

GPU 加速的定向凝固枝晶生长的元胞自动机模型

张勇佳¹ 周建新¹ 殷亚军¹ 沈旭¹ 计效园¹ 郭钊²

(1.华中科技大学材料成形与模具技术国家重点实验室; 2.中国航发南方工业有限公司)

摘要 基于元胞自动机模型,采用 GPU 并行计算技术,在单个 GPU 上实现了凝固过程枝晶生长的元胞自动机计算模型模拟。以 Al-Cu 二元合金为例,对单个等轴晶生长过程和柱状晶生长过程进行了数值模拟。随着过冷度增加,等轴枝晶逐渐发展出二次枝晶臂和三次枝晶臂;在定向凝固枝晶竞争生长中,择优取向枝晶的二次枝晶臂阻挡了非择优取向枝晶,进而淘汰了非择优取向枝晶。与基于 CPU 的并行模型进行计算速度比较,验证了基于 GPU 的计算模型的加速效果。结果表明,在测试范围内,基于 GPU 计算模型的加速比最大可达 10.90。

关键词 GPU 计算;元胞自动机;枝晶生长;数值模拟

中图分类号 TG244.3;TP311

文献标志码 A

DOI:10.15980/j.tzzz.2022.06.013

开放科学(资源服务)标识码(OSID):



GPU-accelerated Cellular Automaton Model for Dendritic Growth during Directional Solidification

Zhang Yongjia¹, Zhou Jianxin¹, Yin Yajun¹, Shen Xu¹, Ji Xiaoyuan¹, Guo Zhao²

(1.State Key Laboratory of Materials Processing and Die & Mould Technology, Huazhong University of Science and Technology; 2.AECC South Industry Company Limited)

Abstract: Based on the cellular automaton model and GPU parallel computing technology, the cellular automaton computing model for dendritic growth during the solidification process was realized on a single GPU card. Taking Al-Cu binary alloy as object, the single equiaxed crystal growth process and columnar crystal growth process were numerically simulated. With the increase of undercooling degree, secondary and tertiary dendrite arms are gradually developed in equiaxed dendrite, where the secondary dendrite arms of non-preferentially oriented dendrites are blocked by the preferentially oriented dendrites during directionally solidified dendrite competition growth, which is then eliminated. Comparison of the calculation speed with the CPU-based parallel model verifies the acceleration effect of the GPU-based calculation model, indicating that the speedup ratio can reach up to 10.90.

Key Words: GPU Computing, Cellular Automaton, Dendritic Growth, Numerical Simulation

定向凝固是制造燃气轮机涡轮叶片的一种重要工艺。燃气轮机叶片的工作温度较高,服役时间长,需要其具备优异的高温力学性能和组织稳定性,而定向凝固过程工艺参数对叶片的组织和性能有重要影响。研究定向凝固工艺参数和叶片铸态组织之间的关系具有积极意义。基于传热、传质过程的定向凝固温度场模拟虽然能在一定程度上对定向凝固工艺进行模拟仿真,有助于工艺优化,但难以预测不同工艺参数下叶片组织形成过程。而基于元胞自动机(CA)的枝晶生长模型则能够有效解决这一问题。

近年来,在基于 CA 模型研究方面,国内外学者开

展了广泛而深入的研究。ZHU M F 等^[1]基于 CA 模型对 Al-7Si 合金凝固过程的晶体生长进行了数值模拟和试验研究,观察到了球状和树枝状生长现象。WANG W 等^[2]基于 CA 模型研究了镍基高温合金定向凝固过程一次枝晶臂间距的选择问题。BELTRAN-SANCHEZ L 等^[3]提出了定量的 CA 模型,并以 Fe-0.6C 和 Al-4.5Cu 合金为例,对模型计算精度进行了验证。ZHU M F 等^[4]提出了多组元的 CA 模型,用于对多元合金凝固过程的枝晶生长过程的模拟。PAN S 等^[5]提出了一种定量的三维 CA 模型,模型能够较好地包含界面能各向异性,并与枝晶生长的分析解进行验

收稿日期:2021-10-12;修改稿收到日期:2021-11-22

基金项目:国家重点研发计划资助项目(2020YFB1710100)

第一作者简介:张勇佳,男,1996 年出生,博士研究生,武汉(430074),E-mail:zhangyongjia@hust.edu.cn

通信作者:周建新,男,1975 年出生,教授,武汉(430074),E-mail:zhoujianxin@hust.edu.cn

引用格式:张勇佳,周建新,殷亚军,等. GPU 加速的定向凝固枝晶生长的元胞自动机模型[J]. 特种铸造及有色合金,2022,42(6):740-743.

ZHANG Y J, ZHOU J X, YIN Y J, et al. GPU-accelerated cellular automaton model for dendritic growth during directional solidification[J]. Special Casting & Nonferrous Alloys, 2022, 42(6):740-743.

证。MAREK M^[6]提出了一种网格各向异性减小的 CA 模型,结果表明,该模型对不同取向的枝晶生长过程网格各向异性具有较好的抑制作用。然而,CA 模型在大规模模拟计算方面的计算量非常大,最近一些学者开展了相关的并行算法研究。JELINEK B 等^[7]提出了一种基于区域分解的 MPI(Message Passing Intertace, 消息传递接口)并行的二维 CA 模型,耦合了格子玻尔兹曼模型对流动场进行求解,结果发现该 CA 模型具有很好的并行效果和扩展性。ESHRAHGI M 等^[8]提出了一种基于 MPI 并行的三维 CA 模型,实现了枝晶生长过程的大规模模拟,发现该模型具有良好的并行加速效果。DOBRAVEC T 等^[9]提出了一种基于自适应网格的 CA 模型,显著降低了 CA 模型的计算量,并应用于二元合金枝晶生长和共晶生长过程的模拟。

尽管上述并行算法在一定程度上提高了 CA 模型的计算速度,但基于 MPI 的 CA 模型往往需要在数百核中央处理器(CPU)上才能实现较好的加速效果,同时,MPI 程序的通信成本也进一步限制了模型并行加速比的提高。而随着图形处理器(GPU)硬件性能的不不断提高,基于 GPU 的并行计算技术得到重视。KUZNIK F 等^[10]提出了一种基于 GPU 的格子玻尔兹曼模型,并应用于流动过程数值模拟。DOMÍNGUEZ J M 等^[11]将 GPU 并行计算方法应用于光滑粒子流体动力学计算中。SAKANE S 等^[12]提出了一种 GPU 加速的相场-格子玻尔兹曼模型,应用于凝固过程枝晶生长过程的模拟。ZHANG Y 等^[13]提出了一种 GPU 加速的晶粒生长 CA 模型,并应用于凝固过程晶粒结构的预测。WANG Y 等^[14]提出了 GPU 加速的磁流体动力学求解器,并验证了模型的并行加速效果。

因此,本课题对枝晶生长的 CA 模型在 GPU 上的算法实现进行了研究,将一种改进的 CA 模型^[15]对应的数值算法进行并行化,对二元合金凝固过程等轴晶和柱状晶生长过程进行了数值模拟和分析,并对该模型的并行加速效果进行了分析。

1 枝晶生长 CA 模型与数值计算方法

1.1 枝晶生长 CA 模型

二元合金凝固过程中,固液界面溶质成分根据溶质再分配过程,可得平衡时固相侧和液相侧成分关系如下:

$$C_S^* = kC_L^* \quad (1)$$

式中, C_S^* 为固液界面中固相溶质浓度; C_L^* 为固液界面中液相溶质浓度; k 为溶质再分配系数。

根据 Gibson-Thomson 关系,可计算出固液界面处液相一侧的平衡溶质成分:

$$C_L^* = C_0 + \frac{T^* - T_L^0}{m} + \frac{\Gamma \cdot K}{m} \quad (2)$$

式中, m 为液相线斜率; T^* 为界面处平衡温度; T_L^0 为合金液相初始溶质成分点平衡液相线温度; K 为界面曲率; Γ 为 Gibson-Thomson 系数; C_0 为初始合金成分。

液相一侧的溶质成分可通过溶质扩散方程^[16]求解:

$$\frac{\partial C_L}{\partial t} = D_L \nabla^2 C_L + C_L(1 - k) \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (3)$$

式中, C_L 为液相溶质浓度; D_L 为溶质在液相中的扩散系数; f_s 为单元固相分数; t 为时间。由于固相扩散系数相比于液相扩散系数很小,为简化计算,故不考虑溶质在固相中的扩散。

CA 单元的固相分数增量通过下式计算^[16]:

$$\Delta f_s = \frac{C_L^* - C_L}{C_L^* (1 - k)} \quad (4)$$

在本课题的 CA 模型中,元胞状态分为液相元胞($f_s = 0$),固相元胞($f_s = 1$)和界面元胞($0 < f_s < 1$)。每个元胞包含温度、液相溶质浓度,固相溶质浓度等变量。采用 Moore 邻居规则来定义当前元胞的邻位元胞,在三维 CA 模型中,每个元胞有 26 个 Moore 邻居。每个元胞具有固相分数值(f_s),当固相分数为 1 时,当前元胞转变为固相元胞,采用改进的偏心立方算法^[15]来捕捉邻位的 Moore 邻居中的液相元胞,将其转变为界面单元。在 CA 模型的数值计算方面,采用有限差分法对溶质场进行求解,采用一阶 Euler 格式离散时间导数,对溶质场采用 $3 \times 3 \times 3$ 的差分模板计算溶质场的二阶空间导数^[15]。温度场由温度梯度和冷却速度给定。该模型适用于合金凝固过程从液相中析出面心立方晶体的固相这一类固液相变过程。

1.2 GPU 加速的元胞自动机模型算法实施

为了提高计算速度,采用 GPU 并行计算方法。基于 CUDA(Compute Unified Device Architecture)构架进行算法开发,采用 CUDA C 语言编程实现。在 CUDA 构架下,GPU 的并行采用线程块(Thread Block)和线程网格(Thread Grid)的形式进行组织。每个线程块包含一组线程,每个线程网格包含多个线程块,线程块内部的线程并发执行,多个线程块之间可以进行同步操作。对于 CA 模型的并行,可以将涉及的有限差分网格映射到 GPU 线程中,即每个元胞对应于一个线程来进行操作。由于大规模 CA 模拟中元胞网格数量巨大,因此,采用分层映射的方法,将三维元胞网格按 Z 坐标方向进行分层,进而映射到二维形式的 GPU 线程中。在 GPU 硬件层面,计算能力取决于 CUDA 核心数量,为了实现较高的计算效率,在核心数量较多的 NVIDIA

2070 Super GPU 上进行算法开发。

计算步骤主要包括:计算固相分数增量,计算每个元胞对应的正八面体边长,根据捕捉算法来判断邻居元胞是否被当前元胞捕获;采用有限差分方法求解溶质扩散方程,根据元胞固相分数更新界面元胞状态,同时遍历界面元胞的 Moore 邻居元胞;将周围的液相元胞转变为界面元胞,最后,将当前界面元胞中固相分数为 1 的元胞转变为固相元胞。以此循环,直至程序终止。为了进一步提高 GPU 端程序的并行性能,将计算中涉及的合金属性(如液相线斜率、初始合金成分、溶质分配系数等)对应的变量存储在常量内存中,以提高其在程序中的内存访问速度,提高程序的计算效率。由于每个子程序算法较为复杂,所需的寄存器数量较多,因此未使用 GPU 端的共享内存。为了得到较好的加速效果,需要配置线程块的大小,以获得最优的加速效果。对于本课题的二维线程块的组织形式,经测试,较优的线程块大小配置为(16,8,1)。

2 模拟结果与分析

为验证该 CA 模型的准确性,对单个等轴晶生长过程进行模拟。以 Al-5Cu 合金为例,对单个等轴晶生长过程和定向凝固多个枝晶生长过程进行了数值模拟。合金液相线斜率为 $-2.6\text{ K}/\%$,溶质平衡分配系数为 0.17,Gibson-Thomson 系数为 $2.4 \times 10^{-7}\text{ K} \cdot \text{m}$,液相

溶质扩散系数为 $3.0 \times 10^{-9}\text{ m}^2/\text{s}$,元胞大小为 $5\text{ }\mu\text{m}$,在单个等轴晶生长算例中,网格区域为 $300 \times 300 \times 300$,初始均一过冷度为 3 K ,冷却速率为 1 K/s ;在定向凝固多个枝晶生长算例中,底部初始过冷度为 5 K ,冷却速率为 1 K/s ,温度梯度为 100 K/m ,计算区域网格为 $100 \times 800 \times 800$ 。单个等轴枝晶生长过程的模拟结果见图 1。可以看出,由于初始过冷度较大,枝晶生长过程具有繁茂的二次枝晶臂及三次枝晶臂,枝晶表现出立方晶系的六重对称形,枝晶的生长方向没有因网格各向异性产生的数值误差而改变,表明该 CA 模型对网格各向异性具有较好的抑制。定向凝固多个枝晶生长过程的模拟结果见图 2。初始条件为底部设置两种具有不同取向的晶粒,左侧为 4 个与 Z 轴方向呈 0° 夹角的晶粒,右侧为 4 个与 Z 轴方向呈 30° 的晶粒。模拟结果表明,在一次枝晶臂上发展出二次和三次枝晶臂,非择优取向的枝晶生长过程中枝晶臂呈现出明显的非对称生长。随着枝晶生长,非择优取向枝晶逐渐被邻近的择优取向枝晶的二次枝晶臂阻挡,图 2b 中最左侧的非择优取向枝晶已被完全阻挡。随着凝固过程进行,枝晶间的竞争作用逐渐加强,在图 2c 和图 2d 中,从左至右的非择优取向枝晶依次被择优取向枝晶阻挡,使得择优取向的枝晶生长速度显著领先于非择优取向的枝晶。在图 2d 中,非择优取向的枝晶的一次枝晶干完全被择优取向的枝晶遮挡,最右侧枝晶发展出二次和高次枝晶臂,枝晶

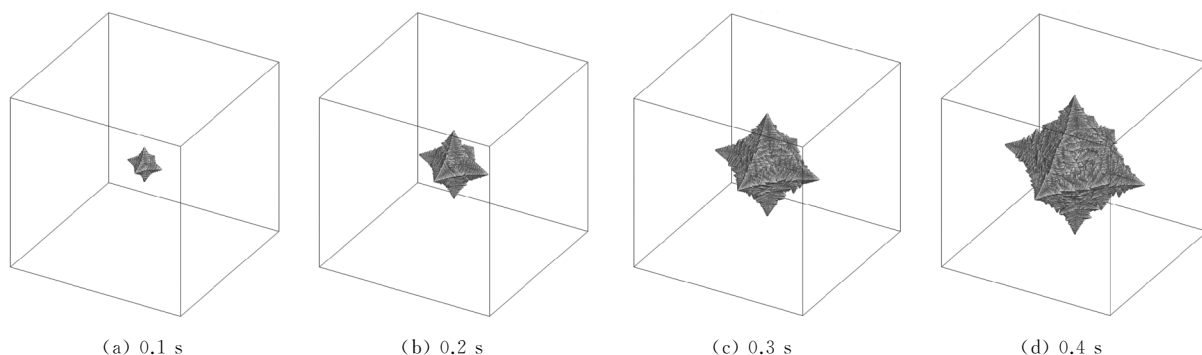


图 1 单个等轴晶生长过程
Fig.1 Single equiaxed crystal growth process

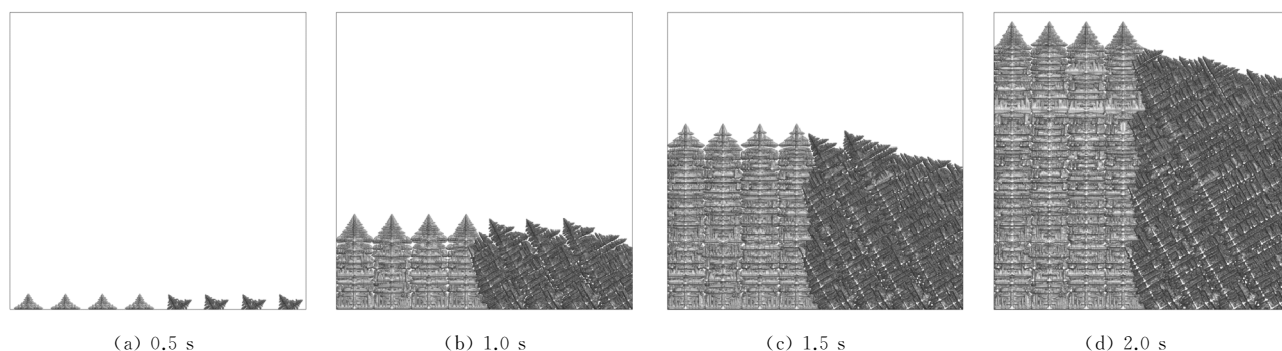


图 2 定向凝固条件下枝晶生长过程
Fig.2 Dendrite growth during directional solidification process

尖端构成倾斜的外包络线。

为评估 CA 模型并行加速效果,在两种 GPU 上进行了并行性能测试,测试 GPU 型号分别为 NVIDIA 2070 Super(记为 GPU1)和 NVIDIA 2080 Ti(记为 GPU2)。其中,NVIDIA 2070 Super 包含 2 560 个 CUDA 核心,NVIDIA 2080 Ti 包含 4 352 个 CUDA 核心。同时,采用基于 OpenMP 并行的 CPU 程序作为基准,以研究相对于 CPU 并程序的加速比,测试的 CPU 为 i7 7700(8 核)。首先,评估了图 2 算例的加速效果,采用基于 GPU 的计算模型耗时 10.2 min,而采用基于 CPU 的计算模型则耗时 97.0 min,即加速比可达 9.5。为了研究网格数对并行加速效果的影响,对单个枝晶的等温凝固过程进行了模拟,初始晶粒在 Z 轴对应平面底部,模拟区域 XOY 平面网格数为 100×100 ,Z 方向网格数随总网格数变化,总网格数分别为 1×10^6 、 2×10^6 、 4×10^6 、 6×10^6 、 8×10^6 、 1×10^7 、 1.2×10^7 、 1.4×10^7 。计算迭代 5 000 个时间步。表 1 为模拟计算耗时随着网格数的变化关系以及两种 GPU 相对于 CPU 并程序的加速比。结果表明,随着网格数增加,基于 GPU 的并行模型模拟耗时均显著低于基于 CPU 的并行模型。GPU2 的加速比高于 GPU1 的加速比,这是由于 GPU2 的计算核心数较多;随着网格数增加,GPU1 和 GPU2 的加速比逐渐提高,这可能是由于较低网格数时,GPU 程序运行时负载较低,子程序调用开销较大。

表 1 GPU 加速的 CA 模型的计算耗时与加速比

Tab.1 Elapsed time and speed-up ratio of the GPU-accelerated CA model

网格数量	CPU 耗时/s	GPU1 耗时/s	GPU2 耗时/s	GPU1 加速比	GPU2 加速比
1×10^6	1 275.22	203.12	157.01	6.28	8.12
2×10^6	2 534.20	392.23	310.01	6.46	8.17
4×10^6	4 912.32	798.32	630.02	6.15	7.80
6×10^6	7 231.27	1 109.60	840.23	6.52	8.61
8×10^6	10 208.98	1 582.10	1 100.22	6.45	9.28
1×10^7	14 389.96	2 012.23	1 402.12	7.15	10.26
1.2×10^7	18 230.10	2 289.28	1 672.20	7.96	10.90
1.4×10^7	22 089.18	2 687.49	2 109.21	8.21	10.47

3 结 论

提出了一种基于 GPU 的并行 CA 模型,对单个等轴枝晶和定向凝固条件下多个枝晶生长过程进行了模拟,并对该并行 CA 模型的加速比进行了评估。结果表明,该模型能较好地模拟枝晶生长过程的分枝及竞争生长现象。在计算加速比方面,相比较于基于 CPU 并行模型,加速比最大可达 10.9。该 CA 模型有助于对合金凝固过程的枝晶生长过程进行大规模模拟。

参 考 文 献

- [1] ZHU M F, KIM J M, HONG C P. Modeling of globular and dendritic structure evolution in solidification of an Al-7mass% Si alloy [J]. ISIJ International, 2001, 41(9): 992-998.
- [2] WANG W, LEE P D, MCLEAN M. A model of solidification microstructures in nickel-based superalloys: Predicting primary dendrite spacing selection[J]. Acta Materialia, 2003, 51(10): 2 971-2 987.
- [3] BELTRAN-SANCHEZ L, STEFANESCU D M. A quantitative dendrite growth model and analysis of stability concepts[J]. Metallurgical and Materials Transactions, 2004, A35(8): 2 471-2 485.
- [4] ZHU M F, CAO W, CHEN S L, et al. Modeling of microstructure and microsegregation in solidification of multi-component alloys[J]. Journal of Phase Equilibria and Diffusion, 2007, 28(1): 130-138.
- [5] PAN S, ZHU M F. A three-dimensional sharp interface model for the quantitative simulation of solutal dendritic growth[J]. Acta Materialia, 2010, 58(1): 340-352.
- [6] MAREK M. Grid anisotropy reduction for simulation of growth processes with cellular automaton[J]. Physica, 2013, D253: 73-84.
- [7] JELINEK B, ESHRAGHI M, FELICELLI S, et al. Large-scale parallel lattice Boltzmann-cellular automaton model of two-dimensional dendritic growth[J]. Computer Physics Communications, 2014, 185(3): 939-947.
- [8] ESHRAGHI M, JELINEK B, FELICELLI S D. Large-scale three-dimensional simulation of dendritic solidification using lattice boltzmann method[J]. JOM, 2015, 67(8): 1 786-1 792.
- [9] DOBRAVEC T, MAVRIČ B, AARLER B. A cellular automaton-finite volume method for the simulation of dendritic and eutectic growth in binary alloys using an adaptive mesh refinement [J]. Journal of Computational Physics, 2017, 349: 351-375.
- [10] KUZNIK F, OBRECHT C, RUSAOUEN G, et al. LBM based flow simulation using GPU computing processor[J]. Computers & Mathematics with Applications, 2010, 59(7): 2 380-2 392.
- [11] DOMÍNGUEZ J M, CRESPO A J C, GÓMEZ-GESTEIRA M. Optimization strategies for CPU and GPU implementations of a smoothed particle hydrodynamics method[J]. Computer Physics Communications, 2013, 184(3): 617-627.
- [12] SAKANE S, TAKAKI T, ROJAS R, et al. Multi-GPUs parallel computation of dendrite growth in forced convection using the phase-field-lattice Boltzmann model [J]. Journal of Crystal Growth, 2017, 474: 154-159.
- [13] ZHANG Y, ZHOU J, YIN Y, et al. GPU-accelerated cellular automaton model for grain growth during directional solidification of nickel-based superalloy[J]. Metals, 2021, 11(2): 298-305.
- [14] WANG Y, FENG X, ZHOU Y, et al. A multi-GPU finite volume solver for magnetohydrodynamics-based solar wind simulations [J]. Computer Physics Communications, 2019, 238: 181-193.
- [15] 郭钊,周建新,沈旭,等. 改进元胞自动机法数值模拟高温合金凝固过程枝晶生长行为[J]. 机械工程材料, 2020, 44(2): 65-72.
- [16] ZHU M F, STEFANESCU D. Virtual front tracking model for the quantitative modeling of dendritic growth in solidification of alloys[J]. Acta Materialia, 2007, 55(5): 1 741-1 755.

(编辑:刘晨辉)