DOI: 10.19650/j.cnki.cjsi.J2209310

基于 GPU-CA 异构并行的连铸坯凝固组织软测量模型*

汪静静,孟红记,阳 剑,谢 植
(东北大学信息科学与工程学院 沈阳 110819)

摘 要:铸坯凝固组织结构软测量模型算法复杂,计算量大,求解耗时长,基于中央处理器(CPU)的串行求解方法难以适应大尺寸铸件的预测需求。为了提高模型的计算效率,提出一种基于图形处理器(GPU)异构并行的元胞自动机(CA)软测量模型。首先设计 GPU-CA 异构并行算法,消除元胞之间的数据依赖和数据竞争问题,优化数据并行度;其次设计多流任务调度方案,解决单流中独立任务互相等待的问题,提高任务并行度;最后,使用某钢厂大型连铸机生产的两个钢种进行模型测试,预测结果与钢厂实验数据有较高的吻合度,等轴晶率误差约分别为 1% 和 1.5%,温度与实测温度的最大相对误差为 1.37%。与 CPU 计算精度相同的情况下,GPU 的计算加速比高达数百倍,极大地提高了模型的计算速度。

关键词: GPU-CA 异构;并行算法;凝固组织结构;加速比;软测量模型
中图分类号: TH7 TP3 **文献标识码**: A **国家标准学科分类代码**: 410.75 520.60

GPU-CA heterogeneous parallelism based soft-sensing model for solidification structure of continuous casting slab

Wang Jingjing, Meng Hongji, Yang Jian, Xie Zhi
(*College of Information Science and Engineering*, *Northeastern University*, *Shenyang 110819*, *China*)

Abstract: The soft-sensing model for solidification structure of continuous casting slab is complicated in algorithm, large amount of calculation and time-consuming in solution. The method based on the central processing unit (CPU) is difficult to meet the prediction needs of large-size casting. To improve the calculation efficiency, a cellular automaton (CA) soft-sensing model based on graphic processing unit (GPU) heterogeneous parallelism is proposed. Firstly, the heterogeneous parallel algorithm of GPU-CA is designed to eliminate the data dependence and data competition among cells, which optimizes the parallelism degree among data. Secondly, a multi-stream task scheduling scheme is proposed to solve the problem of independent tasks waiting each other in single-stream, and improving the degree of task parallelism. Finally, two kinds of the steel produced by a large-scale continuous caster in a certain steel plant are used to test the model. The predicted results are in good agreement with the field experiment data, where equiaxed grain rate errors are about 1% and 1.5%, respectively. The maximum relative error between temperature and measured temperature is 1.37%. In the case of the same calculation accuracy as CPU, the speedup of GPU is hundreds of times, which greatly improves the computing speed of the model.

Keywords: GPU-CA isomerism; parallel algorithm; solidification structure; speedup; soft-sensing model

0 引 言

铸坯凝固组织由典型的柱状晶和等轴晶形成。等轴晶结构致密,力学性能具有各向同性,不易产生裂纹;柱状晶力学具有方向性,在加工过程中容易断裂。等轴晶占比直接决定着铸件最终的机械属性和性能。因此,研究工艺参数与铸坯凝固组织结构之间的关系,对指导工艺生产十分重要。传统试错法获取指定工艺条件下的铸坯凝固组织结构需要经过完整的连铸过程,然后通过火焰切割 1 000℃以上的一定厚度的铸坯试样,并按照精度要求经过线切割及磨削等精加工后,将其放入酸液中侵

收稿日期:2022-02-17 Received Date: 2022-02-17
*基金项目:国家自然科学基金(51634002)项目资助

蚀,整个过程经历需要 3~7 d 时间。整个工艺过程非常复杂,环境恶劣,需耗费大量的人力物理导致成本高,且整个流程需要经历较长的时间。为此,专家学者们提出了相场(phase field, PF)[1-3]、元胞自动机(cellular automaton, CA)[4-8]、水平集(level set, LS)[9]以及界面追踪[10]等一系列数值模型,使用计算机技术通过钢种成分、过热度、拉速以及二冷各段水量等易测变量对凝固组织结构进行推断,通过软件方式实现铸坯凝固组织结构软测量[11-13]。然而,数值模拟实现凝固组织软测量虽然易于实现,但连铸生产经历了液相、固液两相、固相等较为复杂多相凝固过程,致使其算法复杂,计算量庞大,求解过程仍然需要很长的时间。软测量模型实现指导工艺生产效率需要提高模型的计算效率。

一些学者提出了自适应网格算法[14]和多核中央处理器(central processing unit, CPU)并行计算[15]等方法加速模型求解。这些方法在 CPU 上完成计算,算法复杂且受硬件架构的限制,加速效果不佳。随着计算机技术的发展,图形处理器(graphic processing unit, GPU)在材料科学领域得到广泛应用[16-17]。Sun 等[18]和 Sakane 等[19]使用 PF 模型,在热力学基础之上引入相场参量追踪界面,实现了枝晶生长的模拟,并使用 GPU 对其加速,取得了很好的效果。但是 PF 法的不足之处在于计算量巨大,可模拟的尺寸较小,无法对连铸过程大尺寸铸坯的组织结构进行预测。CA 模型是由空间离散的元胞及其邻居、元胞状态及演化规则构成的,实现方便且计算效率高,常被用于大尺寸铸坯组织的模拟[20-23]。然而 CA 不是由严格定义的物理方程和函数确定,计算结果容易失去真实性,但是其易于和各种物理过程耦合,合理定义演化规则即可避免失真。CA 模型在时间和空间上均离散且其转换规则被均匀同步地应用到元胞空间,非常适合 GPU 并行计算。基于 GPU 异构并行的 CA 模型已经应用于各个数据密集型计算领域[24-28]并且取得了显著的加速效果。

本文提出一种基于 GPU-CA 异构并行的方法,快速高效地实现大尺寸连铸坯的组织结构软测量。其中,设计了适用于 GPU 加速的并行算法来解决并行计算中存在的数据依赖以及数据竞争问题,优化数据并行度。并设计基于多流的任务调度方案,实现任务之间的并行。使用模型对某钢厂大型连铸机生产的钢种凝固组织结构进行预测,预测结果与低倍实验结果吻合良好。

1 数学模型

1.1 CA 模型原理

CA 模型基于晶粒形核和长大机制定义局部转换规则,使用随机的原则决定晶粒的位置以及取向,进而实现全局凝固组织演变过程的模拟。在凝固过程中,元胞依次经历 3 种状态,液态($f_s=0$)、界面态($0<f_s<1$)和固态($f_s=1$),其中 f_s 为固相分数。

初始时刻,元胞的状态均为液态。元胞获得形核条件后,通过形核模型(式(1))以及随机原则决定是否形核。

$$\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}(\Delta T)}=\frac{n_{\max}}{\sqrt{2\pi}}\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta T-\Delta T_N}{\Delta T_\sigma}\right)\right]^2 \tag{1}$$

式中:ΔT 为过冷度;ΔT_N 为平均形核过冷度;ΔT_σ 为标准曲率过冷;$n_{\max}$ 为最大形核密度。形核后的元胞沿着择优取向生长,枝晶尖端的生长速度由动力学生长模型[29](kurz giovanola trivedi, KGT)计算得到,如式(2)所示。

$$v=\alpha\Delta T^2+\beta\Delta T^3 \tag{2}$$

式中:α 和 β 为生长系数。

本文选用 Moore 邻居类型[30],每个元胞有 8 个邻居。当一个液相胞被固相邻胞捕获,它将会继承该固相胞的生长属性。

温度和溶质浓度是控制凝固组织演变的主导因素。凝固过程传热控制方程如下:

$$\rho c_p\frac{\partial T}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial y}\right)+Q \tag{3}$$

式中:ρ 为钢水密度;c_p 为等价比热;λ 为传热系数;Q 为内热源。

固液界面处溶质分配遵守局部溶质平衡原理,如下:

$$C_s=kC_l \tag{4}$$

式中:C_s、C_l 分别为固相溶质浓度和液相溶质浓度;k 为平衡溶质分配系数,本文仅考虑 $k<1$ 的情况。固相分数每增加 $\mathrm{d}f_s$,会有 $\mathrm{d}C=C_l(1-k)\mathrm{d}f_s$ 的溶质排放到当前元胞以及邻胞的剩余液相中。

溶质再分配打破界面处的溶质平衡,形成扩散。固相扩散系数非常小,忽略不计,溶质扩散方程如下:

$$\frac{\partial C_l}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial C_l}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(D\frac{\partial C_l}{\partial y}\right)+C_l(1-k)\frac{\partial f_s}{\partial t} \tag{5}$$

式中:D 为溶质扩散系数。

1.2 计算量分析

模型算法复杂度和元胞数量是决定计算量的主要因素。元胞状态的转换受温度场、溶质场以及凝固场耦合作用的影响。其中,温度场的计算包括边界条件和物性参数(液相线温度、固相线温度和传热系数等);溶质场包括全局溶质的扩散以及界面前沿排出的多余溶质的去向;凝固场涉及形核概率、生长速度以及固相分数等的计算。3 场之间的耦合非常复杂,在一个时间步,单个元胞要计算超过 20 个方程。

另一方面,为了确保模型计算的精度,元胞尺寸划分在 μm 级别。本文使用切片[31]的思想,通过跟踪一个切片在整个连铸过程的元胞状态演变,实现组织结构预测,

dt 为时间步长。以横截面 320 mm×480 mm 的大尺寸铸坯为例,由于铸坯属性具有四折对称特性,对 1/4 切片区域 160 mm×240 mm 进行计算。在冶金长度为 26.4 m、拉坯速度为 0.48 m/min 的情况下, dt 取 0.002 s 可以保证模型计算的稳定性。此时,需要计算 1.65×10^6 个切片。如果切片被划分为 1 600×2 400 个元胞,使用 CPU 就需要串行计算大约 6.3×10^{12} 个方程,计算耗时很长。因此,对软测量模型加速至关重要。

2　基于 GPU-CA 异构并行的软测量模型设计与实现

GPU 是一种众核架构,内部集成了大量轻量级内核来处理数据并行性任务,非常适用于数据密集型任务的求解。

2.1　GPU-CA 并行软测量模型架构

为解决传统软测量方法获取铸坯凝固组织结构效率低下的问题,本文利用 GPU 异构并行,对 CA 模型进行加速,建立了基于 GPU-CA 异构并行的软测量模型,实现凝固组织结构的快速测量。本文设计的软测量模型架构如图 1 所示,该模型将钢种成分、过热度、拉速以及二冷各段水量作为模型的输入,通过温度场、溶质场以及凝固场之间的耦合建立输入变量与凝固组织结构之间的关系,进而计算得到凝固组织结构。

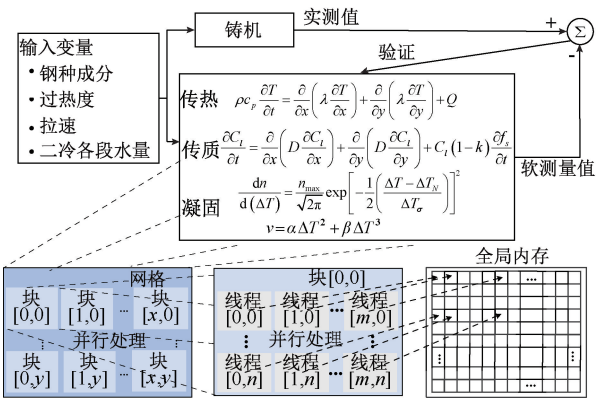


图 1　GPU-CA 软测量架构示意图

Fig. 1　GPU-CA based soft measurement architecture diagram

模型的计算周期始于弯月面,终于拉矫机,通过计算不同位置处切片上的传热、传质以及凝固,更新二维切片的状态参数,实现连铸凝固组织结构软测量。传统 CPU 串行计算架构使用 3 层嵌套循环遍历所有切片上元胞的计算。嵌套循环是影响 CPU 计算效率的常见瓶颈,一个严格的串行计算需要按顺序进行。而在 GPU 并行计算架构中,每个线程负责一个或者一组元胞,大量线程同时进行独立元胞的相关计算,如图 1 所示。本文研究 CPU 负责分配内存、初始化以及核函数的调度,GPU 负责传热、传质与凝固的耦合计算。CPU 启动核函数后,GPU 端会启动大量线程以单指令多线程(single instruction multiple thread, SIMT)的形式并发处理自己的私有数据。

使用 GPU 实现应用程序加速的关键在于异构并行算法的设计。如果将串行算法直接应用到并行计算程序中会因数据之间存在相互依赖的关系,而使程序的并发度为 1。这种情况下,相当于使用 GPU 进行串行运算,无法实现加速效果。而当串行算法在并发执行中存在数据竞争问题时也将会带来不可预测的错误。另外,任务在计算机统一设备架构(compute unified device architecture, CUDA)默认流中以串行顺序方式调度,使独立的任务之间产生不必要的等待。因此,正确高效使用 GPU 加速,关键在于设计适用于并行架构的算法。并且设计多流任务调度方案提高任务之间的并发度,来进一步提高计算效率。

本文使用的 GPU 拥有 56 个流处理器(streaming multiprocessor, SM)单元,每个 SM 有 64 个计算核,共有 3 360 个核,可以支持上千线程并发执行。并行结构包括 3 个层次,线程是最小的执行单元,一组线程构成一个线程块,一个或多个线程块构成一个网格,线程块之间相互独立。在启动核函数的时候进行线程块的配置,线程块的大小也会影响计算的效率,要通过反复的数值实验寻找最优的块配置。

2.2　异构并行算法设计

提高并行度的关键在于优化元胞之间的数据依赖以及竞争关系。

1)数据依赖

微分方程式(3)和(5)的离散方式直接决定着元胞之间的数据依赖程度。显式离散格式离散后的结果如下:

$$a_P\varphi_P^n = a_W\varphi_W^n + a_E\varphi_E^n + a_S\varphi_S^n + a_N\varphi_N^n \tag{6}$$

式中:φ 代表温度或溶质浓度;n 代表当前切片。虽然其有无条件收敛和稳定的优点,但是同一切片上的元胞和邻居之间相互迭代,并行度 $N=1$,无法实现加速。

因此,本文选用隐式格式离散,离散结果如下:

$$a_P\varphi_P^n = a_W\varphi_W^{n_0} + a_E\varphi_E^{n_0} + a_S\varphi_S^{n_0} + a_N\varphi_N^{n_0} + a_P^0\varphi_P^{n_0} \tag{7}$$

式中:n_0 表示前一个切片。一个元胞的值由前一个切片上邻居以及自身的值计算得到,同一切片上的元胞之间相互独立,没有数据依赖,在不考虑其他因素的情况下,并行度 $N=mnx\times mny$,mnx 和 mny 分别代表切片水平和竖直方向上元胞的数量。

但是,隐式离散格式需要对计算步长加以限制才能保证计算的收敛性和稳定性。温度和溶质传输方程的限

制条件如下：

$$\Delta t < \rho c \frac{\Delta x \Delta y}{2\lambda} \tag{8}$$

$$\delta t < \min\left\{\frac{\delta x}{v_{\max}}, \frac{\delta x^2}{4D}\right\} \tag{9}$$

由于溶质扩散系数比热扩散系数小 2~3 个数量级，温度场的时间步长更加受网格尺寸的制 约。为了减少计算量，本文采用宏微观耦合的方式，使用粗网格计算温度场，然后通过插值的方式计算微观元胞的温度。其中，Δx 为宏观计算单元尺寸，δx 为微观元胞单元尺寸。

2）数据竞争

串行算法直接应用到并行算法中可能会出现写数据竞争问题，产生未定义的计算错误。界面胞溶质再分配过程中，元胞生长排出的多余溶质按照比例分配到液相邻胞和自身当中。这种算法在串行计算的过程中不会出现错误。但是在并行计算中，当有多个元胞向同一个元胞中排溶质时，会出现多个线程同时向一个全局内存地址写数据的问题（写数据竞争），如图 2 所示。可以通过加锁的方式来避免数据竞争现象，其原理是让所有访问该地址的元胞串行执行，依次完成写数据操作。显然，这种方式会降低算法的并行度。

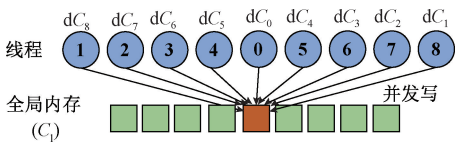


图 2 数据竞争

Fig. 2 Data race

为了在不影响并行度的情况下避免数据竞争，本文提出一种高效的并行算法，从根源上避免多个元胞向同一个元胞排溶质的现象。并行溶质再分配算法如图 3 所示，该算法将一个元胞向其邻胞排放溶质的主动行为改为一个元胞被动地接收邻胞排的多余溶质的被动行为。该算法通过 3 个步骤实现溶质再分配。

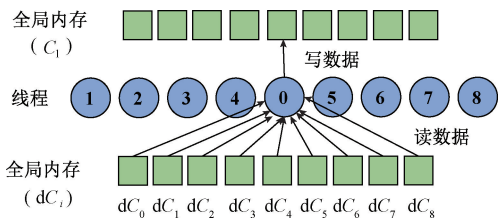


图 3 并行溶质再分配算法示意图

Fig. 3 Diagram of the parallel solute redistribution algorithm

1）存储数据，计算当前切片界面胞生长排出的多余溶质向各个元胞的分配量，将其存储在相应变量中。

2）读数据，下一切片中的所有液相和界面元胞读取存储在各元胞中向当前元胞释放的溶质量。

3）写数据，将读取到的数据做处理，去改变当前元胞的溶质浓度。

使用本文提出的算法，所有线程之间无数据依赖和竞争现象，其并行度为 $mnx \times mny$。

2.3 任务调度方案设计

本文将软测量模型分为 13 个子任务，每个任务由相应的核函数负责执行，如表 1 所示。连铸凝固计算中，有些过程是相互独立的，它们之间可以并发进行。但是，CUDA 平台默认将所有操作放到一个空流（CUDA 流表示一个 GPU 操作序列）中按指定的顺序执行，后一个任务必须等前一个任务完成才能开始，即使相互独立的任务也无法并发执行。而不同流中的操作可以并发执行，其关键在于处理好不同流以及同一流中核函数之间的数据依赖，在同一个流中，被依赖的核函数要先执行，而不同流中，依赖的核函数执行之前要在其与被依赖函数之间调用同步函数，等待操作完成。

表 1 软测量模型子任务分配

Table 1 Subtask assignment in the soft sensor model

函数名	计算任务
get_b	边界条件
Thermal_pro	物性参数
get_T	宏观温度
get_mT	微观温度
cal_dT	过冷度
cal_Cur	界面曲率
nucleation	形核
growth	生长
soliden	捕获
Solute_Redi	溶质再分配存储
SoluteAdd	改变溶质含量
calD	溶质扩散系数
Solute_Dif	溶质扩散

为提高核函数之间的并发度，本文根据这些函数之间的独立和依赖关系将它们放入两个流中调度，从而提高任务执行的效率。核函数调度方案如图 4 所示，*get_b* 和 *Thermal_pro* 互相独立，在不同的流中执行，将计算传给 *get_T*。由于 *Thermal_pro* 在不同的流中，需要调用同步函数，等待其执行完毕再调 *get_T* 函数进行计算，结果进行插值得到元胞的温度。根据元胞温度得到过冷度，再依次计算其形核、生长以生长带来的溶质再分配。Stream[1]中界面曲率、捕获以及液相溶质的改变都是使

用上一切片的数据计算,与 Stream[0]中的计算没有依赖关系,可以和它们并发执行。溶质分配系数则需要根据 Stream[0]中计算的元胞温度进行计算,需要使用同步函数。

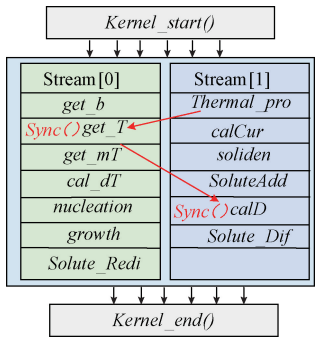


图 4　核函数调度示意图

Fig. 4　Diagram of scheduling kernel function

2.4　并行算法的实现

使用 CUDA C 语言完成凝固组织软测量应用程序的开发,实现并行算法,编程实现流程如下。

1)主机分配内存并将初始化的数据从 CPU 传输到 GPU,启动核函数。

2)温度场相关核函数负责计算元胞的温度以及过冷度,并将过冷度传递给凝固场。

3)凝固场接收到来自温度场的数据,计算形核概率、生长速度以及元胞状态的转变。

4)凝固场将元胞生长引起的固相分率改变传送到溶质场,使其完成溶质场的相关计算。

核函数按照上述流程进行调度,计算完成后使用 Backup 核函数对数据进行备份,供下一个切片计算使用。如此循环,直到凝固结束。

3　预测结果分析

使用本文提出的软测量模型对某钢厂大型连铸机生产的钢种的组织结构进行预测,其铸机断面尺寸为 320 mm×480 mm,冶金长度为 26.4 m。测试钢种的主要成分如表 2 所示。

表 2　钢种主要成分组成

Table 2　Components of different steels

钢种	C	Si	Mn	P	S
S20C-Ti	0.213	0.231	0.425	0.010 8	0.006 9
1E1287	0.332	0.294	1.139	0.012 3	0.020 2

为减少计算量,根据铸坯属性的四折对称性,选取 1/4(160 mm×240 mm)作为计算区域,划分为 1 600×2 400 计算单元,尺寸为 100 μm。

3.1　准确性验证

组织结构软测量是基于温度场计算的,因此首先对铸坯凝固温度场准确性进行验证。图 5 所示为 S20C-Ti 钢在连铸过程的温度变化情况,将使用测温枪测量距离弯月面不同位置铸坯内弧表面中心处的温度作为参照,对模型预测的温度进行验证。

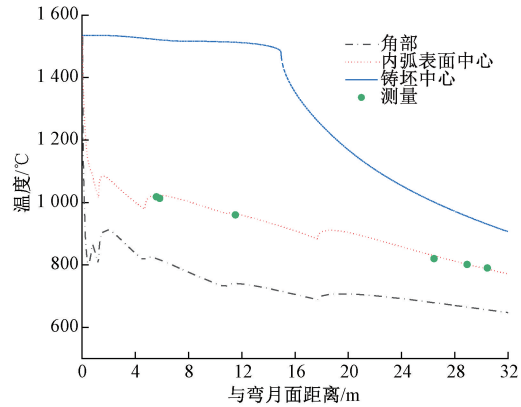


图 5　温度分布曲线

Fig. 5　Temperature distribution curves

其中曲线为软测量模型结果,点为测温枪在现场测得的铸坯内弧表面中心的温度。角部和内弧表面中心的预测温度在转换冷却区域的地方伴有明显的回温现象,这是边界条件不同引起边界热流密度差异导致的。对比预测值与测量值可见,模型预测结果与现场实测值几乎相同,最大相对误差为 1.37%。

图 6 所示为 S20C-Ti 铸坯内弧表面中心处 20 mm 宽的组织结构演变过程示意图。

图 6　组织结构演变过程

Fig. 6　Evolution process of structure

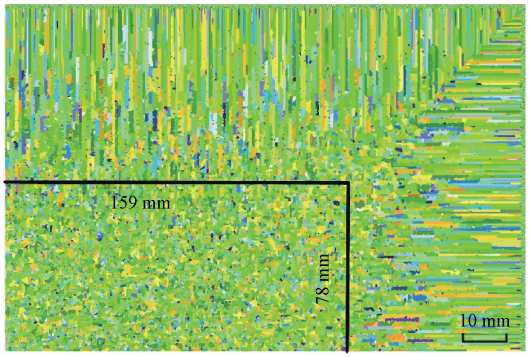
在凝固刚开始时大量晶核在靠近模壁处形核形成表面细等轴晶。然后,它们竞争生长,生长方向接近热流方向的占优势,生长成为柱状晶。柱状晶生长一段时间后,剩余液体温度均下降到熔点温度以下,大量晶核形成。此时散热没有方向性,晶核以等轴晶的方式生长,直至凝固结束。预测结果与金属凝固原理[32]描述一致。可以看出,组织结构主要由柱状晶和中心等轴晶组成,表面细等轴晶占比非常小。选用中心等轴晶的比例作为模型准

确性评判的依据,计算方法如下:

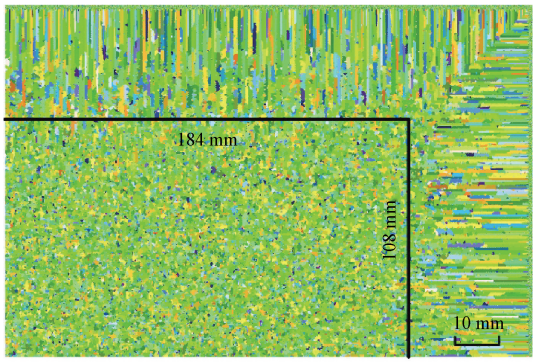
$$\text{等轴晶比例} = \frac{\text{等轴晶区面积}}{\text{铸坯总面积}} \times 100\%$$

根据晶粒长轴与短轴的比例 α 确定晶区,当 $\alpha>0.6$ 时为等轴晶[33]。

图 7(a)和(b)所示为 S20C-Ti 和 1E1287 两钢种凝固组织结构的软测量结果及其晶区划分情况。



(a) S20C-Ti软测量结果
(a) Prediction result of S20C-Ti



(b) 1E1287软测量结果
(b) Prediction result of 1E1287

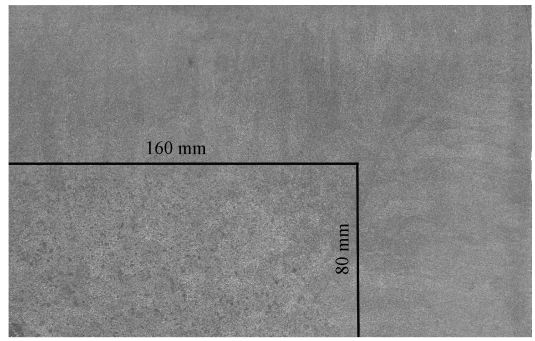
图 7 组织结构软测量结果

Fig. 7 Prediction result of structure

如图 7 所示,软测量模型计算结果不仅具有典型的柱状晶结构和等轴晶结构,而且可以看出柱状晶界面平直、但是生长具有方向性。因此对于合金而言,柱状晶发达容易导致热轧开裂的情况。而等轴晶的晶粒排列紧凑,搭接牢固,生长不存在方向性,不存在弱面,不易形成裂纹。所以,在大多数工艺生产中,都要求较高的等轴晶率。

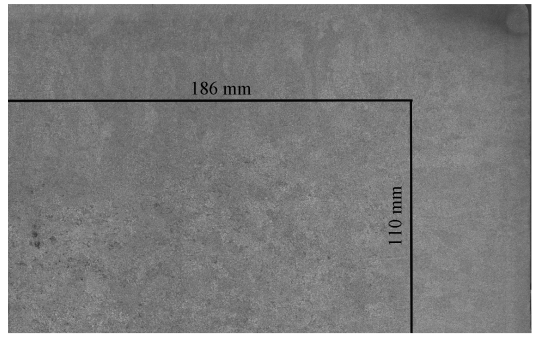
为验证预测结果,从钢厂采集相同工艺参数下生产的铸坯试样,在苦味酸与盐酸配比为 100∶1的酸蚀液中浸泡得到低倍组织如图 8 所示。

与软测量结果类似,图 8 中两种低倍组织图也具有典型的柱状晶区和等轴晶区结构。使用等轴晶比例计算公式可得图 7 和 8 所示两种钢种的等轴晶率,其中 S20C-Ti 钢的软测量计算结果为 32.3%,实测结果为 33.3%;1E1287 钢的软测量结果为 51.8%,实测结果为 53.3%。



黑色框为晶区分界 1,数字为相应尺寸

(a) S20C-Ti低倍图像
(a) Low power image of S20C-Ti



(b) 1E1287 低倍图像
(b) Low power inage of 1E1287

图 8 组织结构低倍图

Fig. 8 Low power image of structure

S20C-Ti 和 1E1287 两种钢软测量结果与实测等轴晶率误差分别为 1% 和 1.5%。使用本文提出的软测量模型可以实现连铸坯凝固组织结构的预测,且软测量结果与实测结果误差较小。

另外,为确保 GPU 加速的可靠性,采用 CPU 计算的温度作为参照。图 9 所示为 CPU 和 GPU 计算的 S20C-Ti 铸坯表面中心温度的拟合直线,可见整个计算过程 GPU 与 CPU 的结果完全吻合。

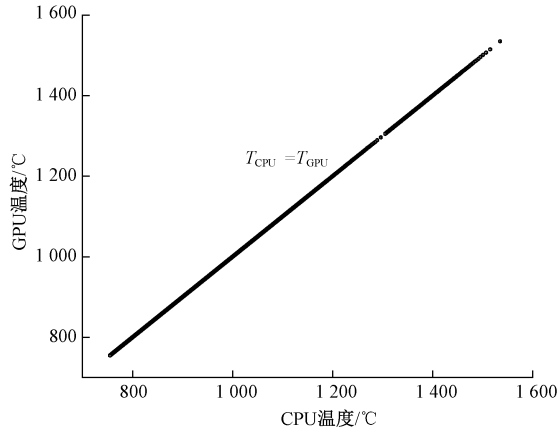


图 9 温度对比示意图

Fig. 9 Temperature comparison diagram

图 10 所示为连铸过程铸坯纵剖面温度云图,本文提出的基于 GPU-CA 异构并行的连铸坯凝固组织软测量模型可以实现使用 CPU 计算相同的精度。

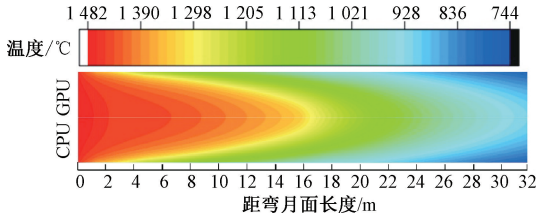


图 10　纵截面温度云图

Fig. 10　Temperature cloud map of longitudinal section

3.2　计算性能测试

不同线程块配置会影响硬件资源的利用情况,进而影响计算效率,需要多次实验寻求一个最佳配置。实验结果如表 3 所示,块大小配置为(64,2)时,计算时间最短,本文相关 GPU 计算均使用此配置。

表 3　块配置与计算效率

Table 3　Block configuration and computation efficiency

块配置	计算耗时/s
(16,4)	9.25
(16,8)	8.86
(16,16)	9.01
(32,2)	8.26
(32,4)	8.03
(32,8)	8.08
(64,1)	8.27
(64,2)	7.97
(64,4)	8.02

为了评估 GPU-CA 模型的性能,在 CPU 和 GPU 上做相同的实验。使用 GPU 并行算法实现 STC-Ti 凝固组织结构软测量的加速比高达 350,耗时 3 h。加速比定义为:

$$\text{加速比} = \frac{T_{\text{CPU}}}{T_{\text{GPU}}}$$

式中:T_{CPU} 为使用 CPU 计算耗时;T_{GPU} 为使用 GPU 计算耗时。图 11 所示为 CPU 和 GPU 计算不同网格数量时对应的计算时长以及 GPU 相对 CPU 的加速比,涉及的算例均计算 2 000 个切片。

如图 11 所示,与传统 CPU 串行计算相比,本文提出的异构并行软测量模型可以极大地提高软测量的速度。且在一定范围内,加速比随着网格数量的增加而增加,单个切片网格数量为 4 800×3 200 时加速比高达 530。这是因为随着计算规模不断地增大,GPU 的资源利用率在升高,且 CPU 与 GPU 之间交换数据所用的时间占总时长的比重下降。因此,使用本文设计的并行算法,能够很大程度地提高计算效率,且该模型适于解决计算网格数目庞大的凝固组织软测量问题。

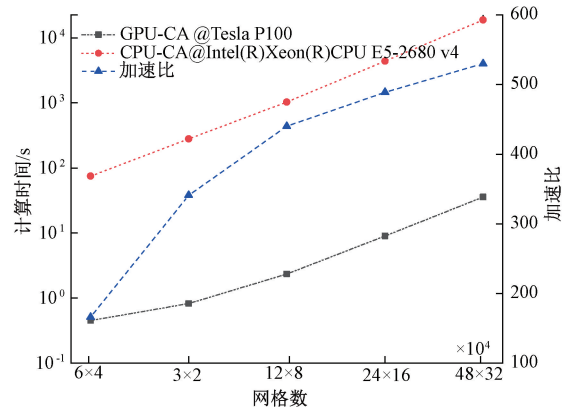


图 11　性能指标

Fig. 11　Performance metric

4　结　　论

本文提出了一种 GPU-CA 异构并行的铸坯凝固组织结构软测量模型,首先设计了并行算法和任务调度方案来提高数据和任务并发度,同时进行软测量实验并使用现场数据进行验证。实验结果表明,使用模型的软测量结果与现场数据吻合良好,其中 S20C-Ti 和 1E1287 铸坯的预测结果与低倍等轴晶率的相对误差分别为 1% 和 1.5%,预测温度与实测温度最高相对误差为 1.37%;以 STC-Ti 钢种 1/4 断面(240 mm×160 mm)为例,使用 GPU 算法和 CPU 算法进行相同的计算。计算区域划分为 2 400×1 600 网格时,与 CPU 串行计算相比,GPU 算法加速比高达数百倍,且随着计算量的增加加速比呈上升趋势。使用 GPU 异构并行算法可以极大地缩短铸坯凝固组织结构软测量模型的求解时间。

参考文献

[1] WU M W, TIAN B H, ZHANG ANG, et al. Phase-field lattice-Boltzmann study on dendritic growth of hcp metals under gravity-driven natural convection[J]. Rare

Metals, 2020, 39(2):147-155.

[2] MENG S X, ZHANG ANG, GUO Z P, et al. Phase-field-lattice Boltzmann simulation of dendrite motion using an immersed boundary method[J]. Computational Materials Science, 2020, 184:109784.

[3] TONKS M R, AAGESEN L K. The phase field method: Mesoscale simulation aiding material discovery[J]. Annual Review of Materials Research, 2019, 49(1): 79-102.

[4] LUO S, WANG W L, ZHU M Y. Cellular automaton modeling of dendritic growth of Fe-C binary alloy with thermosolutal convection[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2018, 116(1):940-950.

[5] WANG X Y, WANG F F, WU K Y, et al. Experimental study and cellular automaton simulation on solidification microstructure of Mg-Gd-Y-Zr alloy[J]. Rare Metals, 2021,40(1):128-136.

[6] CHENG G, RIDGEWAY C D, CINKILIC E, et al. Predicting gas and shrinkage porosity in solidification microstructure: A coupled three-dimensional cellular automaton model[J]. Journal of Materials Science & Technology, 2020, 49(14):91-105.

[7] OGAWA J, NATSUME Y. Cellular automaton modelling to predict multi-phase solidification microstructures for Fe-C peritectic alloys[J]. IOP Conference Series Materials Science and Engineering, 2020, 861:012059.

[8] WEI J J, WANG X D, YAO M. Field variable diffusion cellular automaton model for dendritic growth with multifold symmetry for the solidification of alloys[J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2021, 29(7):075005.

[9] OSHER S, FEDKIW R P. Level set methods: An overview and some recent results[J]. Journal of Computational Physics,2001,169(2):463-502.

[10] ZHAO P, HEINRICH J C. Front-tracking finite element method for dendritic solidification[J]. Journal of Computational Physics, 2001, 173(2):765-796.

[11] 潘立登, 李大字, 马俊英. 软测量技术原理与应用[M]. 北京:中国电力出版社, 2009.
PAN L D, LI D Z, MA J Y. The principles and applications of soft-measurement[M]. Beijing: China Electric Power Press, 2009.

[12] 赵彦涛,单泽宇,杨黎明, 等. 基于互信息和约减LSSVM的水泥生料细度软测量[J]. 电子测量与仪器学报,2019,33(12):173-182.
ZHAO Y T, SHAN Z Y, YANG L M, et al. Soft sensor modeling of cement raw material fineness based on mutual information and reduced LSSVM[J]. Journal of Electronic Measurement and Instrumentation, 2019, 33(12):173-182.

[13] 付华,赵俊程,付昱, 等. 基于量子粒子群与深度学习的煤矿瓦斯涌出量软测量[J]. 仪器仪表学报,2021, 42(4):160-168.
FU H, ZHAO J CH, FU Y, et al. Soft measurement of coal mine gas emission based on quantum-behaved particle swarm optimization and deep learning[J]. Chinese Journal of Scientific Instrument, 2021,42(4): 160-168.

[14] WEI L, LIN X, WANG M, et,al. Orientation selection of equiaxed dendritic growth by three-dimensional cellular automaton model[J]. Physica B: Physics of Condensed Matter, 2012, 407(13): 2471-2475.

[15] 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.

[16] HUANG J W, CAI Y, ZHONG Z Y, et al. ACAT: A GPU-accelerated parallel code for constructing ultralarge atomic configurations with arbitrary texture[J]. Computational Materials Science, 2021, 186:109997.

[17] LU J, GAO S, XIONG W, et al. Optimization of GPU parallel scheme for simulating ultrafast magnetization dynamics model[J]. Computational Materials Science, 2020, 184:109924.

[18] SUN W, YAN R, ZHANG Y, et al. GPU-accelerated three-dimensional large-scale simulation of dendrite growth for Ti6Al4V alloy based on multi-component phase-field model[J]. Computational Materials Science, 2019, 160:149-158.

[19] SAKANE S, TAKAKI T, AOKI T. Parallel-GPU-accelerated adaptive mesh refinement for three-dimensional phase-field simulation of dendritic growth during solidification of binary alloy[J]. Materials Theory, 2022, DOI: https://doi.org/10.1186/s41313-

021-00033-5.

[20] 徐东, 朱苗勇, 祭程,等. SCM435 钢大方坯凝固过程组织的模拟[J]. 材料科学与工艺, 2012, 20(6):121-125.
XU D, ZHU M Y, JI CH,et al. Simulation on solidified microstructure of cast bloom of SCM435 steel [J]. Material Science & Technology, 2012, 20(6):121-125.

[21] 李翔, 白雪松, 孙彦辉. 轴承钢大方坯凝固组织模拟[J]. 工业加热, 2021, 50(2):27-31.
LI X, BAI X S, SUN Y H. Simulation of solidification structure of being steel bloom[J]. Industrial Heating, 2021, 50(2):27-31.

[22] 邬浩天,孙彦辉,李曜光,等. E36 船板钢板坯凝固组织模拟研究和应用[J]. 特殊钢,2021,42(3):7-11.
WU H T, SUN Y H,LI Y G, et,al. Simulation study and application on solidification structure of E36 steel ship slab[J]. Special Steel, 2021,42(3):7-11.

[23] 温巨文, 朱立光, 张元杰,等. 基于 CAFE 法对连铸坯凝固组织模拟及影响因素研究[J]. 铸造技术, 2017, 38(11):2683-2686.
WEN J W, ZHU L G, ZHANG Y J,et al. Solidification microstructure simulation and influencing factors of continuous casting billets based on CAFE method[J]. Foundry Technology, 2017, 38(11):2683-2686.

[24] KABIRIRAD S, FAZLALI M, ESLAMI Z. High-speed GPU implementation of a secret sharing scheme based on cellular automata[J]. The Journal of Supercomputing, 2019, 75(11):7314-7336.

[25] GERAKAKIS I, GAVRIILIDIS P, DOURVAS NI, et al. Accelerating fuzzy cellular automata for modeling crowd dynamics[J]. Journal of Computational Science, 2019, 32(3):125-140.

[26] D'AUTILIA R, ANDRIANAIVO L N, TROIANI A. Parallel simulation of two-dimensional ising models using probabilistic cellular automata[J]. Journal of Statistical Physics, 2021, 184(1):1-22.

[27] NTINAS V G, MOUTAFIS B E, TRUNFIO G A, et al. Parallel fuzzy cellular automata for data-driven simulation of wildfire spreading [J]. Journal of Computational Science, 2017, 21(7):469-485.

[28] GERAKAKIS I, GAVRIILIDIS P, DOURVAS N I, et al. Accelerating fuzzy cellular automata for modeling crowd dynamics[J]. Journal of Computational Science, 2019, 32(MAR.):125-140.

[29] ZHU M F, HONG C P. A modified cellular automaton model for the simulation of dendritic growth in solidification of alloys [J]. ISIJ International, 2001, 41(3): 436-445.

[30] 赵九洲, 李璐, 张显飞. 合金凝固过程元胞自动机模型及模拟方法的发展[J]. 金属学报, 2014, 50(6):641-651.
ZHAO J ZH, LI L, ZHANG X F. Development of cellular automaton models and simulation methods for solidification of alloys [J]. Acta Metallurgica Sinica, 2014, 50(6):641-651.

[31] YANG J, XIE Z, JI Z P, et al. Real-time heat transfer model based on variable non-uniform grid for dynamic control of continuous casting billets [J]. Isij International, 2014, 54(2):328-335.

[32] KURZ W, FISHER D J. Fundamentals of solidification[M]. Trans Tech Publications Inc., 1992.

[33] BISCUOLA V B, MARTORANO M A. Mechanical blocking mechanism for the columnar to equiaxed transition[J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 2008, 39(12):2885-2895.

作者简介

汪静静,2017 年于山东科技大学获得学士学位,2019 年于东北大学获得硕士学位,现为东北大学博士研究生,主要研究方向为连铸坯凝固组织模拟和基于 GPU 的高性能计算。

E-mail: neuwangjing@163.com

Wang Jingjing received her B.Sc. degree from Shandong University of Science and Technology in 2017, and M.Sc. degree from Northeastern University in 2019. She is currently a Ph.D. candidate at Northeastern University. Her main research interests include simulation of solidification structure of billet during continuous casting and high-performance parallel computing based on GPU.

孟红记(通信作者),1994 年于鞍山钢铁学院获得学士学位,1997 年于东北大学获得硕士学位,2008 年于东北大学获得博士学位,现为东北大学副教授,主要研究方向为基于人工智能的图像生成技术和 CPU+GPU

异构并行的高性能计算研究。

E-mail：menghongji@ise.neu.edu.cn

Meng Hongji（Corresponding author）received her B. Sc. degree from Anshan Iron and Steel College in 1994, M. Sc. degree from Northeastern University in 1997, and Ph. D. degree from Northeastern University in 2008. She is currently an associate professor at Northeastern University. Her main research interests include image generation technology based on AI and high-performance parallel computing based on CPU + GPU heterogeneity.

阳剑，2008 年于东北大学获得学士学位，2010 年于东北大学获得硕士学位，2015 年于东北大学获得博士学位，现为东北大学讲师，主要研究方向为连铸过程智能。

E-mail：neuyangjian@163.com

Yang Jian received his B. Sc. degree from Northeastern University in 2008, M. Sc. degree from Northeastern University in 2010, and Ph. D. degree from Northeastern University in 2015. He is currently a lecturer at Northeastern University. His main research interests include intelligent optimization control of continuous casting process.

谢植，1982 年于北方交通大学获得学士学位，1984 年于东北大学获得硕士学位，1992 年于东北大学获得博士学位，现为东北大学教授，主要研究方向为流程工业生产过程复杂参数检测、动态建模与优化控制、工业生产过程信息深度感知。

E-mail：xiezhi@ise.neu.edu.cn

Xie Zhi received his B. Sc. degree from Northern Jiaotong University in 1982, M. Sc. degree from Northeastern University in 1984, and Ph. D. degree from Northeastern University in 1992. He is currently a processor at Northeastern University. His main research interests include complex parameter detection, dynamic modeling and optimal control in the process of process industry and depth perception of information in industrial production process.