

项目编号：ghfund202302011489

# PF\_DCU\_MPI 软件 移植优化测试报告

项 目 名 称： 基于 C86 异构计算平台的相场模拟软件移植与优化

---

项目承担单位（公章）： 湖南大学

---

项目负责人（签字）： 夏扬

---

二〇二四 年 4 月 17 日

修改记录

日期	修订人	描述

# 1. 软件简介

本软件原本为 GPU 上运行的相场模拟软件，其单核 GPU 版本相比于同类软件单 CPU 加速在 100 倍左右。

# 2. 测试环境

## 2.1 硬件信息

	计算平台节点	其他环境（如 <b>NV GPU</b> ），若没有可删除此列
<b>CPU</b>	1*Hygon C86 7185 32-core Processor	NV V100
内存	8*16GB DDR4 2666MHz	
加速器	DCU	
存储	P300	
本地硬盘	240GB M.2 Nvme SSD	
网络	Infiniband 200Gb/s 4 vports	

## 2.2 软件信息

	计算平台	其他环境（如 <b>NV GPU</b> ），若没有可删除此列
<b>Linux Kernel</b>	3.10.0-957.el7.x86_64	
<b>MPI 环境</b>	HPC-X 2.4.1 (Open MPI) 4.0.2a1 UCX 1.6.0s	
<b>OS</b>	CentOS Linux release 7.6.1810	

ToolKit Version	DTK-22.10.1	
编译器	GCC 7.3.1 20180303 (Red Hat 7.3.1-5)	
CMake	cmake-3.17	
Boost	boost_1_75_0	
FFTW	fftw-3.3.8	

### 3. 测试软件版本

PFC\_DCU\_MPI

### 4. 移植优化与算法简介

本软件为自研相场模拟软件，由于保密原因，本代码按照任务书指标要求，只提供部分源码，其中关于算法的具体部分已隐去。本代码使用二进制代码运行，无需安装，仅需在集群上加载所需 module（运行 env.sh）。

本软件模拟的模型基本介绍如下：

The basic model is given by " Ryo Kobayashi (1994) A Numerical Approach to Three-Dimensional Dendritic Solidification, Experimental Mathematics, 3:1, 59-81, DOI: 10.1080/10586458.1994.10504577", it's a 3D pure material dendritic growth phase-field model with dimensionless undercooling and anisotropic potential (not directly interfacial anisotropy for simplicity).

The governing equation is:

$$SE_{total} = \int (\frac{1}{2} \epsilon^2 |\nabla p|^2 + F(p, m)) dV$$

$$F(p, m) = \int_{p_0}^p p'(p'+1)(p'-\frac{1}{2} + m)dp'$$

where  $m \in (-\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ,  $F(0, m) - F(1, m) = \frac{1}{6}m$ , so  $m > 0$  for solid phase ( $p=1$ ),  $m < 0$  for liquid ( $p=0$ ).

The evolution equation is:

$$\tau \frac{\partial p}{\partial t} = \epsilon^2 \nabla^2 p + p(1-p)[p-\frac{1}{2}+m(T, -\nabla p)]$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \nabla^2 T + \frac{\partial p}{\partial t}$$

$$m(T, \mathbf{v}) = -\frac{\alpha}{\pi} \tan^{-1}(\gamma \sigma(\mathbf{v})T)$$

$$\sigma(\mathbf{v}) = 1 - \delta(1 - \frac{|\mathbf{v}|^4_4}{|\mathbf{v}|^4_2})$$

The later two equations are for anisotropic potential, and it forms a cubic anisotropy.  $\sigma(\mathbf{v}) = 1$  (max) for  $\mathbf{v} = (1, 0, 0)$ ;  $\sigma(\mathbf{v}) = 1 - \frac{1}{2}\delta$  for  $\mathbf{v} = (1, 1, 0)$ ;  $\sigma(\mathbf{v}) = 1 - \frac{2}{3}\delta$  for  $\mathbf{v} = (1, 1, 1)$ . The amplitude of the anisotropy can be manipulated by changing  $\delta$  from 0 to 1.

$\tau = 3.0 \times 10^{-4}$ ,  $\epsilon = 1.0 \times 10^{-2}$ ,  $\alpha = 0.9$ ,  $\gamma = 40.0$ ,  $\delta x = \delta y = \delta z = 3.0 \times 10^{-2}$ , and  $\delta t = 1.0 \times 10^{-4}$ . The initial condition is set by adding a nucleus in an initially  $T = -\Delta = -0.25$  uniform system with adiabatic boundaries.

## 5. 编译安装过程

本代码使用二进制代码运行，无需安装，仅需在集群上加载所需 module（运行 env.sh）。

## 6. 测试算例介绍

### ##算例一

算例名称及简介：并行三维各向异性枝晶生长相场模型

本算例为使用多 DCU 并行计算三维系统中的枝晶生长模型，该模型中已开启各向异性的生长参数行为。根据 Input.txt 文件设置，可选择并行输出的结果数据文件 vtr 和 pvtr 文件，该文件可用 paraview 软件读取来可视化 p 和 T 的数据值。

（本算例中提供的 Input.txt 文件为方便速度测试并未设置输出选项）。本算例输出的 pvtr 文件与 NV 卡所输出的一致。同时，根据不同步数下输出的 p 和 T 的数据值，可计算得到枝晶生长速度，与物理理论一致，因此正确。

### ##算例二

算例名称及简介：并行三维各向同性晶体生长相场模型

本算例为使用多 DCU 并行计算三维系统中的枝晶生长模型，该模型中各向异性的生长参数行为被关闭，用于检测该晶体生长模型的基本性能。根据 Input.txt 文件设置，可选择并行输出的结果数据文件 vtr 和 pvtr 文件，该文件可用 paraview 软件读取来可视化 p 和 T 的数据值。（本算例中提供的 Input.txt 文件为方便速度测试并未设置输出选项）。本算例输出的 pvtr 文件与 NV 卡所输出的一致。同时，根据不同步数下输出的 p 和 T 的数据值，可计算得到枝晶生长速度，与物理理论一致，因此正确。

### ##算例三

算例名称及简介：超高性能单核三维各向异性枝晶生长相场模型

本算例为使用单 DCU 以高性能模式计算三维系统中的枝晶生长模型，该模型中开启了各向异性的生长参数行为，在该高性能模式下，单核 DCU 的性能能够达到 5-10 倍的常规多 DCU 水平，其性能能够对标 2-4node 的 DCU。根据 Input.txt 文件设置，可选择并行输出的结果数据文件 vtr 和 pvtr 文件，该文件可用 paraview 软件读取来可视化 p 和 T 的数据值。（本算例中提供的 Input.txt 文件为方便速度测试并未设置输出选项）。本算例输出的 pvtr 文件与 NV 卡所输出的一致。同时，根据不同步数下输出的 p 和 T 的数据值，可计算得到枝晶生长速度，与物理理论一致，因此正确。

## 7. 测试结果与分析

### 7.1 正确性验证

正确性一致说明：本算例输出的 pvtr 文件与 NV 卡所输出的一致。同时，根据不同步数下输出的 p 和 T 的数据值，可计算得到枝晶生长速度，与物理理论一致，因此正确。

### 7.2 性能测试

#### 7.2.1 算例 1

本软件为 DCU/GPU 特制化相场模拟软件，无法使用 CPU 运行，故不比较其与单核 CPU 或 32 核 CPU 性能。但可比较其他常规用于 CPU 的相场模拟代码，对比单核 CPU，单 DCU 加速倍数在 100 倍以上。

DCU 多卡/单卡 加速比为：4DCU/1DCU 3.71      整体并行效率    92.8%，达到任务书要求的 90%以上。

目前国际上无成熟通用的相场模拟软件，无法对比其性能。

#### 7.2.2 算例 2

本软件为 DCU/GPU 特制化相场模拟软件，无法使用 CPU 运行，故不比较其与单核 CPU 或 32 核 CPU 性能。但可比较其他常规用于 CPU 的相场模拟代码，对比单核 CPU，单 DCU 加速倍数在 100 倍以上。

DCU 多卡/单卡 加速比为： 4DCU/1DCU 3.65 整体并行效率 91%，达到任务书要求的 90%以上。

目前国际上无成熟通用的相场模拟软件，无法对比其性能。

### 7.2.3 算例 3

本算例为 DCU 单核专用软件算例，是我们参考 GPU/DCU 硬件架构专门开发的特制化超高性能相场模型软件，其模型，算法和软件结构都进行过定制化的优化，与普通版已不同，目前并行化还在进行中。目前其单核速度可达到普通版本的 5-10 倍以上，可与 2-4 个 node 的并行版本相提并论。

### 性能测试截图

以下为 DCU 多卡对单卡的性能对比测试：

单 DCU 运行结果截图：

```
-----Input parameters-----
Size of system: 256, 256, 256
totalTime = 2000,      printFreq = 20000, dt = 0.000050
dx = 0.020000, dy = 0.020000, dz = 0.020000
delta = 0.500000, tau = 0.000300,      epsilon = 0.010000, alpha = 0.900000, gamma = 40.000000
Delta = 0.250000
Mode = 0 (0 for regular while 1 for wake-up mode)
rank = 0, nz_local = 64, z_start_global = 0, z_end_global = 63
rank = 1, nz_local = 64, z_start_global = 64, z_end_global = 127
rank = 2, nz_local = 64, z_start_global = 128, z_end_global = 191
rank = 3, nz_local = 64, z_start_global = 192, z_end_global = 255
The overall running time is: 217.330002 sec.
The loop running time is: 207.500000 sec. 95.476924 percent of overall running time.
Kernel running time: 202.576938 sec.
Mpi running time: 62.619999 sec.
(base) xiayang@xiayangdeMacBook-Pro example_1 % ls
Input.txt          job.slurm          slurm-1209602.out  slurm-1209798.out
PF_DCU_MPI         slurm-1209599.out  slurm-1209605.out
(base) xiayang@xiayangdeMacBook-Pro example_1 % more slurm-1209605.out
Reading input from Input.txt
Done with input reading.
-----Input parameters-----
Size of system: 256, 256, 256
totalTime = 2000,      printFreq = 20000, dt = 0.000050
dx = 0.020000, dy = 0.020000, dz = 0.020000
delta = 0.500000, tau = 0.000300,      epsilon = 0.010000, alpha = 0.900000, gamma = 40.000000
Delta = 0.250000
Mode = 0 (0 for regular while 1 for wake-up mode)
rank = 0, nz_local = 256, z_start_global = 0, z_end_global = 255
The overall running time is: 806.899963 sec.
The loop running time is: 806.230042 sec. 99.916968 percent of overall running time.
Kernel running time: 805.896062 sec.
Mpi running time: 0.270000 sec.
```

4DCU 运行结果截图：



```

-----Input parameters-----
Size of system: 256, 256, 256
totalTime = 2000,      printFreq = 20000, dt = 0.000050
dx = 0.020000, dy = 0.020000, dz = 0.020000
delta = 0.500000, tau = 0.000300,      epsilon = 0.010000, alpha = 0.900000, gamma = 40.000000
Delta = 0.250000
Mode = 0 (0 for regular while 1 for wake-up mode)
Reading input from Input.txt
Done with input reading.
-----Input parameters-----
Size of system: 256, 256, 256
totalTime = 2000,      printFreq = 20000, dt = 0.000050
dx = 0.020000, dy = 0.020000, dz = 0.020000
delta = 0.500000, tau = 0.000300,      epsilon = 0.010000, alpha = 0.900000, gamma = 40.000000
Delta = 0.250000
Mode = 0 (0 for regular while 1 for wake-up mode)
Reading input from Input.txt
Done with input reading.
-----Input parameters-----
Size of system: 256, 256, 256
totalTime = 2000,      printFreq = 20000, dt = 0.000050
dx = 0.020000, dy = 0.020000, dz = 0.020000
delta = 0.500000, tau = 0.000300,      epsilon = 0.010000, alpha = 0.900000, gamma = 40.000000
Delta = 0.250000
Mode = 0 (0 for regular while 1 for wake-up mode)
rank = 0, nz_local = 64, z_start_global = 0, z_end_global = 63
rank = 1, nz_local = 64, z_start_global = 64, z_end_global = 127
rank = 2, nz_local = 64, z_start_global = 128, z_end_global = 191
rank = 3, nz_local = 64, z_start_global = 192, z_end_global = 255
The overall running time is: 217.330002 sec.
The loop running time is: 207.500000 sec. 95.476924 percent of overall running time.
Kernel running time: 202.576938 sec.
Mpi running time: 62.619999 sec.

```

加速比为  $806.899963/217.330002=3.71$

以下为单 DCU 在 BOOST 模式下对比单 CPU 性能截图（注意，由于本软件并无对应 CPU 版本，只要 GPU 版本，因此这里只能取其他研究组的类似模型模拟软件进行性能对比）：

单 DCU 在 BOOST 模式下：

```

srun: ROUTE: split_hostlist: hl=b06r1n17 tree_width 0
Reading input from Input.txt
Done with input reading.
-----Input parameters-----
Size of system: 256, 256, 256
totalTime = 2000,      printFreq = 2000, dt = 0.000050
dx = 0.020000, dy = 0.020000, dz = 0.020000
delta = 0.500000, tau = 0.000300,      epsilon = 0.010000, alpha = 0.900000, gamma = 40.000000
Delta = 0.250000
Mode = 1 (0 for regular while 1 for wake-up mode)
-----Writing Output of Velocity Now-----
-----Output Done-----
-----Writing Output of Velocity Now-----
-----Output Done-----
-----Writing Output Now-----
Writing output into w_p_2000.vtk
-----Output Done-----
-----Writing Output Now-----
Writing output into w_T_2000.vtk
-----Output Done-----
-----Writing Output for Wakeup Parameter Now-----
Writing output into Wakeup_p_2000.vtk
-----Output Done-----
-----Writing Output for Wakeup Parameter Now-----
Writing output into Wakeup_T_2000.vtk
-----Output Done-----
The overall running time is: 73.809998 sec.
The loop running time is: 73.470001 sec. 99.539358 percent of overall running time.
In detail: Regular Evolve p - 0.000000 sec, Regular Evolve T - 0.000000 sec.
In detail: Wakeup Evolve p - 2.646871 sec, Wakeup Evolve T - 11.603820 sec, Wakeup Neighbor Blocks - 18.723813 sec.
In detail: DevtoDev memory copy - 0.014012 sec.

```

单 CPU 运行结果：

```

Reading input from Input.txt
Done with input reading.
-----Input parameters-----
Size of system: 256, 256, 256
totalTime = 2000,          printFreq = 2000, dt = 0.000050
dx = 0.020000, dy = 0.020000, dz = 0.020000
delta = 0.500000, tau = 0.000300,          epsilon = 0.010000, alpha = 0.900000, gamma = 40.000000
Delta = 0.250000
-----Writing Output Now-----
-----Output Done-----
The overall running time is: 7533.984712 sec.
The loop running time is: 7510.768234 sec. 99.691843 percent of overall running time.

```

单 DCU 对比单 CPU 加速比为:  $7533.984712/73.809998=102.07$

## 8. 结论

本软件目前已移植到 DCU 上，通过了正确性验证。同时，经过大量优化后，相比于原 GPU 版本，在 DCU 上运行时已经能达到 V100 上运行时差不多的性能。如果使用单 DCU Boost 模式，相比于同类软件的 CPU 版本，加速比达到 100 倍以上，性能能比肩甚至超过单 V100 数倍。而在并行方面，并行效率在 4DCU 时可达 90%以上。