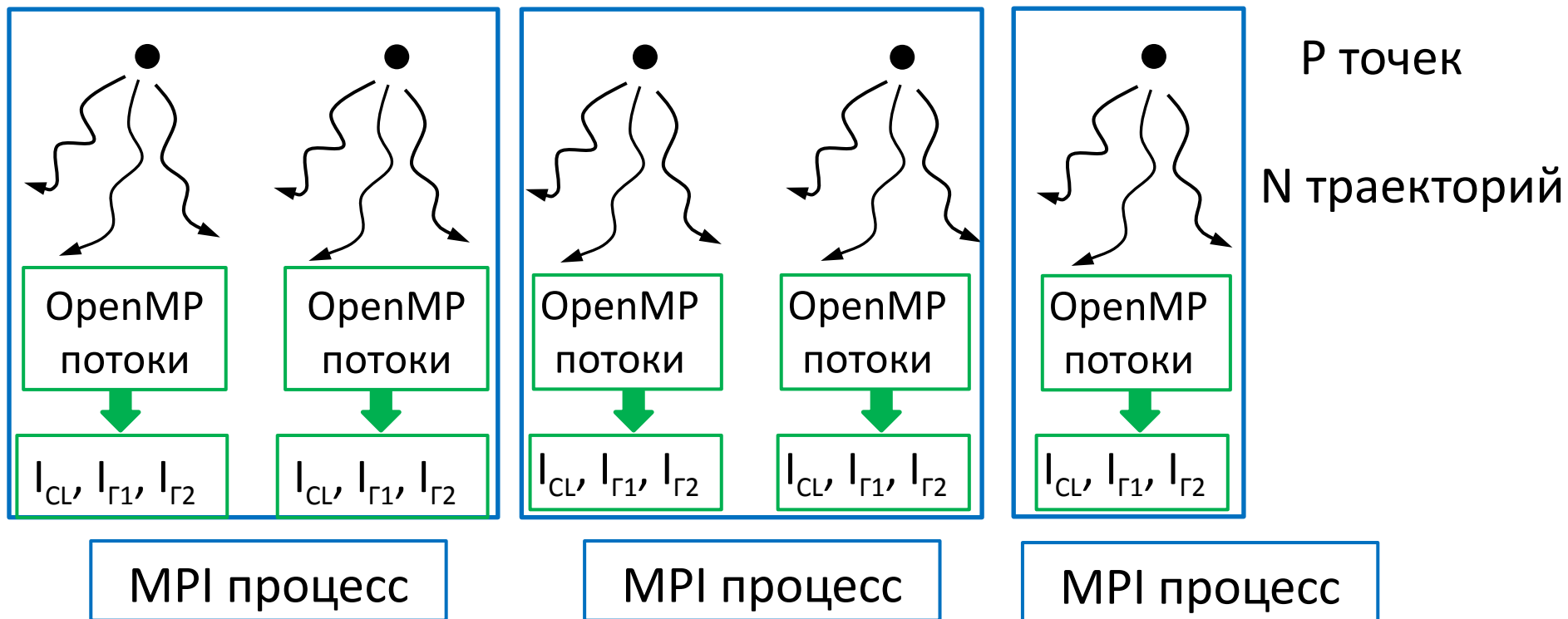
Шаги алгоритма блуждания по сферам повторяются N раз для точки x_0 для достижения нужной точности значений.

Вычисление карты интенсивности катодолюминесценции

Для определения влияния дислокации вычисляются значения интенсивность катодолюминесценции I_{CL} в точках, расположенных на различном расстоянии r от дислокации.



Параллельная реализация алгоритма, моделирующего катодолюминесценцию



Точки распределяются между MPI процессами.
Для каждой точки вычисляется N траекторий, которые распределяются между OpenMP потоками.

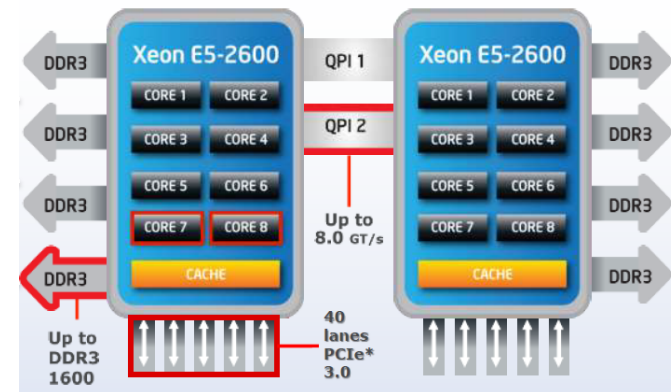
Параллельная реализация алгоритма, моделирующего катодолюминесценцию

Параметры вычислительного эксперимента:

Время жизни $\tau = 1$ нс, длина диффузии $L = 370$ нм, скорость дрейфа $\alpha = (10; 20)$ нм/нс, скорость рекомбинации $S_1 = 1500$ нм/нс, $S_2 = 48000$ нм/нс, радиус дислокации $R_{dis} = 1$ нм, окрестность $\varepsilon = 0,01$, число траекторий $N = 10^5$.

Кластер **МВС-10П** Межведомственного Суперкомпьютерного Центра (МСЦ) СО РАН:

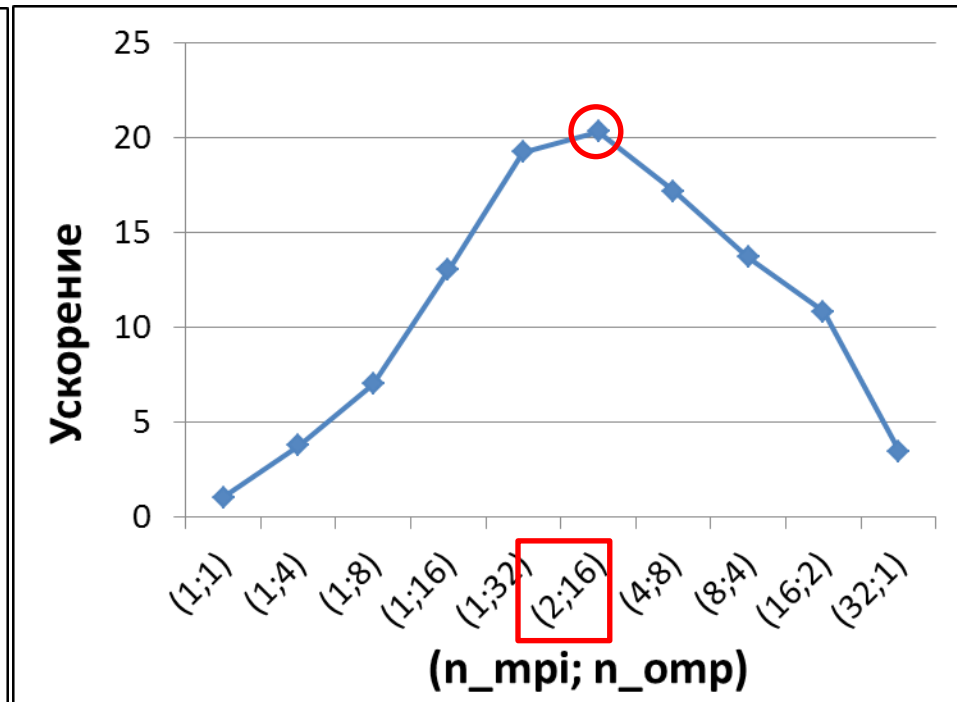
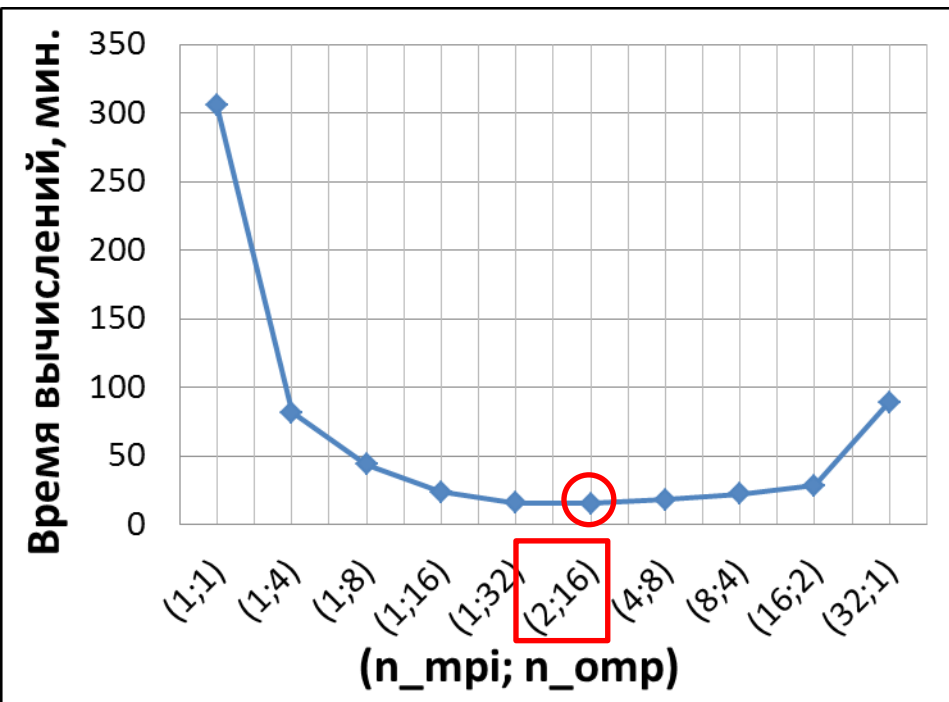
207 вычислительных узлов,
узел состоит из 2-х процессоров Xeon E5-2690, в каждом из которых по 8 ядер.



процессор Intel® Xeon® серии E5

Параллельная реализация алгоритма, моделирующего катодолюминесценцию

Соотношение используемых MPI процессов и OpenMP потоков
внутри одного узла

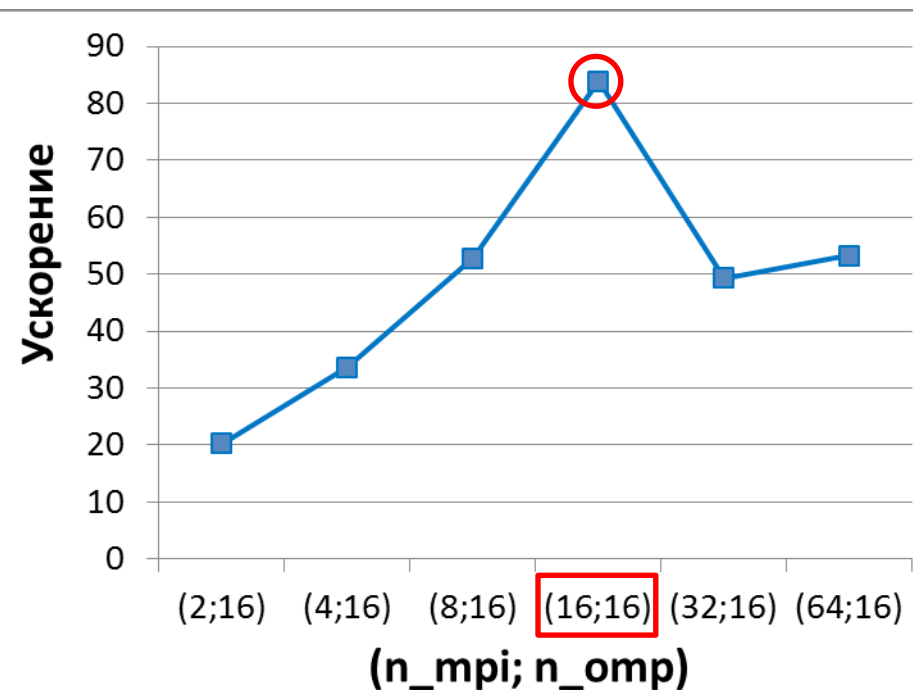
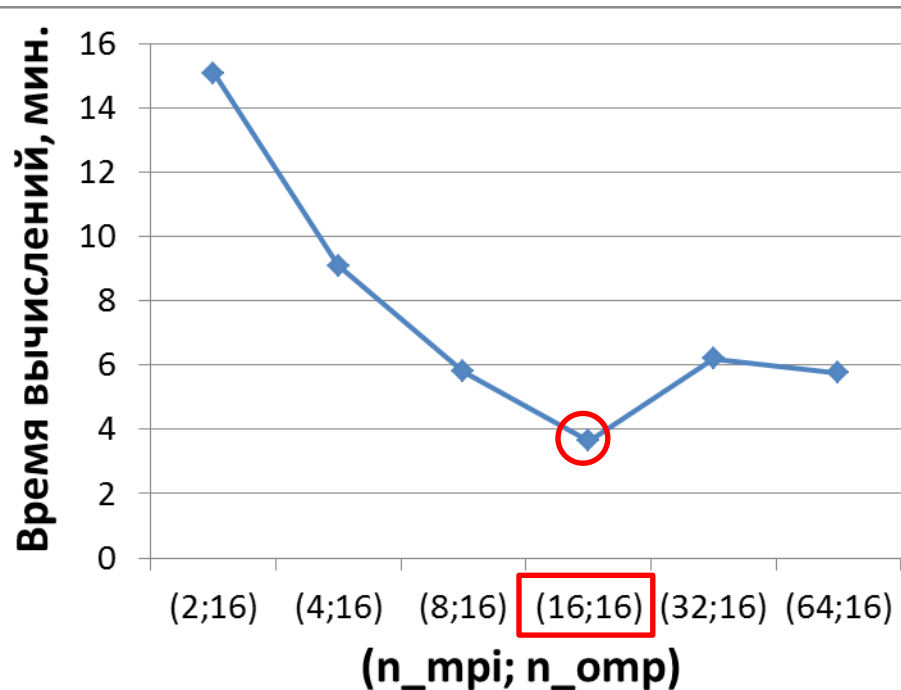


n_{mpi} – число MPI процессов,
 n_{omp} – число OpenMP потоков.

$$S(n_{\text{mpi}}; n_{\text{omp}}) = T(1;1) / T(n_{\text{mpi}}; n_{\text{omp}})$$

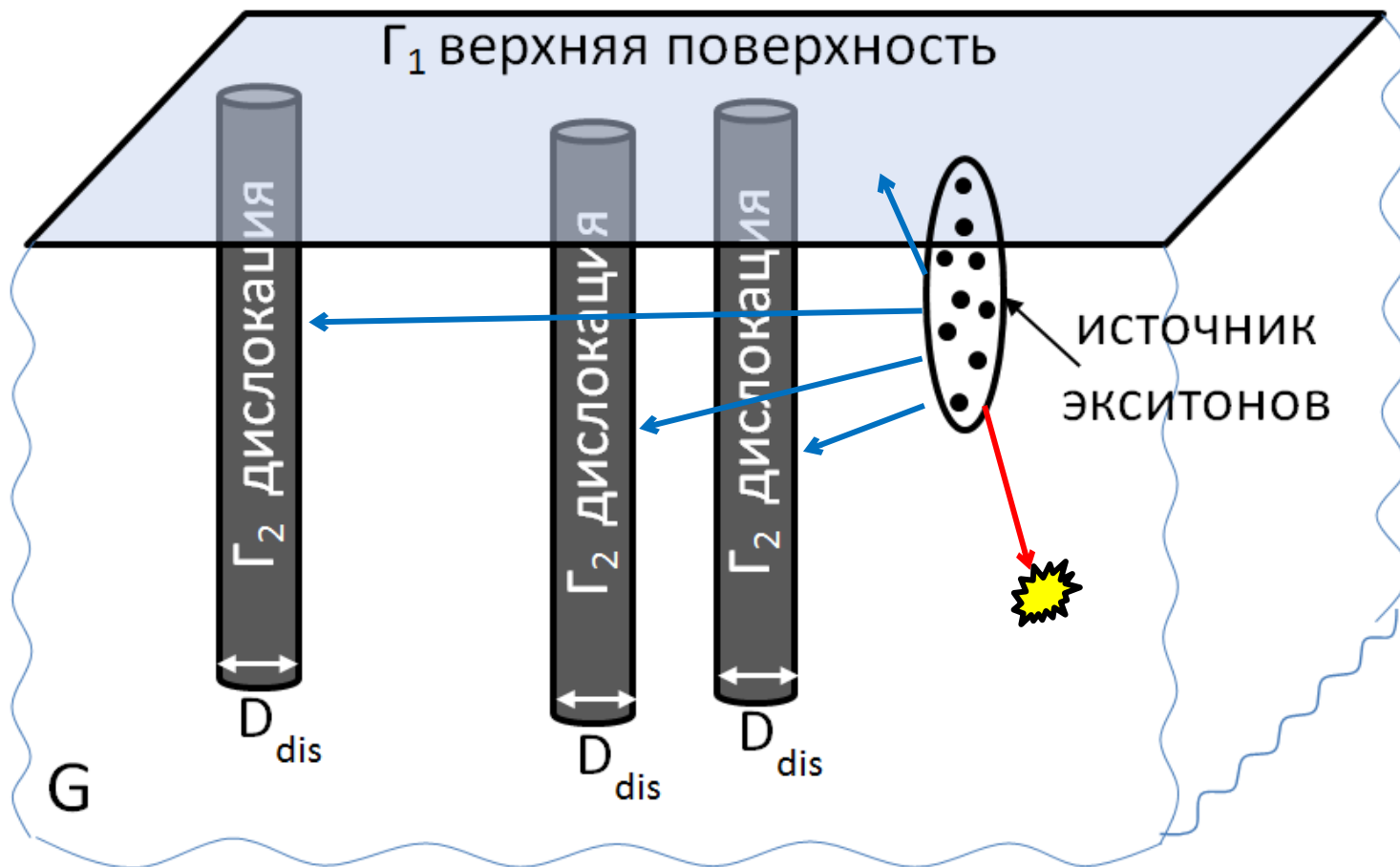
Параллельная реализация алгоритма, моделирующего катодолюминесценцию

Зависимость времени вычислений от числа MPI процессов, в каждом из которых по 16 OpenMP потоков



Оптимальное число MPI процессов и OpenMP потоков – (16; 16)

- Нестационарная задача моделирования катодOLUMИнесценции для полупроводника с несколькими дислокациями



Уравнение диффузии-реакции для нестационарного случая

$$\frac{\partial u(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = D\Delta u(\mathbf{x}, t) - \lambda^2 u(\mathbf{x}, t) + \delta(t)f(\mathbf{x}), \quad x \in G, \quad t \in [0, T]$$

$u(\mathbf{x}, t)$ – концентрация экситонов,

D – коэффициент диффузии экситонов,

$\lambda^2 = 1/\tau$, где τ – среднее время жизни экситонов,

$\delta(t)f(\mathbf{x})$ – мгновенный источник экситонов.

Начальные условия: $u(\mathbf{x}, 0) = 0, \mathbf{x} \in G$

Граничные условия: $(D\nabla u(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{v}_k + S_k \cdot u(\mathbf{x}, t))|_{\Gamma_k} = 0$

\mathbf{v}_k – внешняя нормаль к поверхности границы Γ_k

S_k – скорость рекомбинации на границе Γ_k

$k = 1$: верхняя плоскость, $k = 2$: поверхность дислокаций.

Вычисляемые характеристики

Количество экситонов, выживших к моменту времени T :

$$I_{surv} = \int_G u(x, T) dx$$

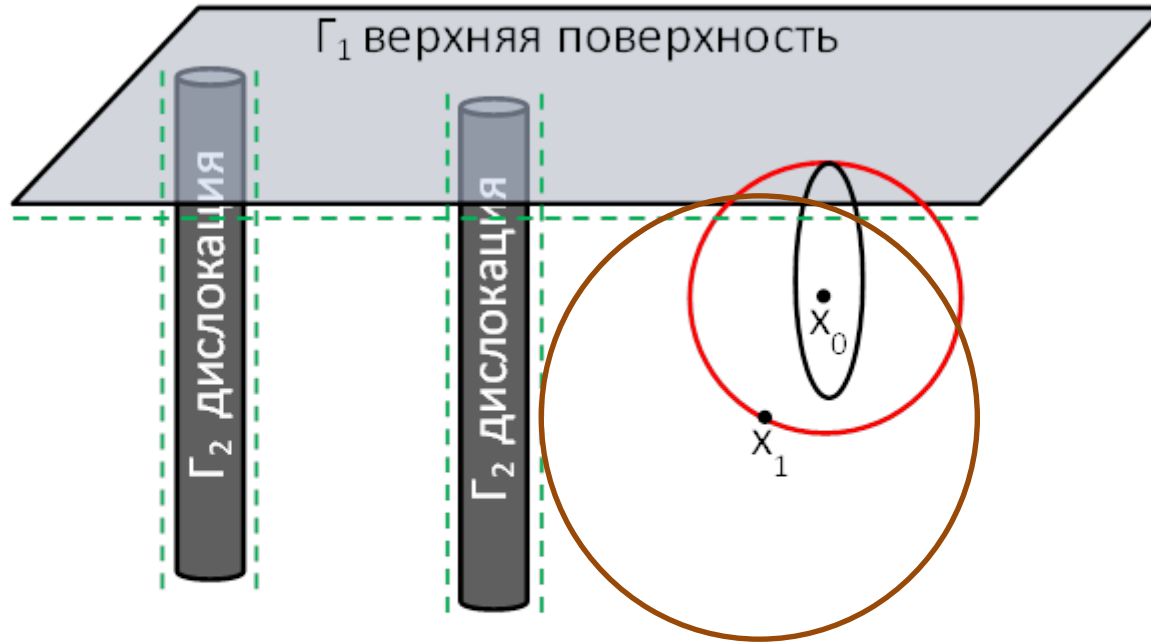
Количество экситонов, поглотившихся на границе Γ_k к моменту T :

$$I_{\Gamma_k} = \int_0^T dt \int_{\Gamma_k} \left[-D \frac{\partial n}{\partial \nu_k} \right] dS_{\Gamma}$$

Количество экситонов, поглотившихся в объёме G к моменту времени T (интенсивность катодолюминесценции):

$$I_{CL} = \lambda^2 \int_0^T dt \int_G u(x, T) dx$$

Алгоритм блуждания по сферам для решения уравнения дрейфа-диффузии

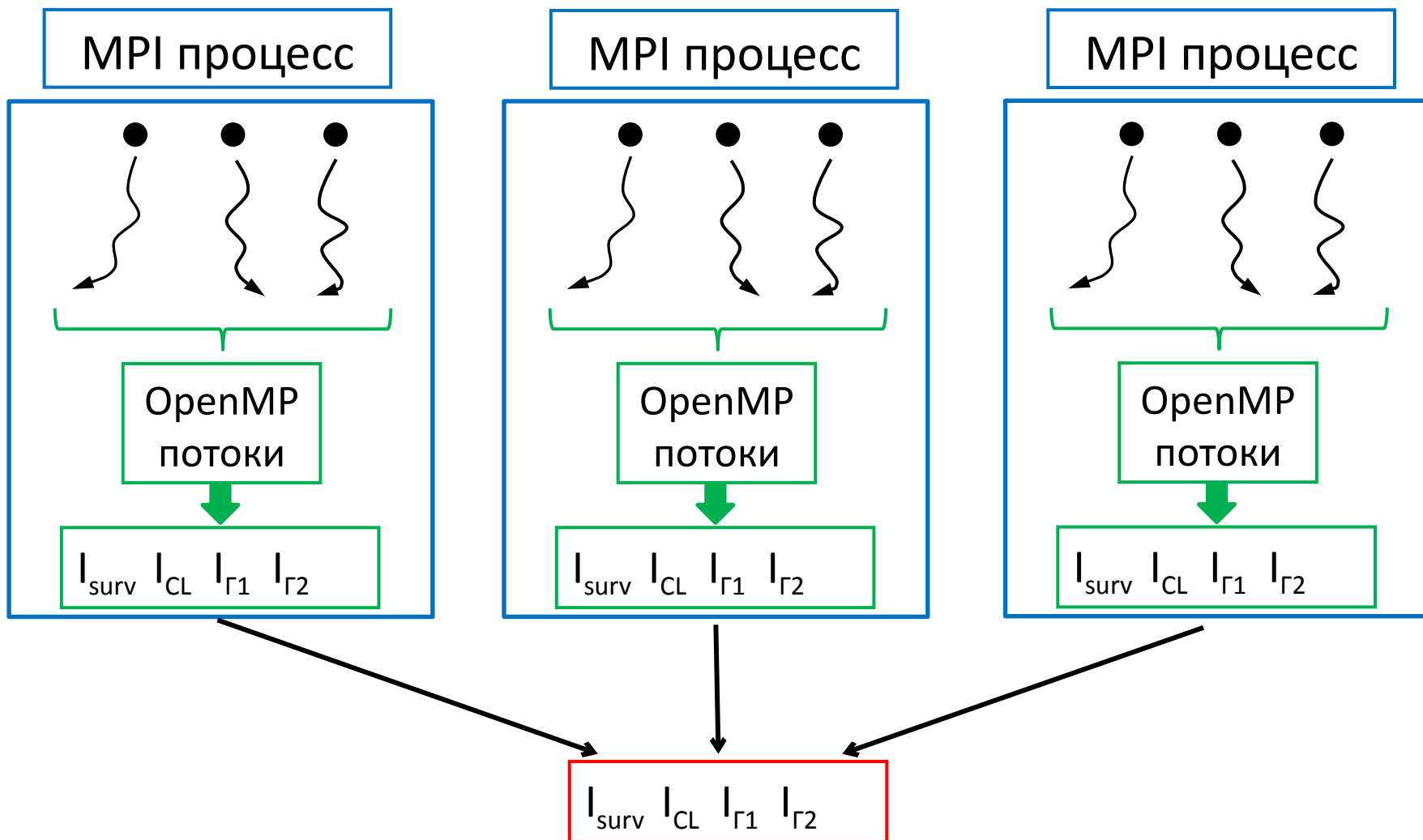


Шаги алгоритма блуждания по сферам повторяются N раз. Значения характеристик $I_{\text{surv}}(t)$, $I_{\Gamma_k}(t)$, $I_{\text{CL}}(t)$ усредняются по N траекториям.

Для достижения точности вычислений равной ε требуется $N \approx 1/\varepsilon^2$ траекторий.

Параллельная реализация алгоритма

Гибридная MPI + OpenMP модель



Параллельная реализация алгоритма

Параметры вычислительного эксперимента:

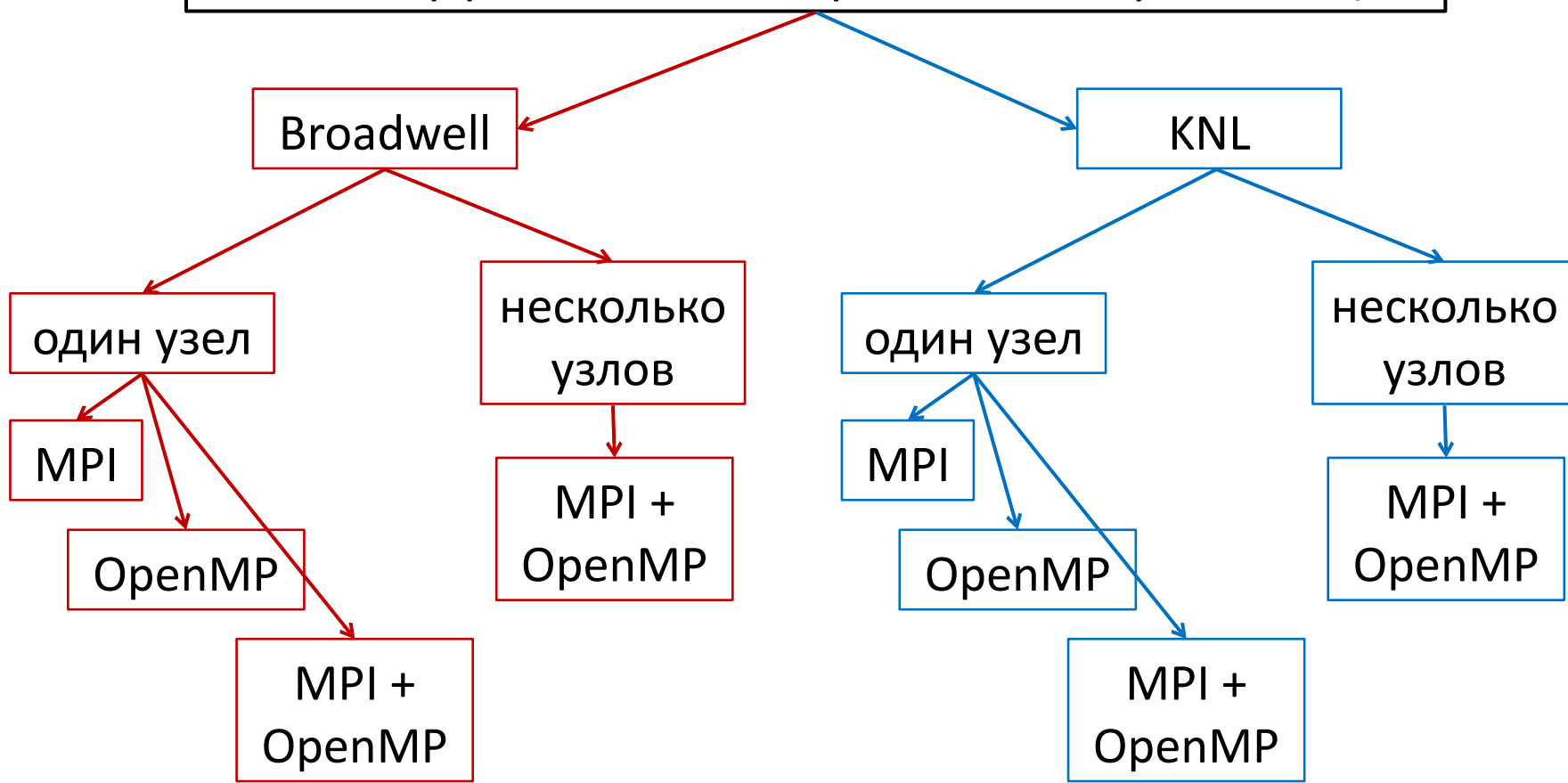
Время жизни $\tau = 1$ нс, длина диффузии $L = 100$ нм, радиус дислокаций $R = 3$ нм, плотность дислокаций $\rho_{\text{dis}} = 10^{-5}$ нм⁻¹, скорость рекомбинации $S_1 = S_2 = 10^5$ нм/нс, размер ε -окрестности границы Γ_1 : $\varepsilon_1 = 0,01$ нм, границы Γ_2 : $\varepsilon_2 = 0,001$ нм, число траекторий $N = 10^8$.

Сибирский Суперкомпьютерный Центр СО РАН
Кластер **НКС-1П** (2017 г.)

- Раздел **Broadwell**: 20 вычислительных узлов;
в каждом узле 2 процессора Intel Xeon E5-2697v4 (2.6 Гц, 16 ядер × 2 потока); 64 аппаратных потока на узел.
- Раздел **KNL**: 16 вычислительных узлов;
в каждом узле 1 процессор Intel Xeon Phi 7290 KNL (1.5 Гц, 16 ГБ кэш MCDRAM, 72 ядра × 4 потока); 288 аппаратных потока на узел.

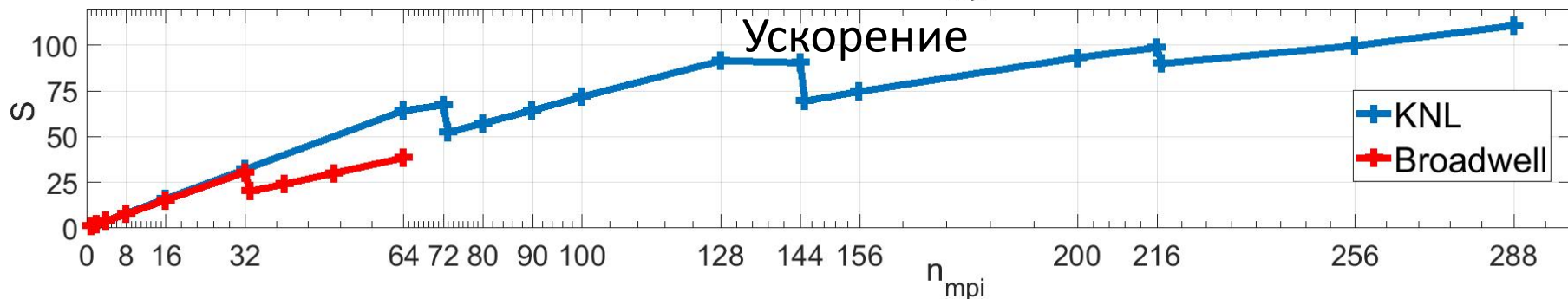
Параллельная реализация алгоритма

Анализ эффективности параллельной реализации



Параллельная реализация алгоритма

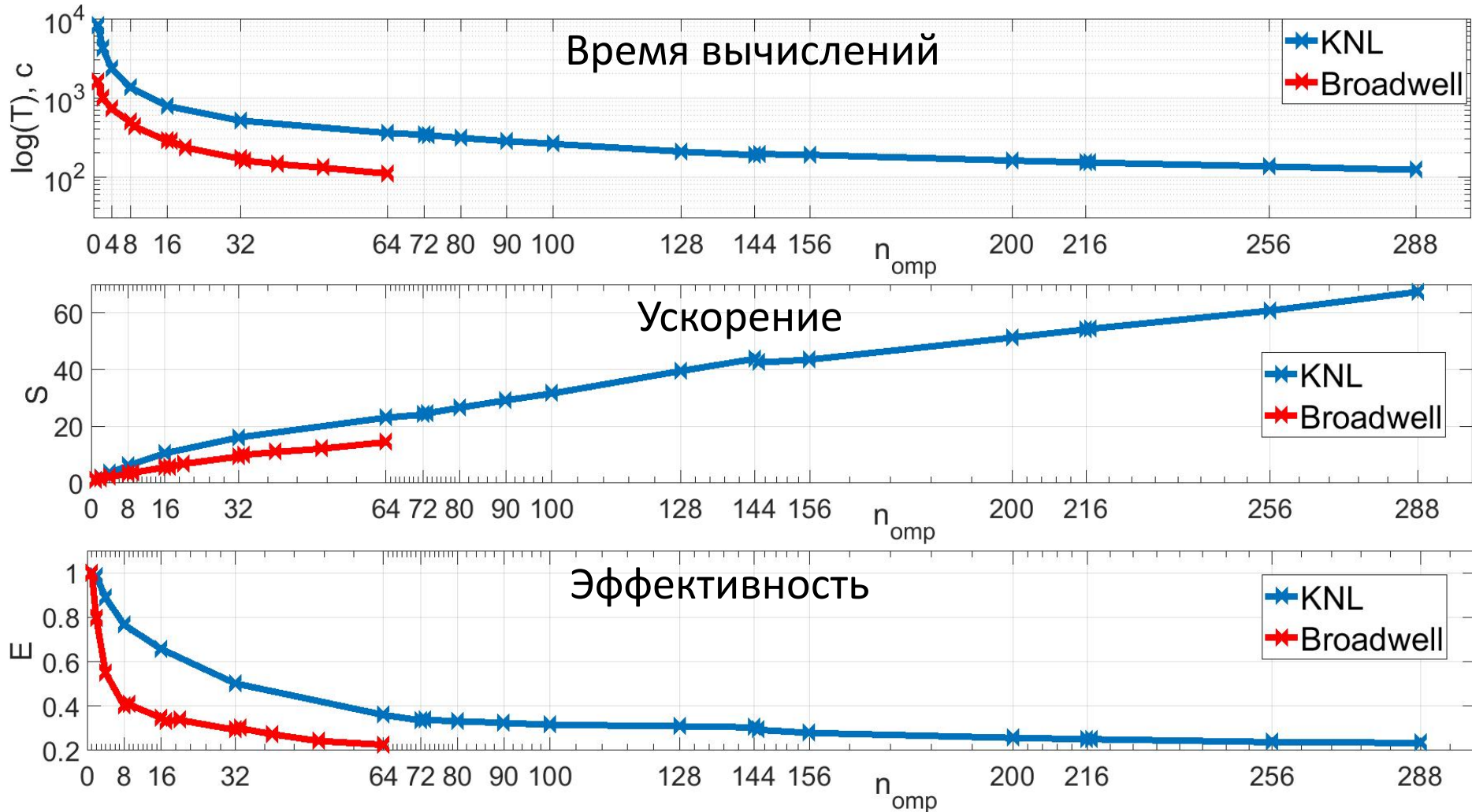
Использование только MPI процессов внутри одного узла



n_{mpi} – число MPI процессов, $S(n_{mpi}) = T(1) / T(n_{mpi})$, $E(n_{mpi}) = S(n_{mpi}) / n_{mpi}$

Параллельная реализация алгоритма

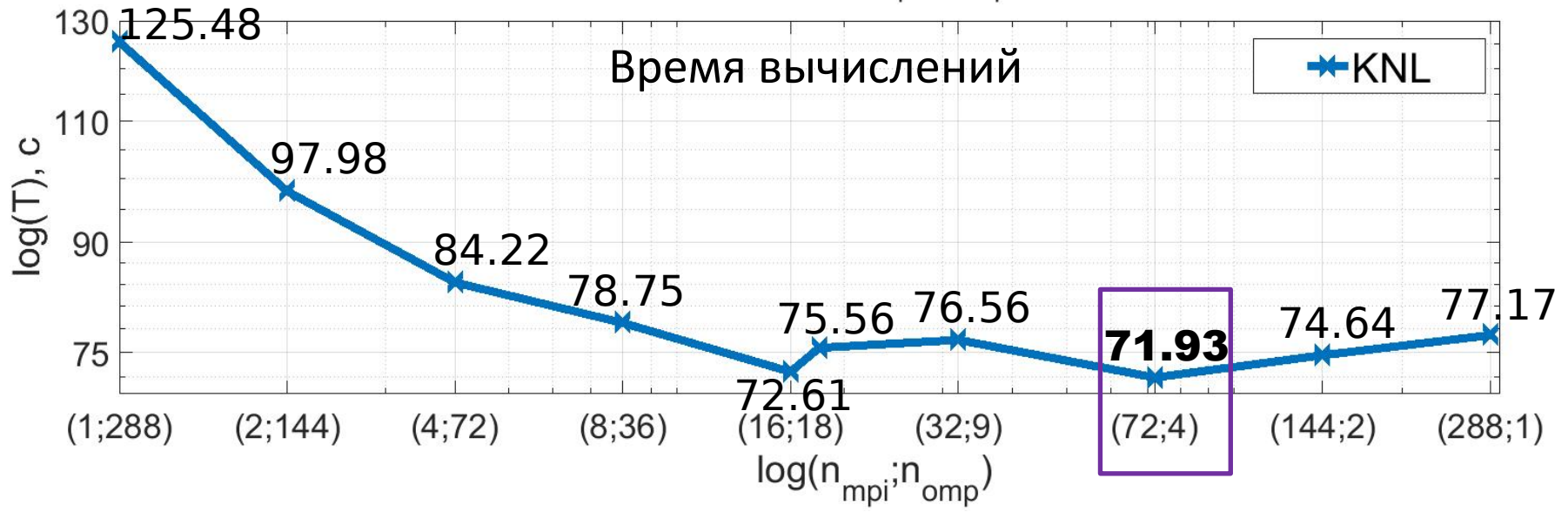
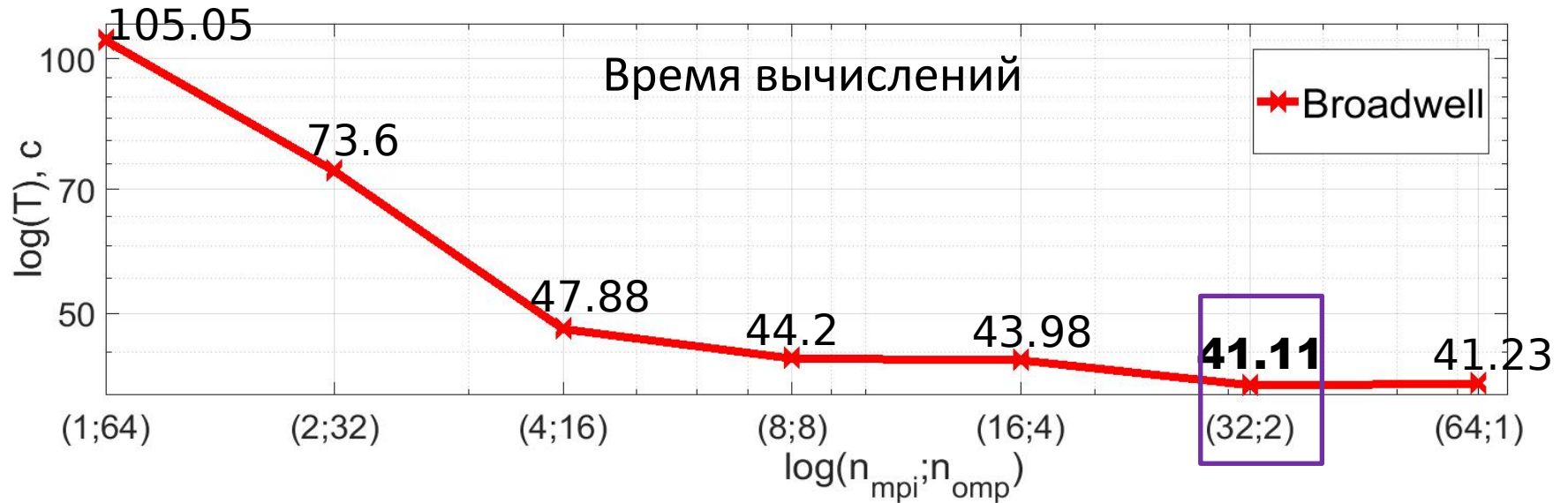
Использование только OpenMP потоков внутри одного узла



n_{omp} – число OpenMP потоков, $S(n_{omp}) = T(1) / T(n_{omp})$, $E(n_{omp}) = S(n_{omp}) / n_{omp}$

Параллельная реализация алгоритма

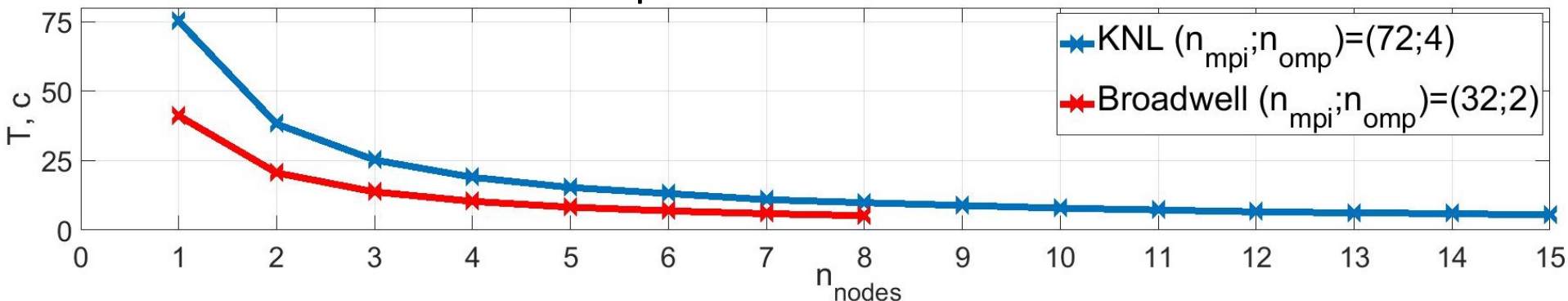
Использование MPI + OpenMP внутри одного узла



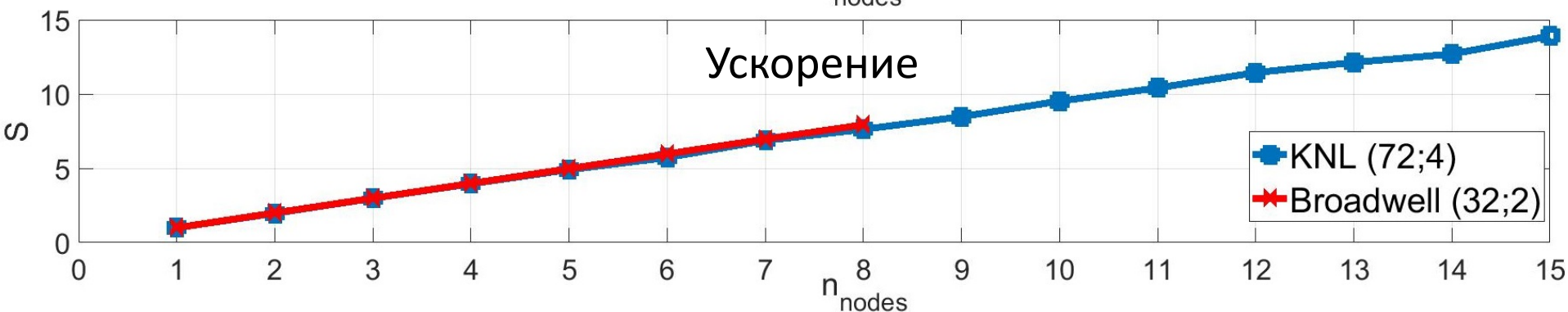
Параллельная реализация алгоритма

Использование нескольких вычислительных узлов кластера НКС-1П

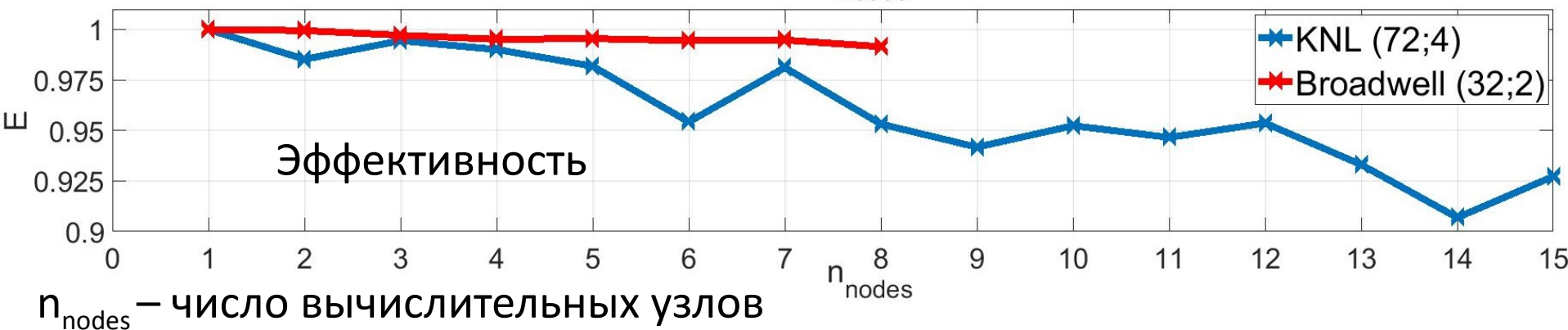
Время вычислений



Ускорение



Эффективность



n_{nodes} – число вычислительных узлов

Заключение

- С помощью MPI+OpenMP модели реализованы параллельные версии стохастических алгоритмов моделирования катодолюминесценции в полупроводнике с одной и несколькими дислокациями.
- Проведён анализ эффективности параллельных программ для различного распределения нагрузки внутри одного узла кластера.
- Для найденных оптимальных сочетаний количества MPI процессов и OpenMP потоков проанализированы ускорение и эффективность распараллеливания в зависимости от количества узлов кластера.

Спасибо за внимание!