Механико-математический факультет
Кафедра вычислительной математики

Случайный сферический процесс дрифта-диффузии. Сравнение OMP и MPI подходов.

Выполнил:
И.А. Аксюк, группа 18133
Куратор:
канд. физ.-мат. наук, А.Е. Киреева
Научный руководитель:
д-р физ.-мат. наук, проф. К. К. Сабельфельд

Новосибирск – 2022

Постановка задачи

Однослойная область: $V = \{(r_1, r_2, r_3) : r_1, r_2 \in \mathbb{R}, 0 \le r_3 \le H\}$

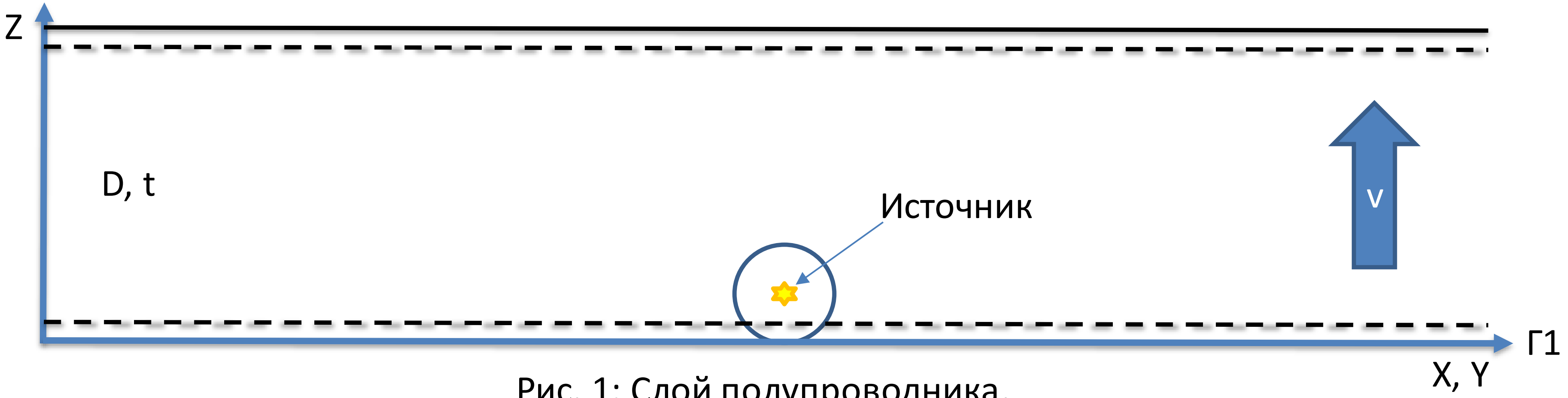


Рис. 1: Слой полупроводника.

Уравнение дрифта-диффузии на концентрацию экситонов:

$$D\Delta n(r, r_0) - v \cdot \nabla n - \frac{1}{\overline{\tau}} n = -\delta(r - r_0), \quad r \in V.$$

D – коэффициент диффузии,

v – вектор скорости,

$\overline{\tau}$ – среднее время жизни экситона,

$\delta(r - r_0)$ – точечный источник экситонов в точке r_0.

Поток на границу. Теорема взаимности [1],[2]

Поток на границу:

$$F(r_0) = -D \int_{\Gamma_1} \frac{\partial n(\xi, r_0)}{\partial \eta_\xi} dS_{\Gamma_1}(\xi)$$

Уравнение дрифта-диффузии:

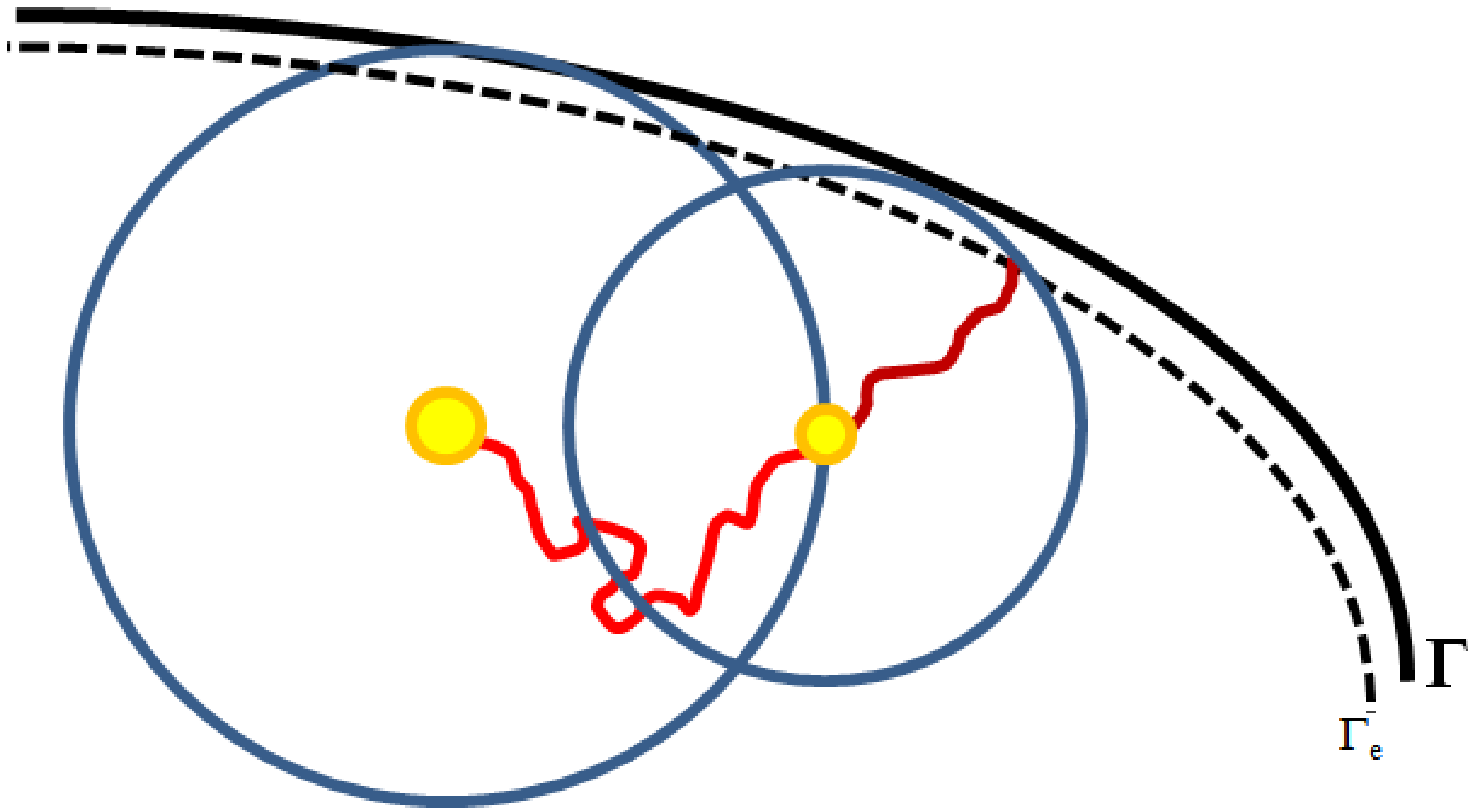
$$D\Delta n(r, r_0) - v \cdot \nabla n - \frac{1}{\tau} n = -\delta(r - r_0)$$

$$w(r_0) = F(r_0)$$

Уравнение для нахождения потока на границу с 1 краевым условием:

$$\begin{cases} D\Delta w(r) + v \cdot \nabla w - \frac{1}{\tau} w = 0, & r \in V, \\ w(y) = 1, & y \in \Gamma_1, \\ w(y) = 0, & y \in \Gamma \setminus \Gamma_1. \end{cases}$$

Метод случайного блуждания по сферам [1]



Число Пекле

$$\boxed{Pe = \frac{|v|L}{D}.}$$

Здесь $|v|$ – длина вектора скорости, L – характерная длина, D – коэффициент диффузии.

Распределение точек выхода частицы на сфере

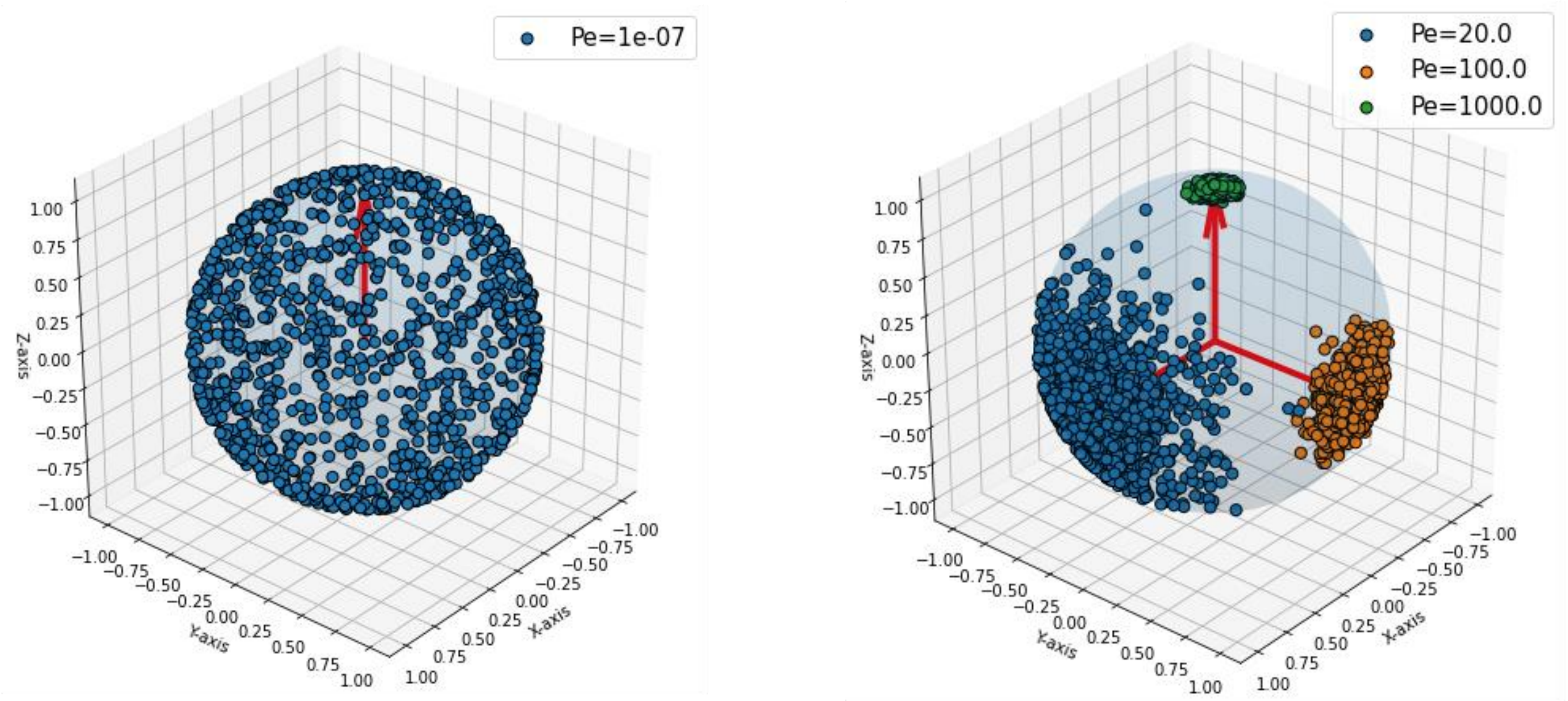
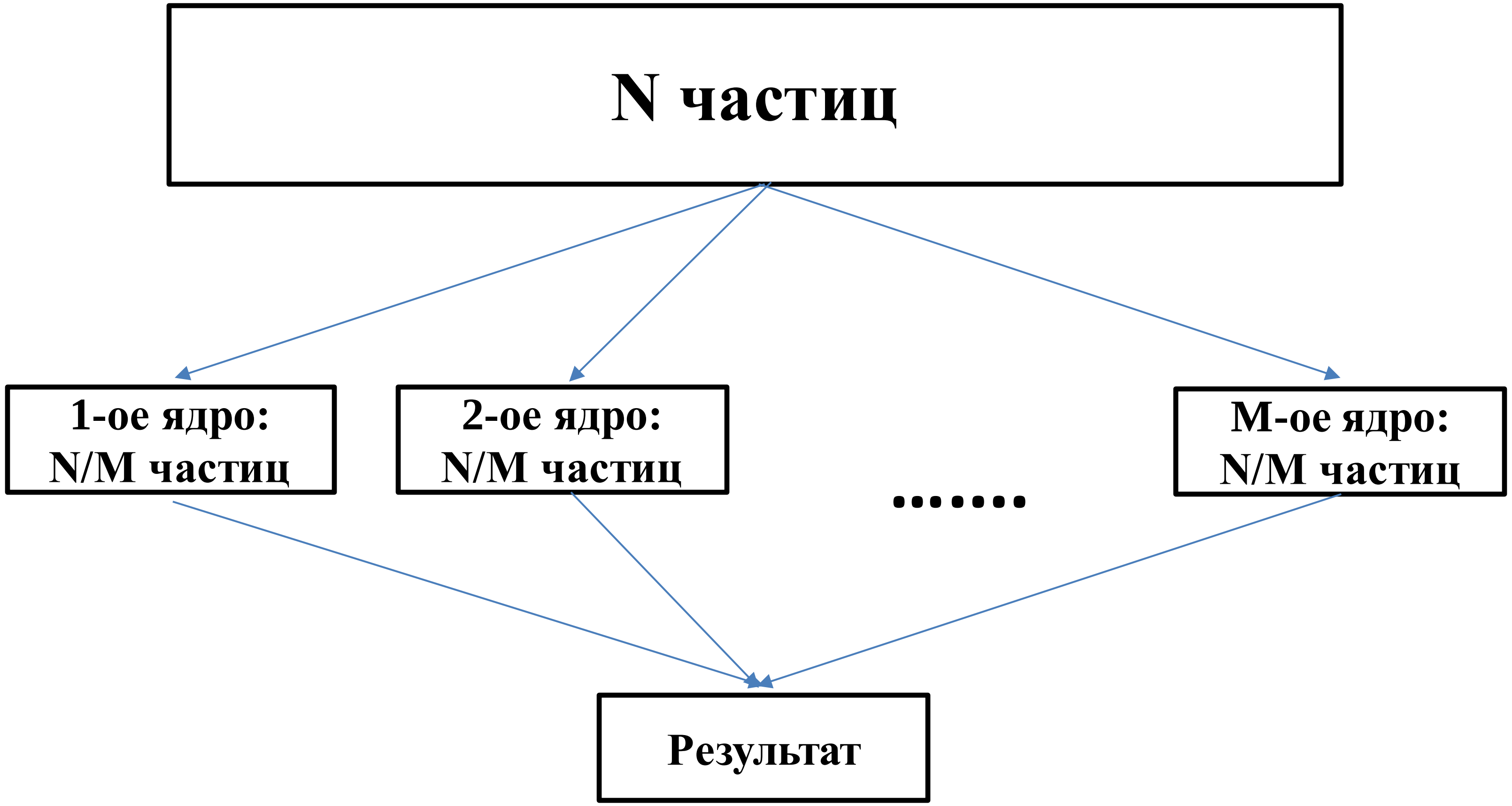


Рис. 2: Точки выхода тысячи частиц на единичной сфере для Pe=10^-7(слева) и Pe=20, Pe=100, Pe=1000(справа).

Процесс распараллеливания задачи



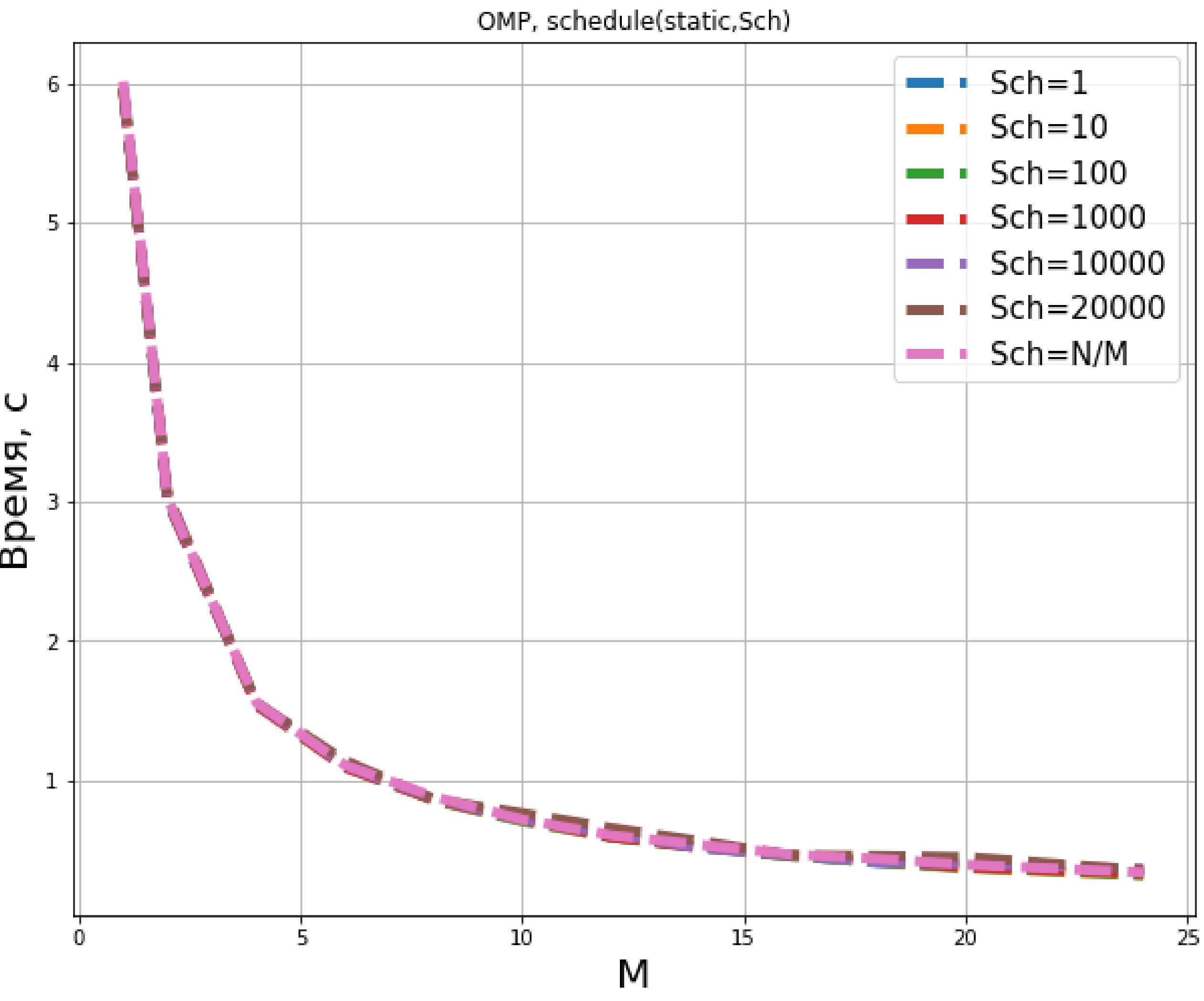
Эксперименты:

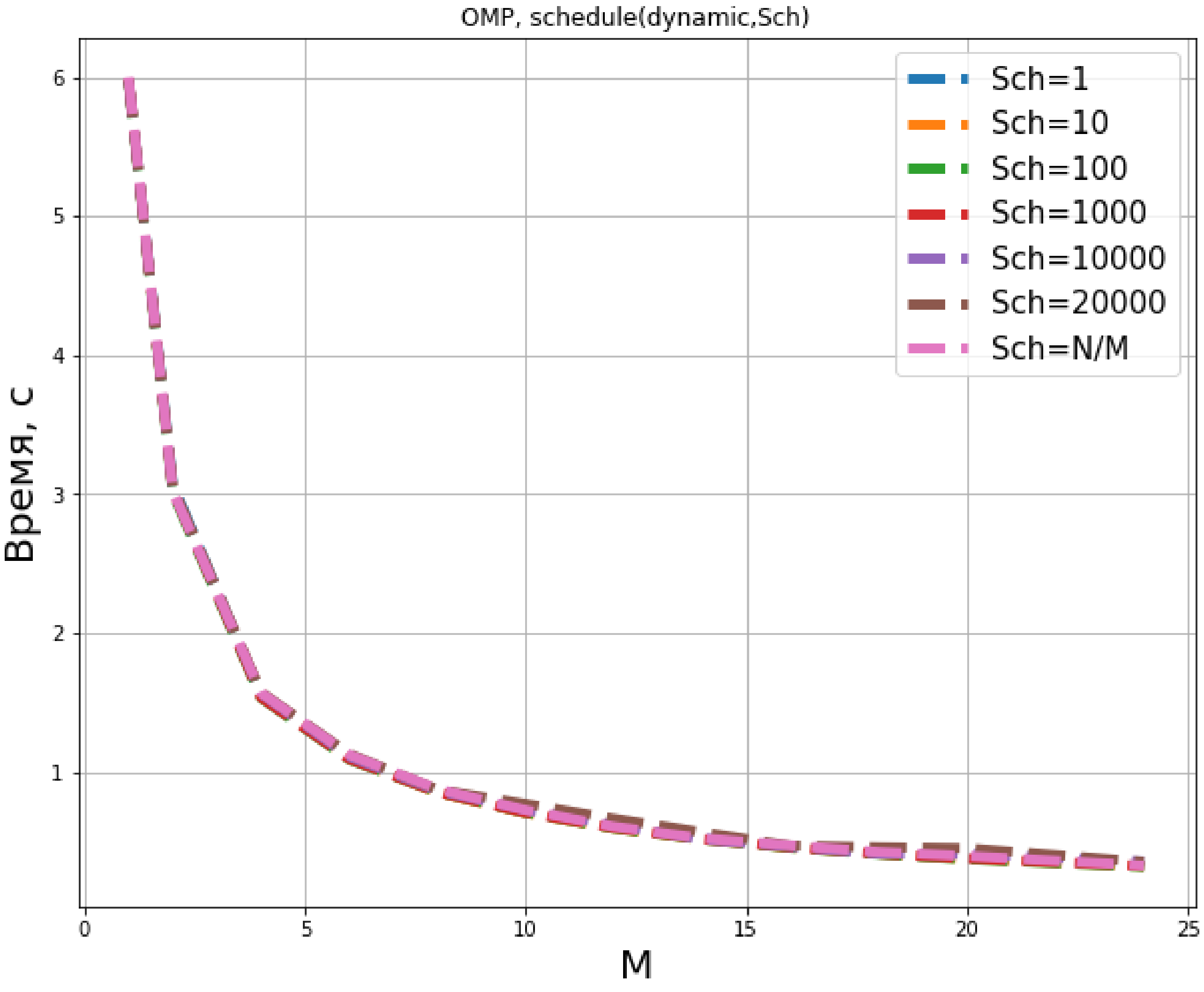
xl230g9q	30 шт. HP XL230a Gen9 и 5 шт. HP XL250a Gen9	24 ядра, 192 ГБ ОЗУ

$$
\begin{cases}
D\Delta w(r) + v \cdot \nabla w - \frac{1}{\overline{\tau}} w = 0, & r \in V, \\
w(y) = 1, & y \in \Gamma_1, \\
w(y) = 0, & y \in \Gamma \setminus \Gamma_1.
\end{cases}
$$

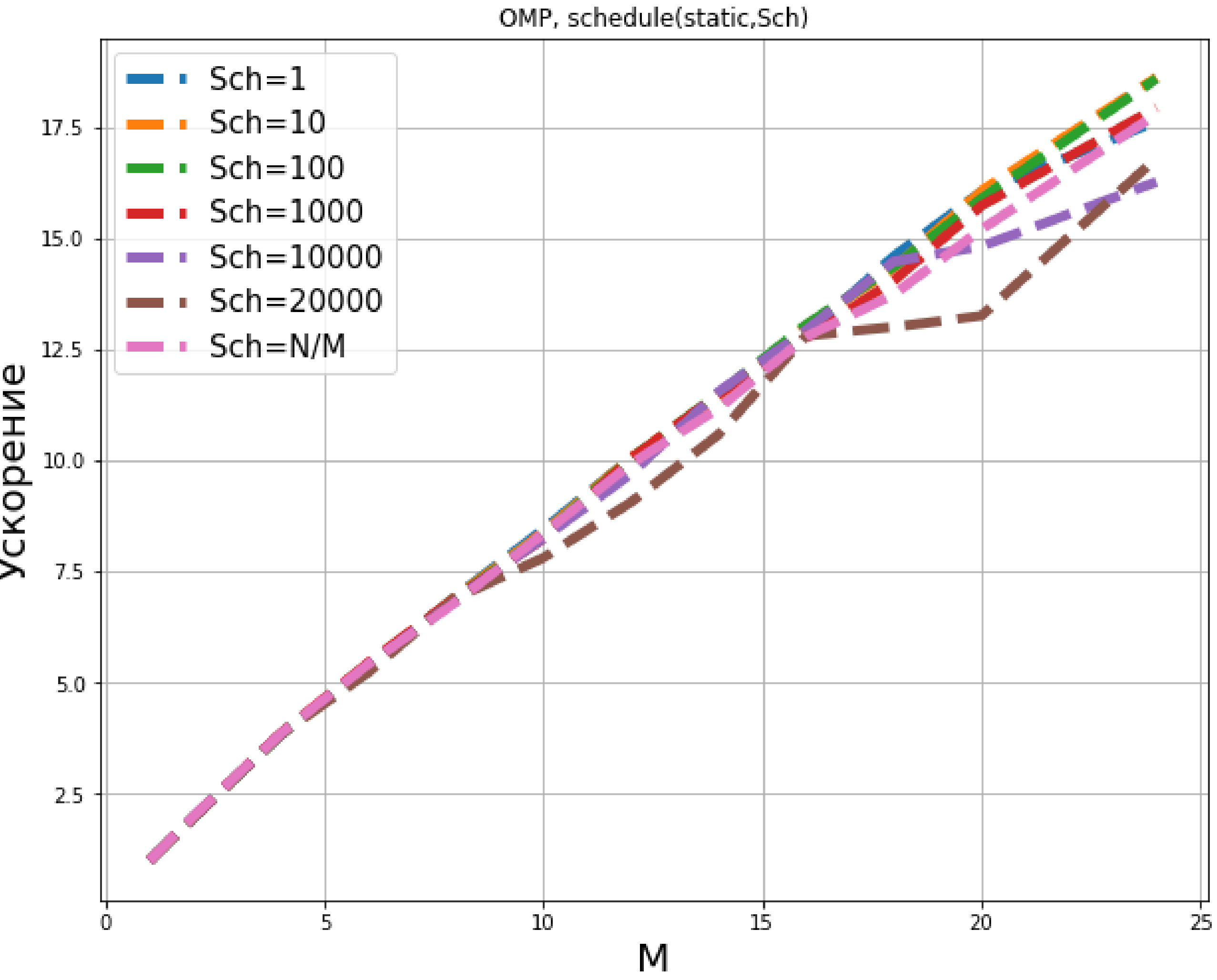
D, нм2/нс	v, нм/нс	$\overline{\tau}$, нс	Pe
1	(0,0,1)	1	1

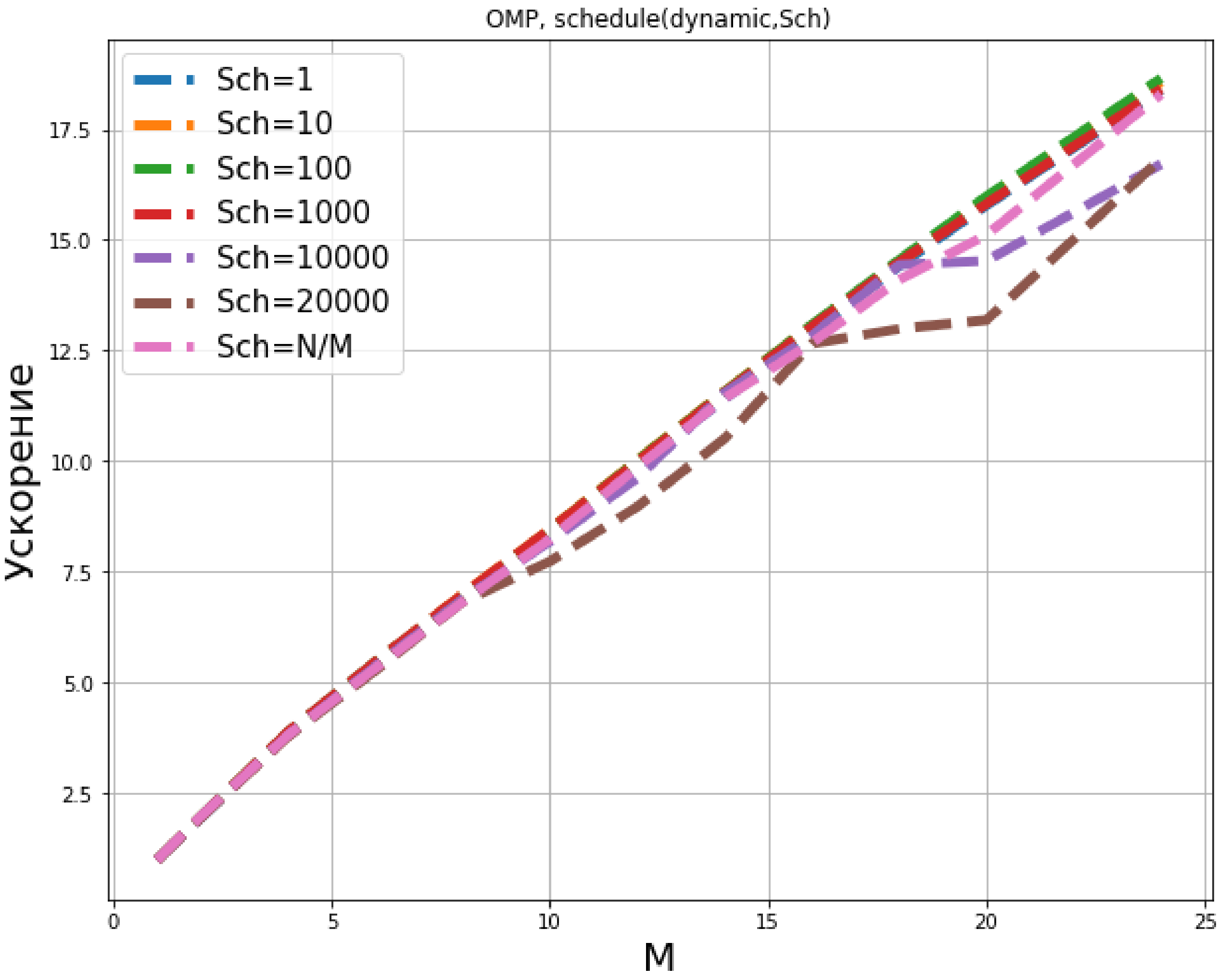
Эксперименты 1: OMP schedule static, dynamic; N=1.26e6



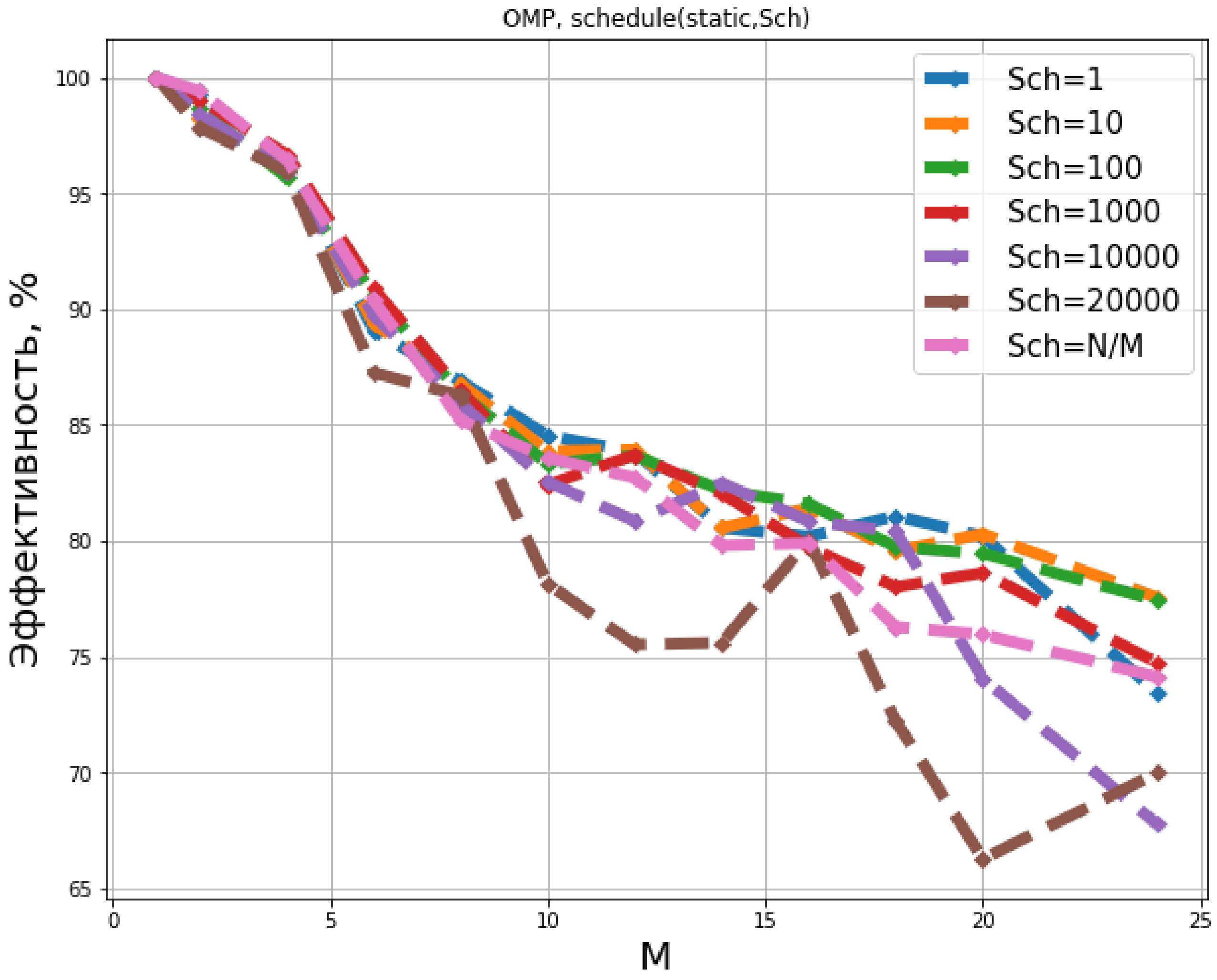


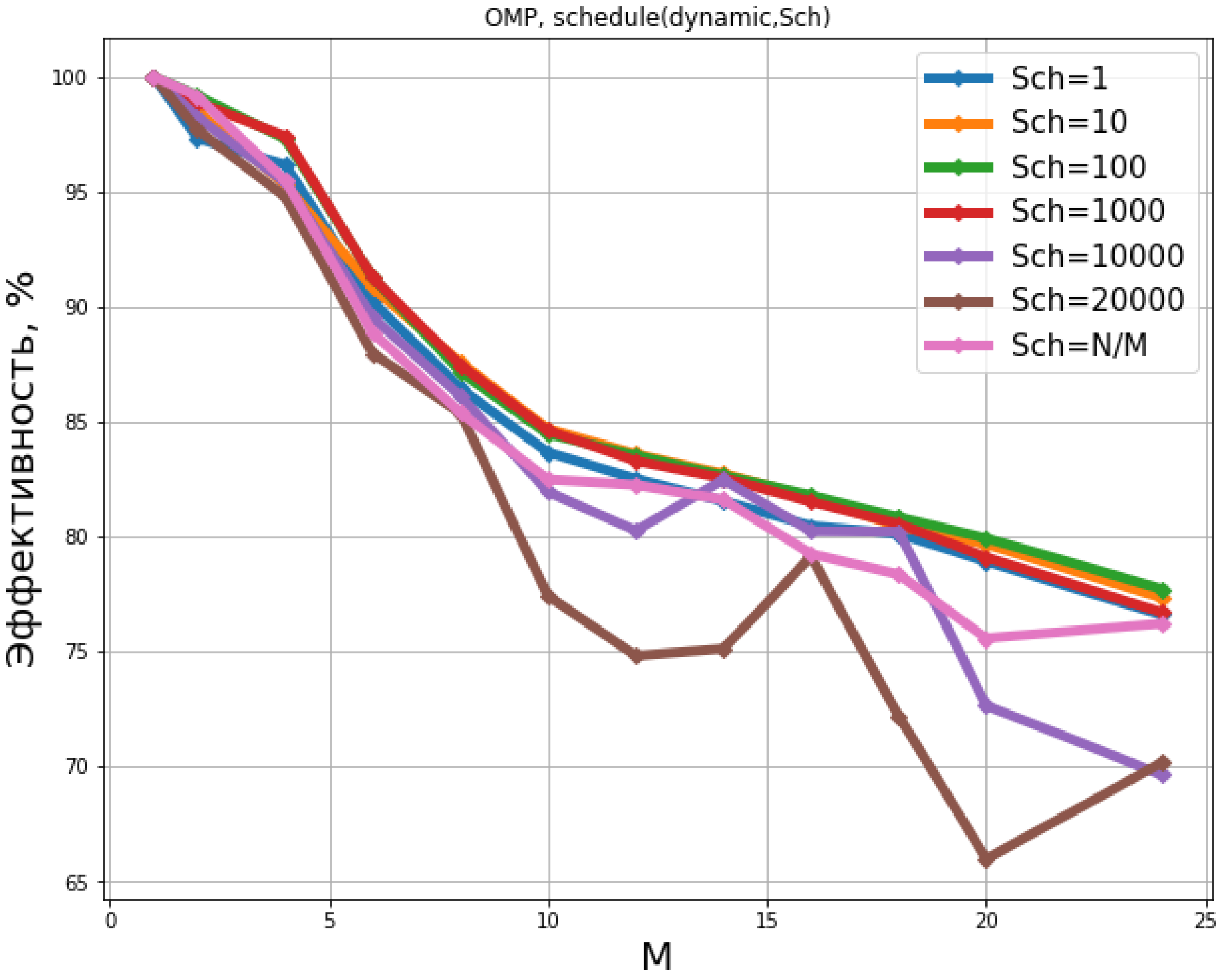
Эксперименты 1: OMP schedule static, dynamic



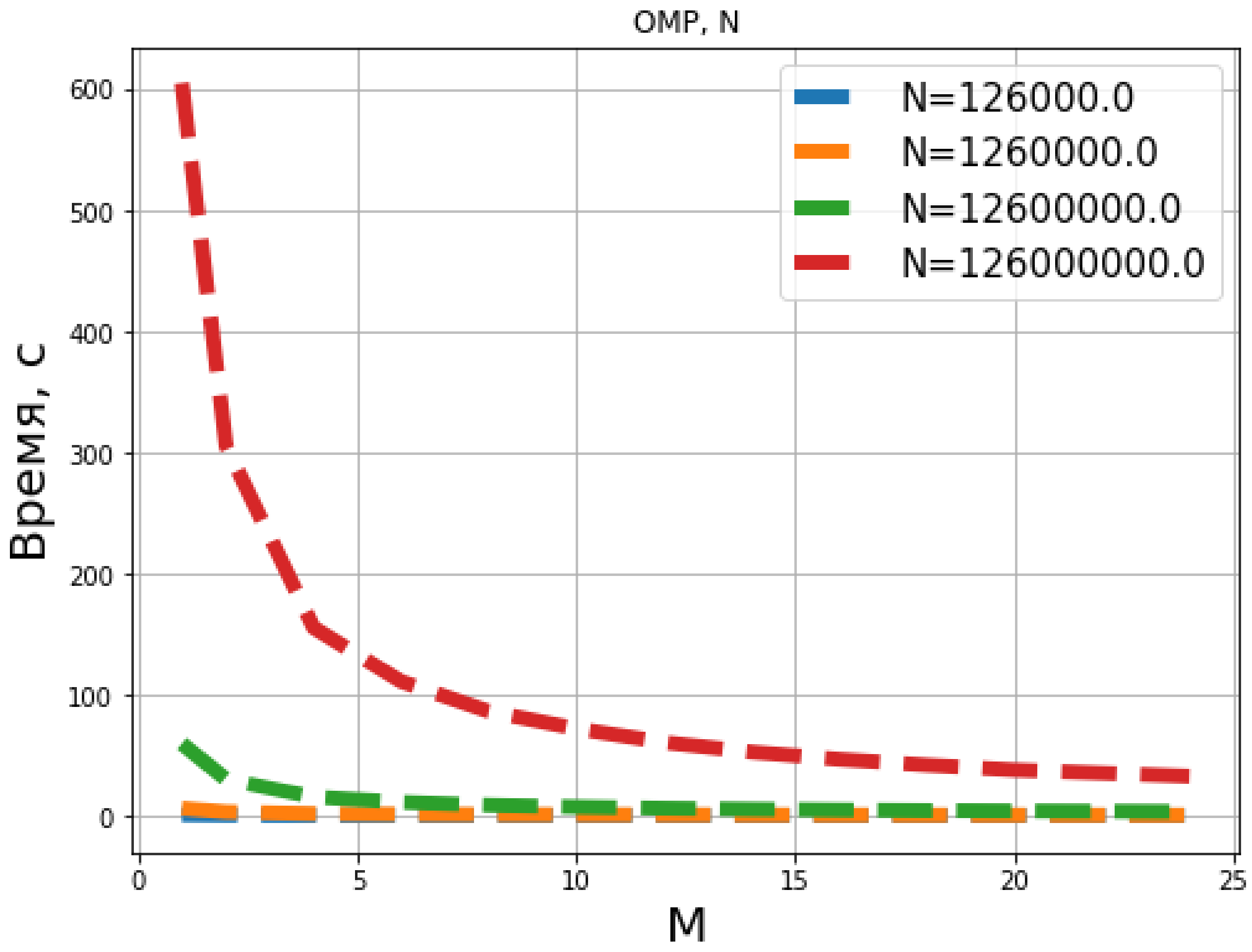


Эксперименты 1: OMP schedule static, dynamic

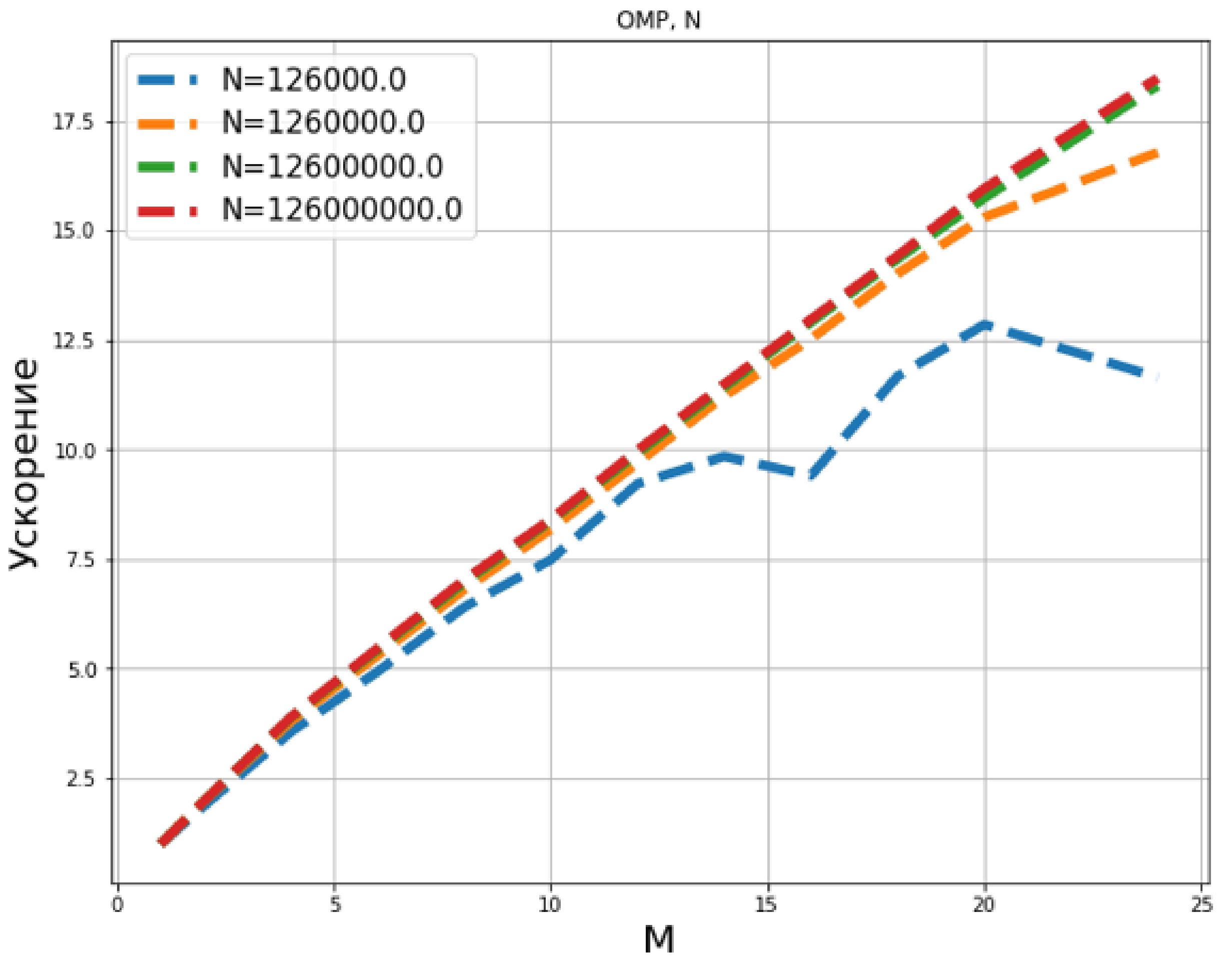


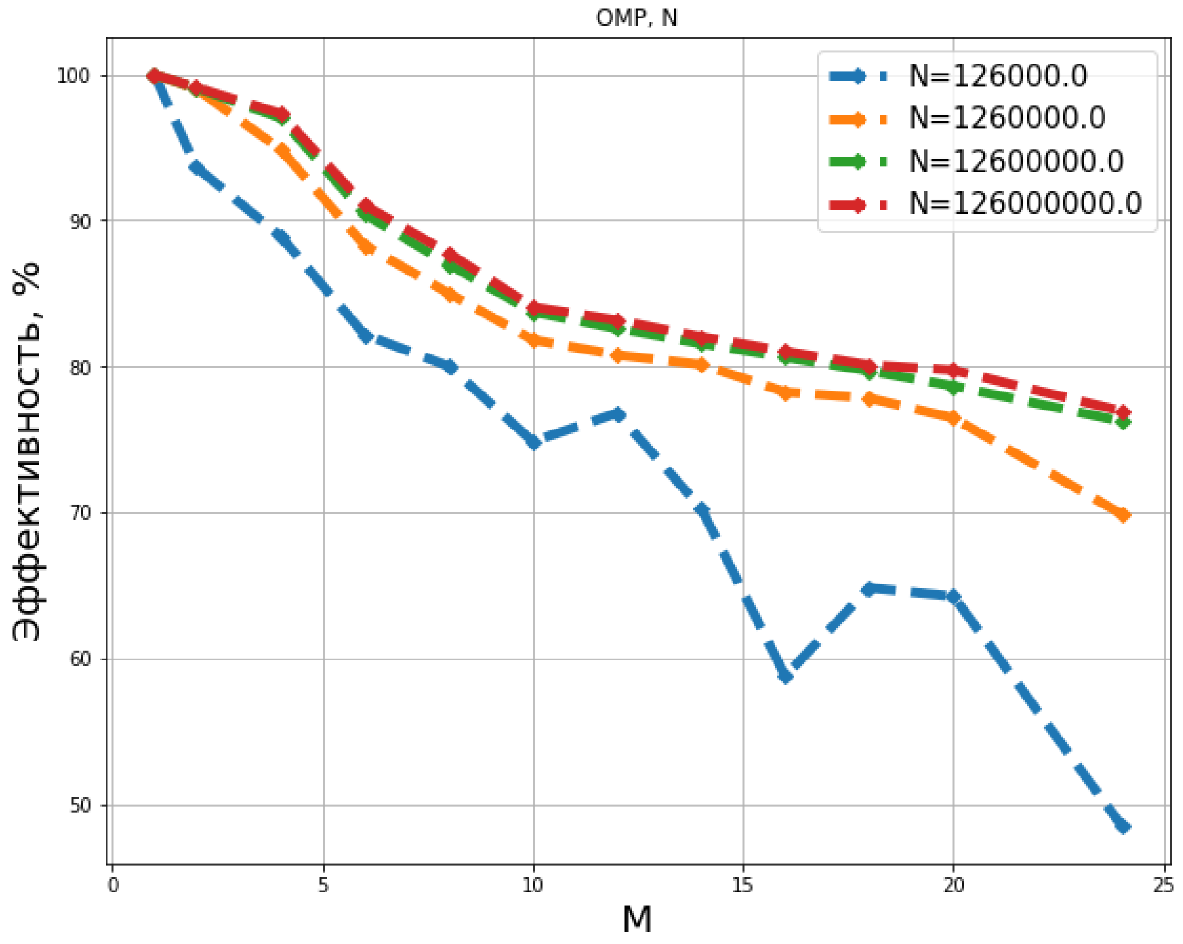


Эксперименты 2: OMP, N - количество частиц

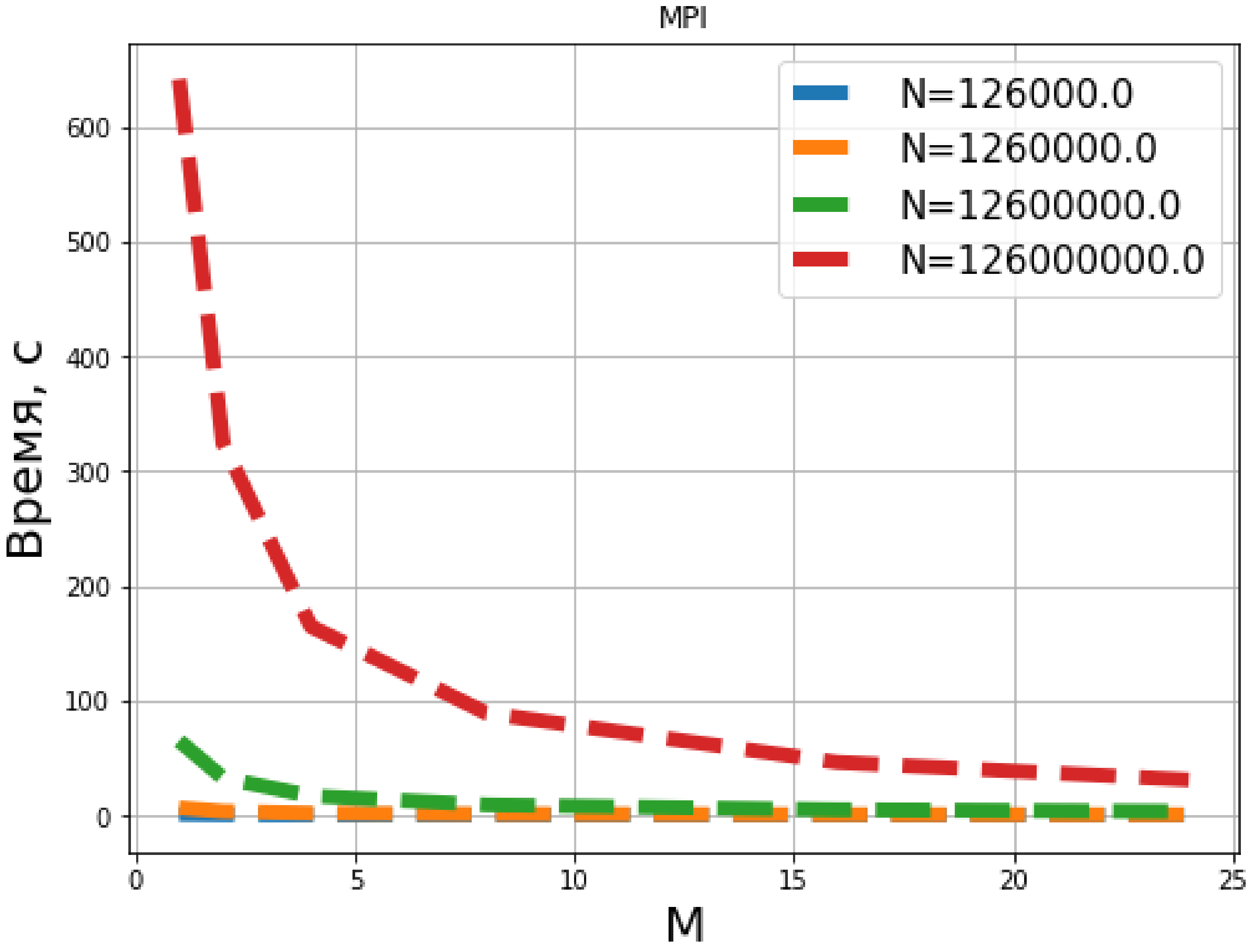


Эксперименты 2: OMP, N

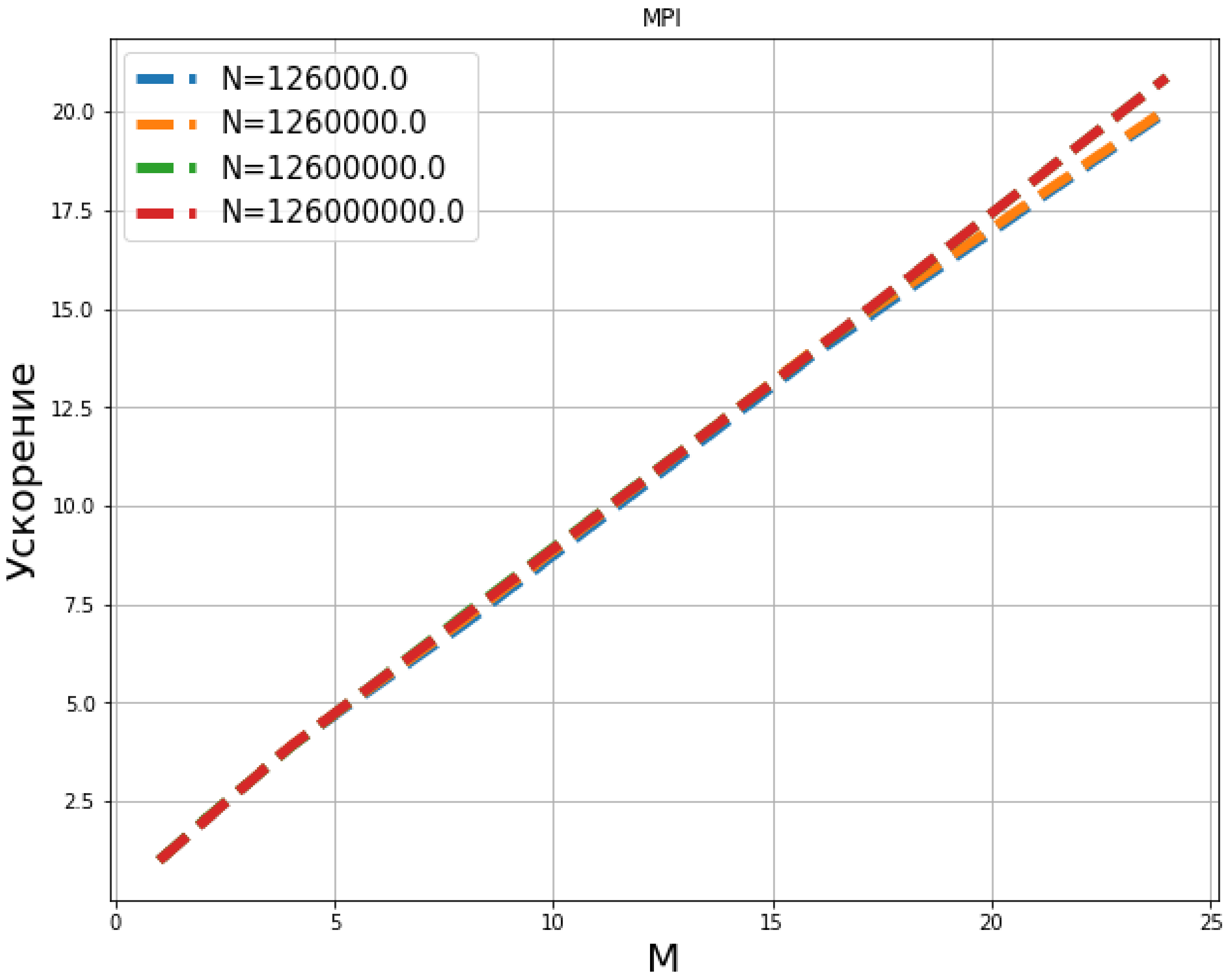


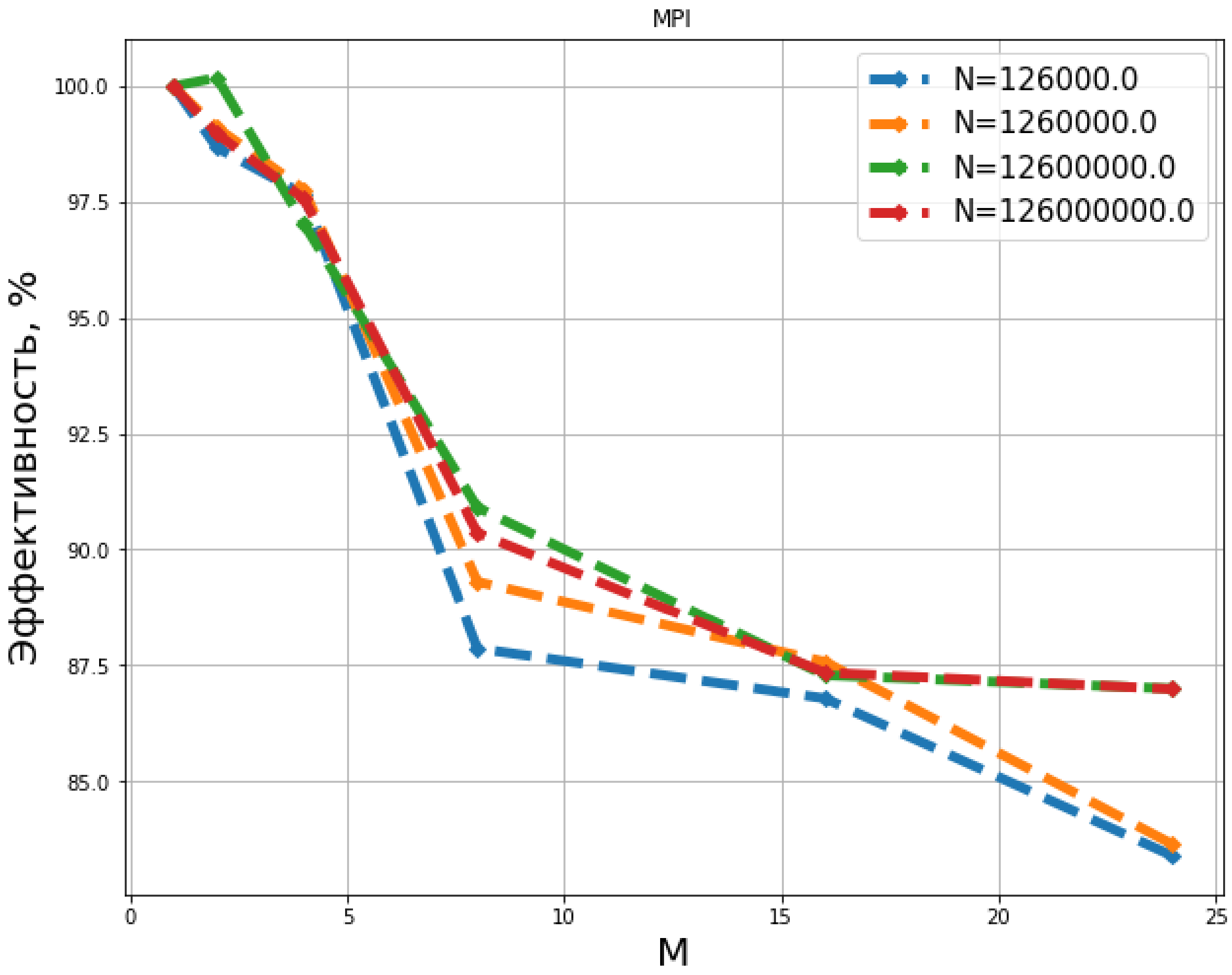


Эксперименты 3: MPI, N - количество частиц

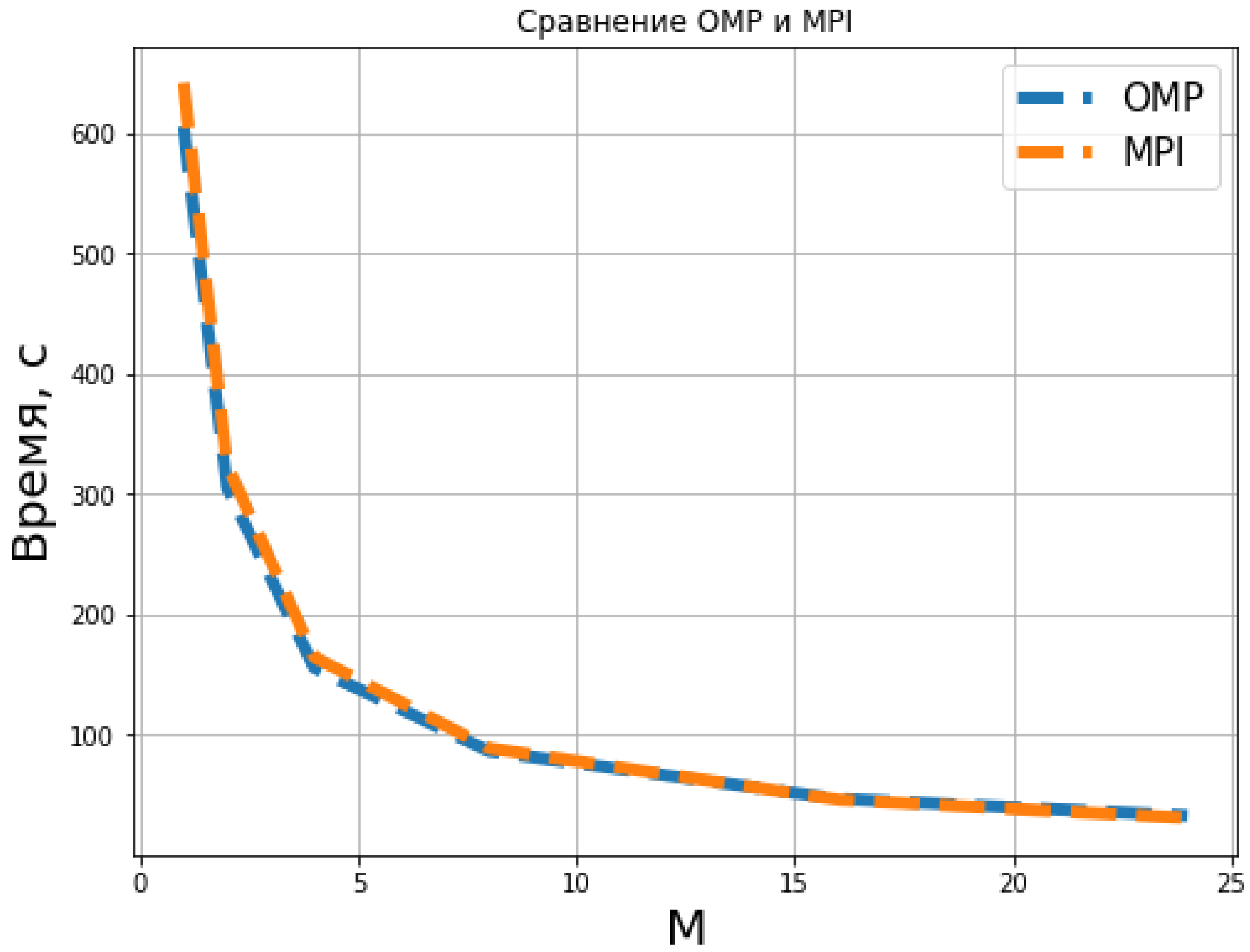


Эксперименты 3: MPI, N

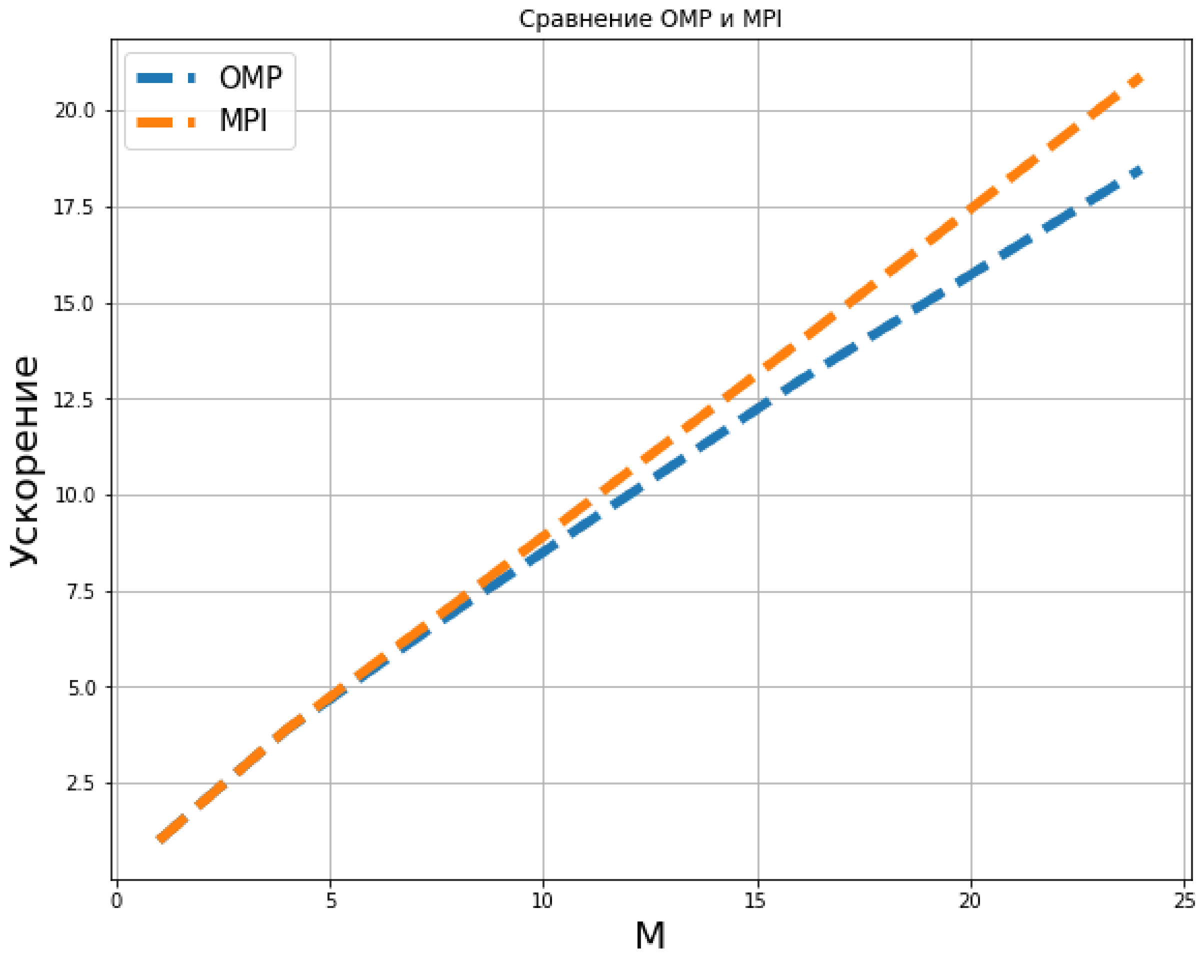


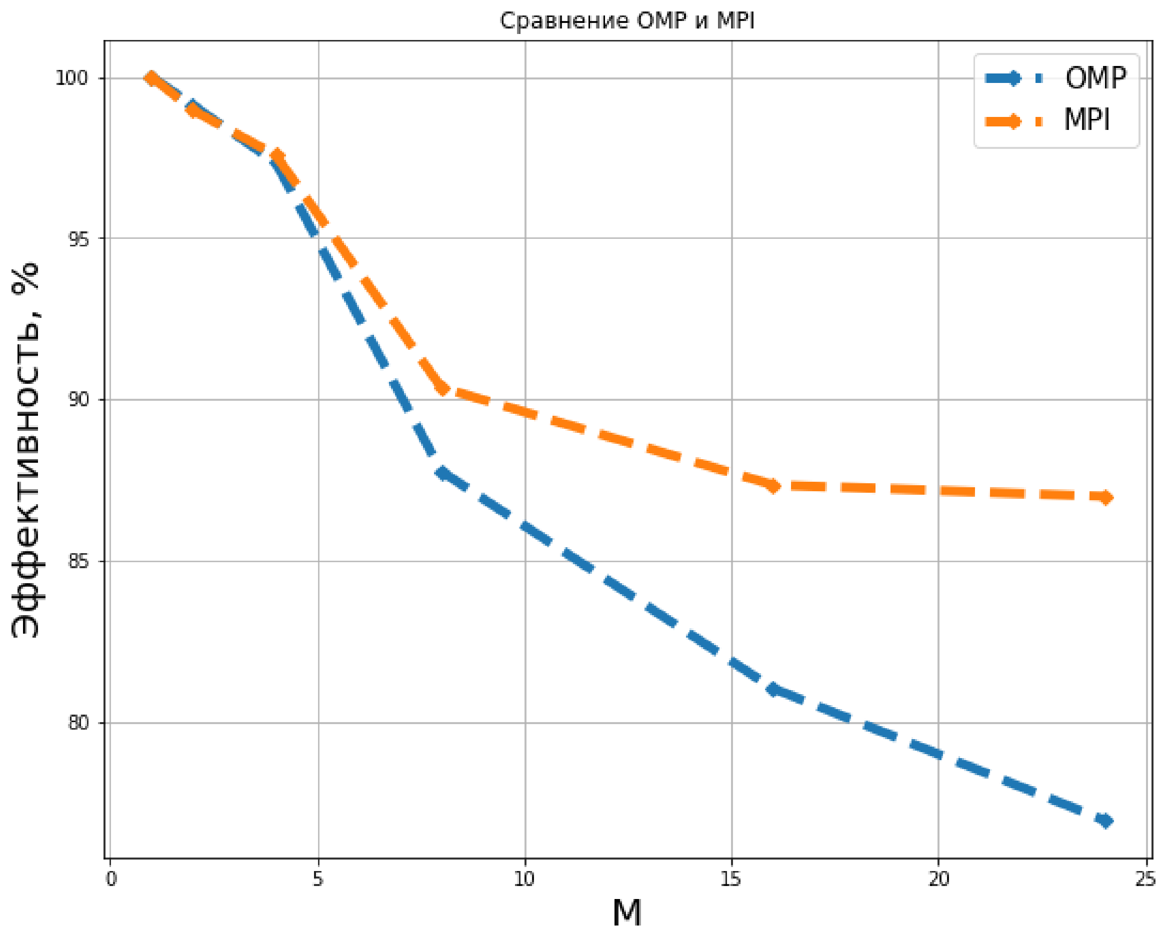


Эксперименты 4: OMP vs MPI, N=1.26e8

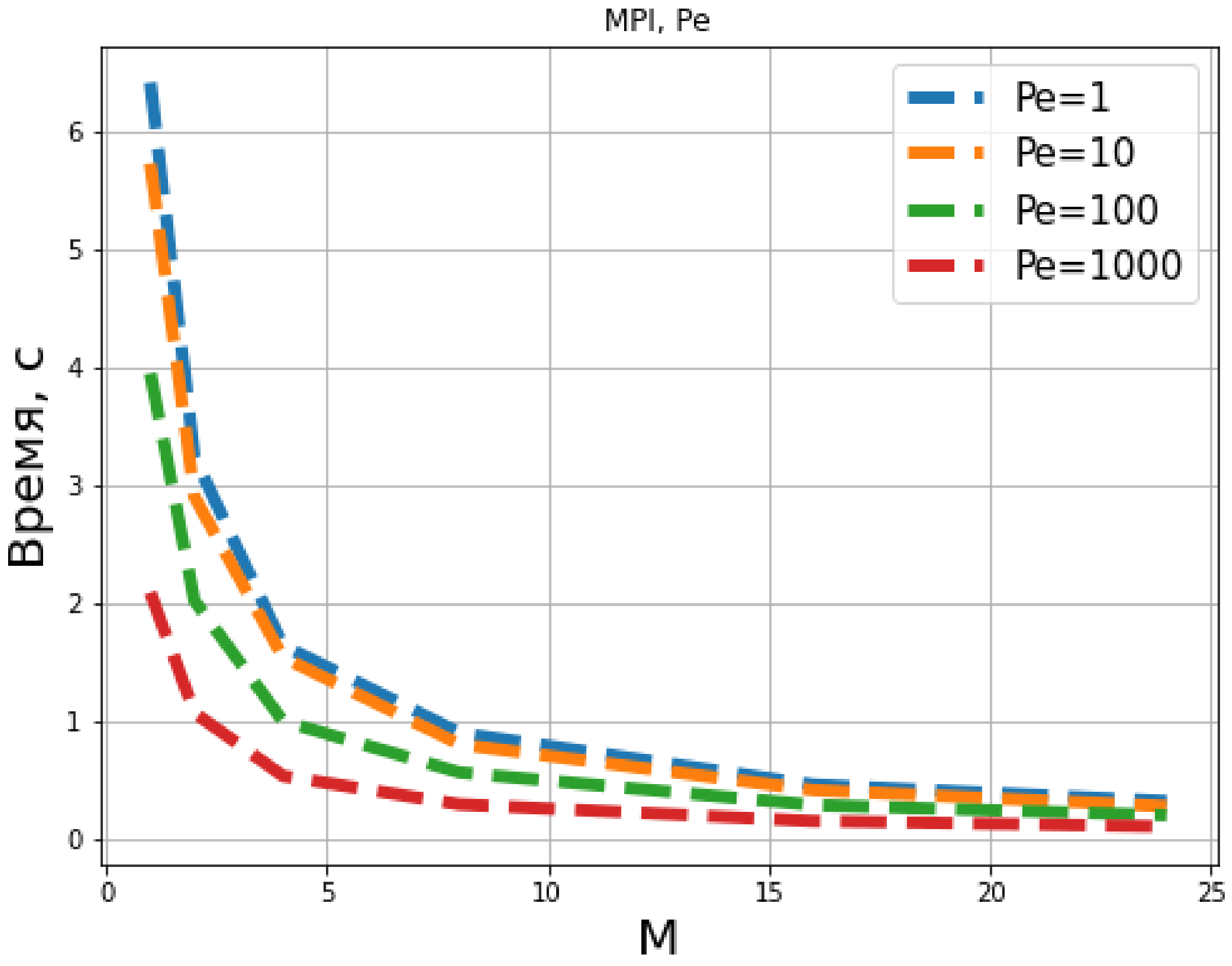


Эксперименты 4: OMP vs MPI

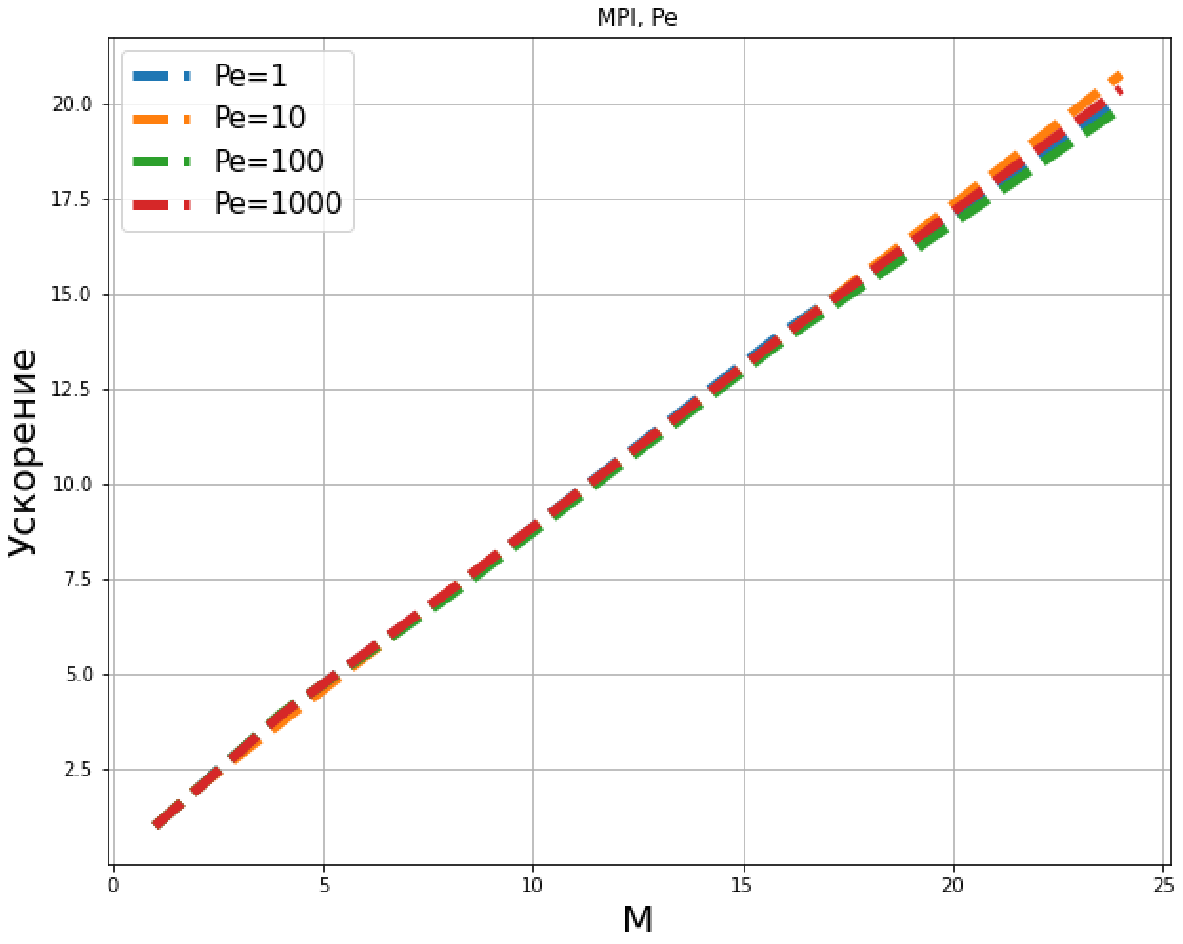


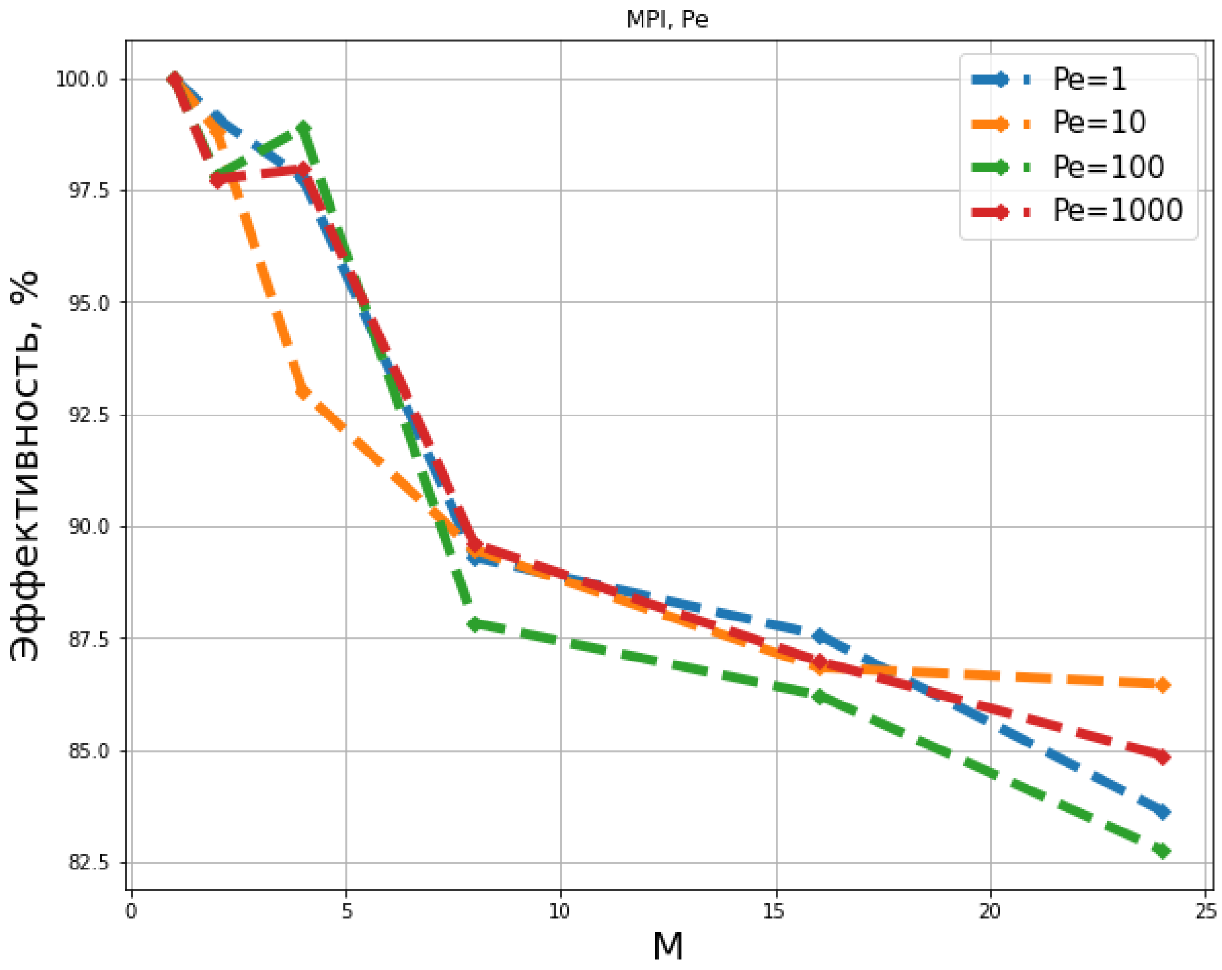


Эксперименты 5: MPI, Pe, N=1.26e6

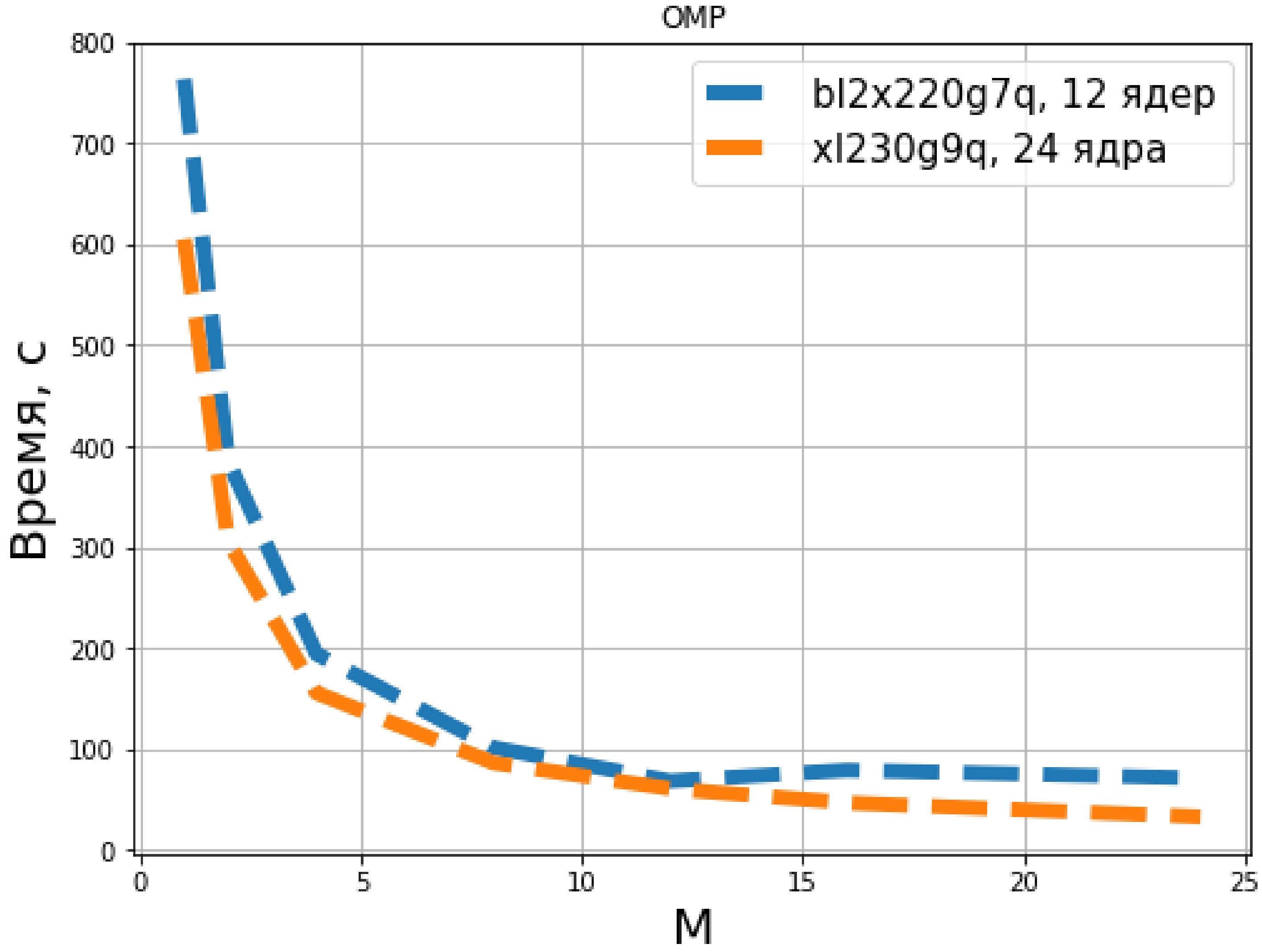


Эксперименты 5: MPI, Pe

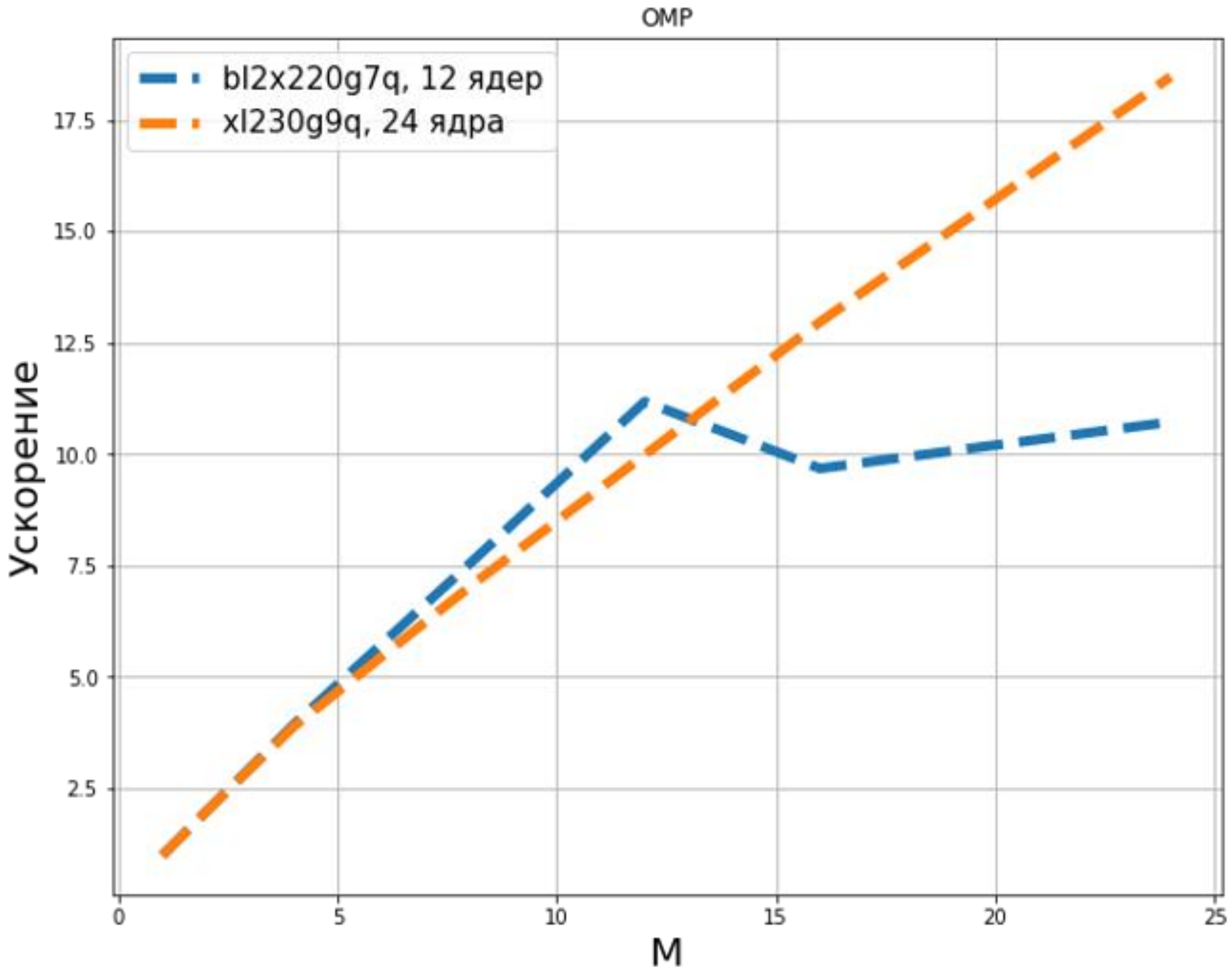


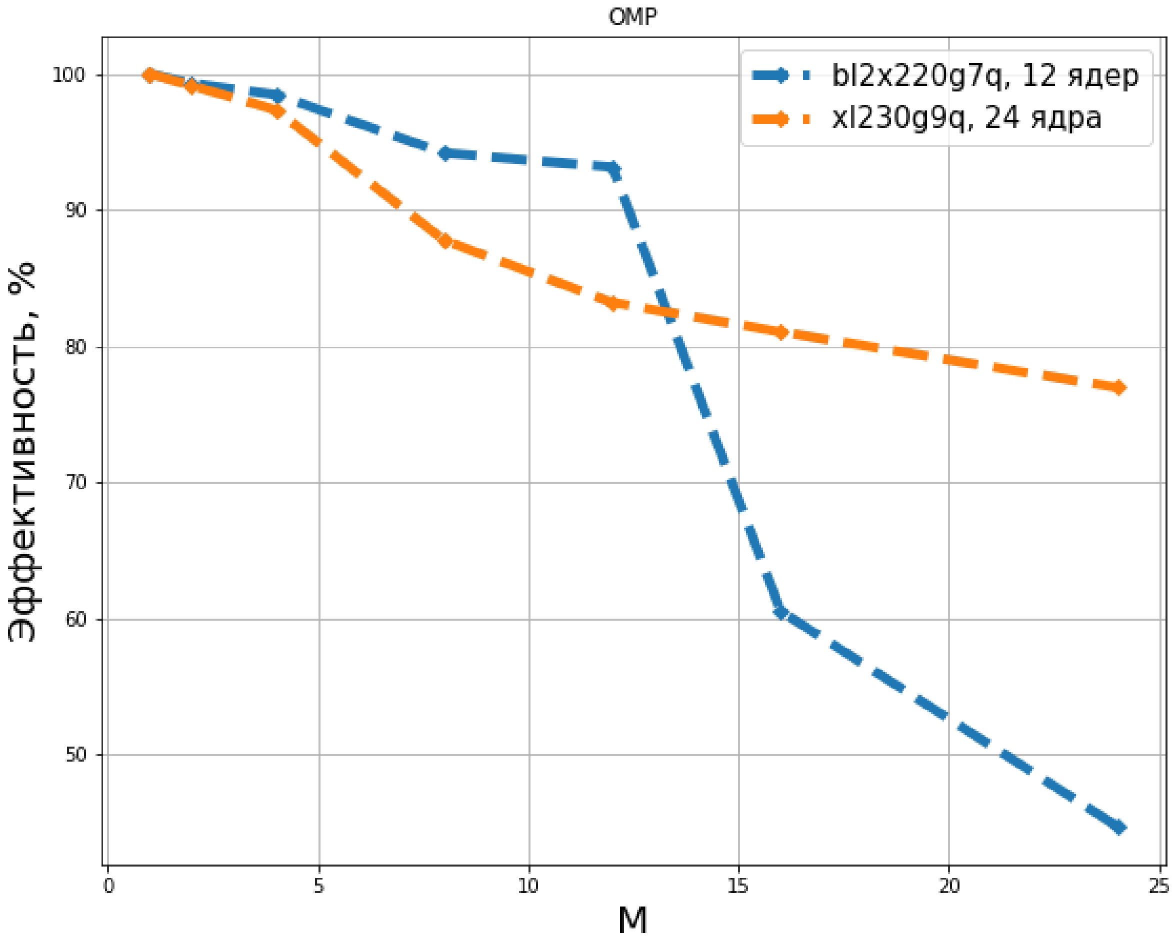


Эксперименты 6: OMP, разные узлы, N=1.26e8

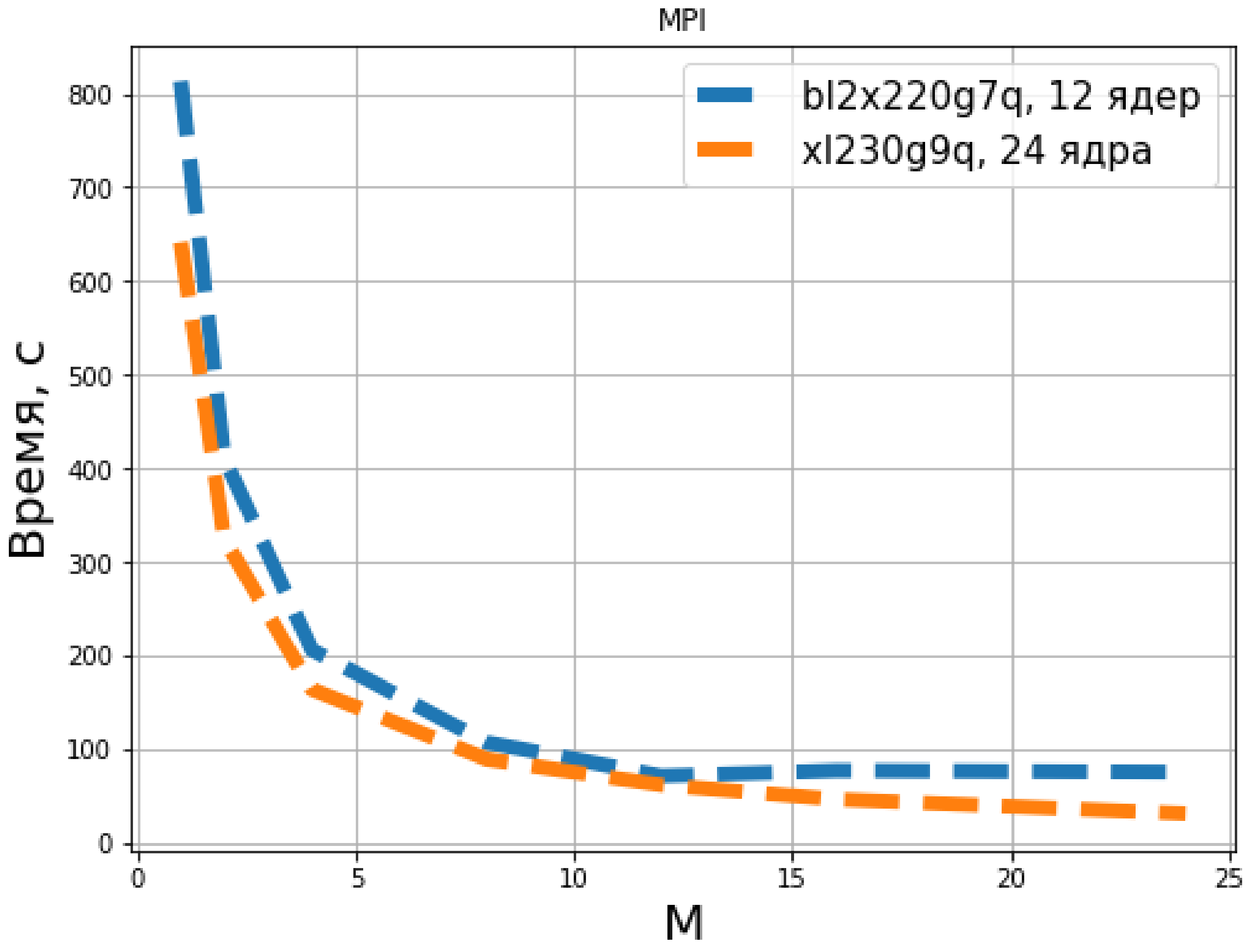


Эксперименты 6: OMP, разные узлы, N=1.26e8

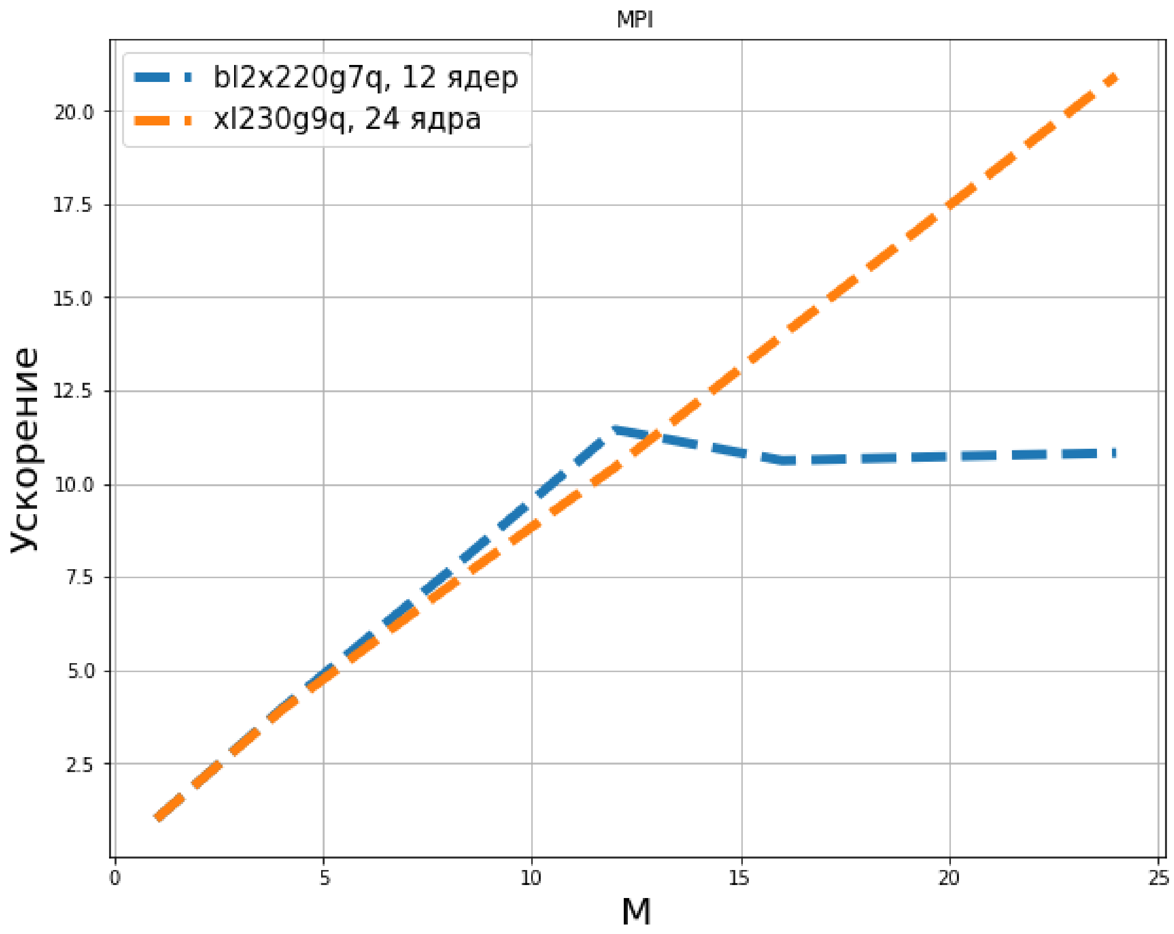


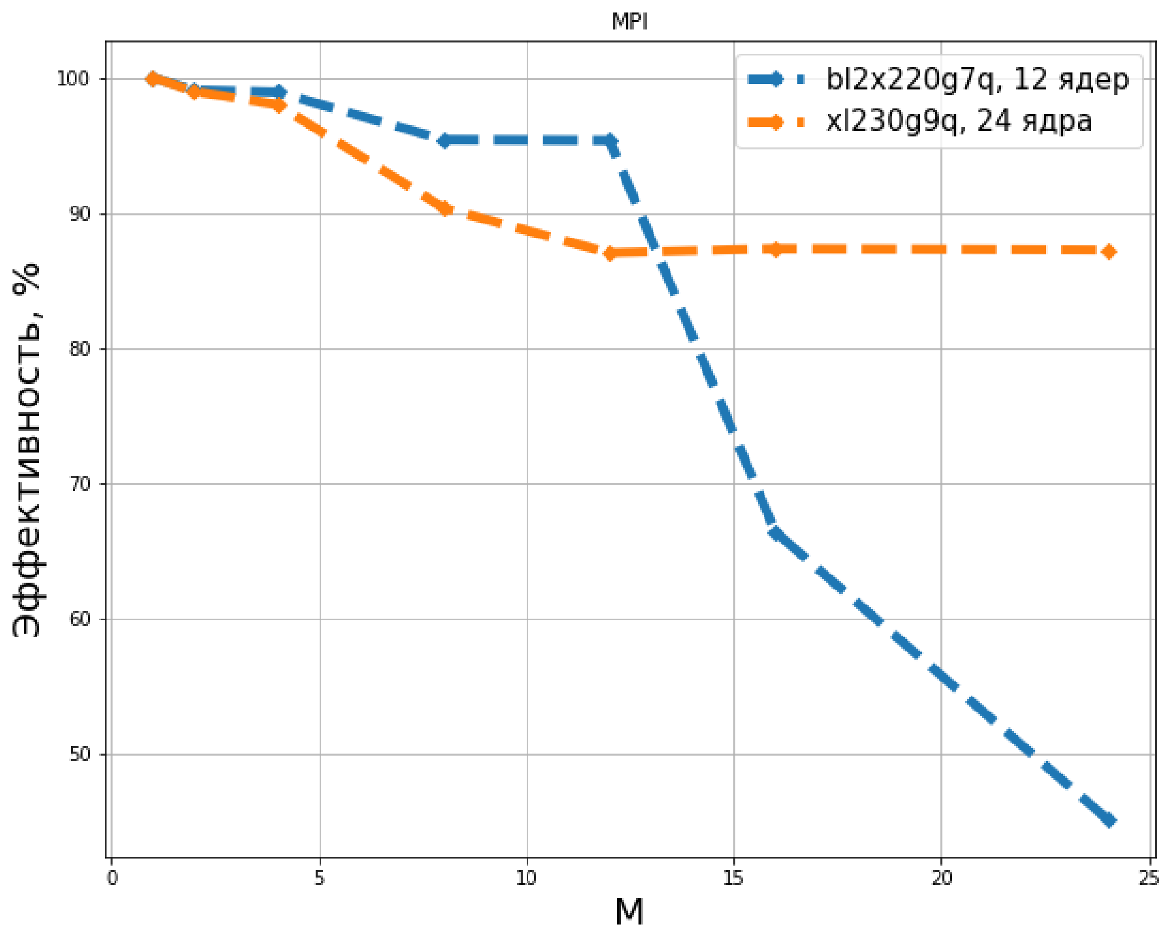


Эксперименты 7: MPI, разные узлы, N=1.26e8



Эксперименты 7: MPI, разные узлы, N=1.26e8





Результаты

- Распараллеливание с помощью OpenMP дало ускорение
  - в **18.46** раз с эффективностью **76.94%** на 24 ядерном узле
  - в **11.17** раз с эффективностью **93.14%** на 12 ядерном узле.

- Распараллеливание с помощью MPI дало ускорение
  - в **20.87** раз с эффективностью **86.98%** на 24 ядерном узле
  - в **11.44** раз с эффективностью **95.35%** на 12 ядерном узле.

Спасибо за внимание!

Список литературы

[1] Sabelfeld K.K. Random walk on spheres method for solving drift-diffusion problems. // Monte Carlo Methods and Applications. — 2016. — Vol. 22. — P. 265–281.