文章编号：1673-5196(2018)06-0024-06

Multi-GPU 加速的二元合金定向凝固三维相场模型

朱昶胜[1,2]，徐 升[1]，冯 力[2]，李 浩[1]

(1. 兰州理工大学 计算机与通信学院，甘肃 兰州 730050；2. 兰州理工大学 省部共建有色金属先进加工与再利用国家重点实验室，甘肃 兰州 730050)

摘要：基于三维相场模型，使用 MPI+CUDA 异构协同并行技术，在 GPU 集群上建立三维合金定向凝固的 Multi-GPU 计算模型，实现了 Al-Cu 二元合金三维定向凝固的模拟.再现了 Al-Cu 二元合金三维定向凝固的过程，以及不同取向晶粒间的竞争生长现象.通过与传统 CPU 串行计算模型相比较，验证了 Multi-GPU 计算模型的计算效率和加速效果.实现了二元合金定向凝固的加速模拟计算，其加速比最大可达 57.7.

关键词：Multi-GPU；MPI+CUDA；定向凝固；相场法

中图分类号：TG248；TG244 **文献标志码**：A

Multi-GPU accelerated three-dimensional phase-field model of binary alloy directional solidification

ZHU Chang-sheng[1,2], XU Sheng[1], FENG Li[2], LI Hao[1]

(1. College of Computer and Communication, Lanzhou Univ. of Tech., Lanzhou 730050, China; 2. State Key Laboratory of Advanced Processing and Recycling of Nonferrous Metals, Lanzhou Univ.of Tech., Lanzhou 730050, China)

Abstract: Based on three-dimensional phase-field model and using MPI + CUDA heteroideous collaborative parallel technique, a Multi-GPU calculation model for three-dimensional directional solidification process of alloys was established on GPU cluster and the simulation of three-dimensional directional solidification of Al-Cu binary alloy was realized. The process of three-dimensional directional solidification of Al-Cu binary alloy and the phenomenon of mutual competitive growth of grains with different orientations were reproduced. The calculation efficiency and acceleration effect of Multi-GPU calculation model were verified by means of comparing with traditional CPU serial computation model. The accelerated simulation calculation of directional solidification of binary alloy is realized, and its maximal acceleration ratio could amount to 57.7.

Key words: Multi-GPU; MPI+CUDA; directional solidification; phase field method

定向凝固技术可直接控制凝固过程中晶粒取向，使其沿特定的方向进行生长，消除了结晶过程中形成的横向晶界，大幅度提高了材料的纵向机械性能和使用温度，应用价值很高，研究定向凝固过程中的微观组织演化规律也极其重要.随着定向凝固理论的深入研究，定向凝固技术的应用前景越来越广阔，已成为材料科学技术领域的重要学科方向和非常活跃的技术领域.

相场法在处理微观组织演化方面具有其独特的优势，不需要追踪复杂界面，应用非常广泛，是微观组织模拟中的研究热点，属于材料科学的前沿领域[1-3].Robert 等[4]采用相场模型研究了二元合金定向凝固过程中的浅胞界面.Mathis Plapp[5]采用了依赖时间的三维相场模型，研究了六角胞晶族和共晶层状生长的形态稳定性，并通过改变各向异性系数研究了胞晶形貌的变化规律.Yeh 等[6]采用相场模型研究了二元合金定向凝固中驼峰的形成过程.

随着计算机技术的不断发展，多种高性能计算方法被应用在材料学相关邻域的模拟计算中.对于定向凝固的三维相场模拟来说，计算速率和计算规模始终是影响模拟效果的瓶颈.因此，探索拥有更快

收稿日期：2018-01-05
基金项目：国家自然科学基金(51661020，11504149，11364024)
作者简介：朱昶胜(1974-)，男，甘肃秦安人，教授，博导.

(C)1994-2021 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

的计算速率、更大模拟规模的高性能计算方法实现定向凝固的三维相场模型具有重要的意义. Shimokawabe[7]等在 TSUBAME 2.0 超级计算机上模拟了二元合金枝晶凝固演变过程. 朱昶胜等[8]利用单 GPU 对流动影响的枝晶生长进行了研究. Tomohiro 等[9]利用 GPU 超级计算机实现了大尺度的三维定向凝固模拟.

本文在 GPU 集群上结合 MPI，基于 CUDA 通用并行计算构架，使用 Multi-GPU 较大尺度地模拟了二元合金三维定向凝固过程，以缩短计算时间，提高计算效率，实现了对二元合金定向凝固三维相场模型的加速. 并通过模拟结果验证了 Multi-GPU 的加速性能及并行模拟结果的可靠性.

1　计算模型

1.1　二元合金相场模型

基于 Kim 等[10]提出的二元单相合金凝固相场模型（KKS 模型），三维相场控制方程为

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t}=M(\varepsilon(\theta)^2\nabla^2\varphi+\frac{\partial}{\partial x}\left(|\nabla\varphi|^2\varepsilon(\theta)\frac{\partial\varepsilon(\theta)}{\partial(\varphi_x)}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(|\nabla\varphi|^2\varepsilon(\theta)\frac{\partial\varepsilon(\theta)}{\partial(\varphi_y)}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(|\nabla\varphi|^2\varepsilon(\theta)\frac{\partial\varepsilon(\theta)}{\partial(\varphi_z)}\right)-f_\varphi \tag{1}$$

式中：φ 为相场序参量；t 为时间变量；M 为固相液面推进速率；$\varepsilon(\theta)$ 与界面能相关；f_φ 为自由能密度 f 对 φ 的一阶导.

枝晶固-液界面迁移方向的法向量被用作自变量来定义相场控制函数，其法向量为

$$\boldsymbol{n}=\nabla\varphi/|\nabla\varphi| \tag{2}$$

将式(2)代入式(1)中，分部积分后得到一个以枝晶固-液界面迁移方向法向量为自变量的相场控制方程：

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t}=M(\varepsilon(\theta)^2\nabla^2\varphi+(\varepsilon(\theta)\cdot\varepsilon''(\theta)+\varepsilon'(\theta)^2)\cdot(|\nabla\varphi|\nabla\boldsymbol{n})-f_\varphi) \tag{3}$$

其中：f_φ 表达式如下：

$$f_\varphi=\frac{RT}{V_m}h'(\varphi)\ln\frac{(1-c_s^e)(1-c_l)}{(1-c_l^e)(1-c_s)}+Wg'(\varphi) \tag{4}$$

式中：R 为气体常数；T 为温度；V_m 为摩尔体积；$h(\varphi)$为势函数；$g(\varphi)$为剩余自由能函数；c 为合金溶质浓度，下标 l，s 分别表示液相和固相，上标 e 表示平衡状态.

假设在结晶过程中，固相中的溶质浓度一定，且不发生扩散，液相中的溶质扩散速率较快，很快达到处处相同，且溶质再分布发生在固-液界面上，溶质控制方程为

$$\frac{\partial c}{\partial t}=\nabla\left(\frac{D(\varphi)}{f_{cc}}\nabla f_c\right) \tag{5}$$

式中：f_c 和 f_{cc} 分别表示自由能密度 f 对 c 的一阶、二阶偏导数；$D(\varphi)$为溶质的扩散率，其表达式如下：

$$D(\varphi)=h(\varphi)D_s+[1-h(\varphi)]D_l \tag{6}$$

此外，相应的相场参数 W 表达式为

$$W=6.6\sigma/\delta \tag{7}$$

其中：σ 为界面能；δ 为界面厚度.

1.2　界面能各向异性函数方程

在立方对称性体系中，界面能的各向异性用 θ 的变化来定义. θ 为[100]方向与(001)面法线方向的夹角，即 $\varepsilon=\varepsilon(\theta)$. 如图 1 所示（$a$ 为 $\theta=0$，b 为 $\theta=4/\pi$）：

在 Hoyt 等[11]提出的模型中，界面自由能各向异性被表示为枝晶固-液界面迁移方向法向量的级数函数：

$$\varepsilon(\boldsymbol{n})=(1-3\varepsilon_4)\times\left(1+\frac{4\varepsilon_4}{1-3\varepsilon_4}\frac{(\varphi_x)^4+(\varphi_y)^4+(\varphi_z)^4}{|\varphi|^4}\right) \tag{8}$$

式中：ε_4 为各向异性系数，夹角 θ 和 β 的定义如下：

$$\theta=\arccos\frac{\varphi_x}{\sqrt{(\varphi_x)^2+(\varphi_x)^2+(\varphi_x)^2}} \tag{9}$$

$$\beta=\arctan\frac{\varphi_y}{\varphi_z} \tag{10}$$

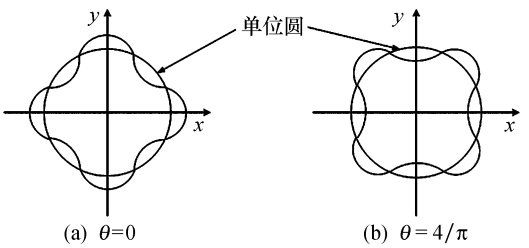


图 1　各向异性示意图

Fig.1　Sketch map of anisotropy

将式(9)和式(10)代入式(8)中可以得到以角度为自变量的各向异性函数的控制方程：

$$\varepsilon(\boldsymbol{n})=1-3\varepsilon_4+4\varepsilon_4(\sin^4\theta(\cos^4\beta+\sin^4\beta)+\cos^4\theta) \tag{11}$$

但是，使用这种方式定义所得各向异性函数和枝晶生长取向初始条件的变化会使得相场模型不能准确描述晶体生长过程中固-液界面的演化.

针对上述问题，Li Feng 等[12]提出了如下解决方法. 立方晶系中最优生长方向的晶向指数为〈100〉，这一组晶向指数恰好可以组成一个三维坐标系，枝晶生长界面迁移的法向方向和这个坐标系有

(C)1994-2021 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

3 个夹角，分别是：

$$\theta_1 = \arccos \frac{\varphi_x}{\sqrt{(\varphi_x)^2 + (\varphi_x)^2 + (\varphi_x)^2}} \quad (12)$$

$$\theta_2 = \arccos \frac{\varphi_y}{\sqrt{(\varphi_x)^2 + (\varphi_x)^2 + (\varphi_x)^2}} \quad (13)$$

$$\theta_3 = \arccos \frac{\varphi_z}{\sqrt{(\varphi_x)^2 + (\varphi_x)^2 + (\varphi_x)^2}} \quad (14)$$

式中：θ 和 $\theta_1, \theta_2, \theta_3$ 有唯一对应的关系，用这三个角所描述的 θ 来定义界面自由能各向异性函数，建立相场模型来解决以前的相场模型不能准确描述晶粒不同取向生长固-液界面演化的问题.

采用 $\theta_1, \theta_2, \theta_3$ 来定义界面自由能各向异性函数，可以得到界面能各向异性控制方程：

$$\varepsilon(\theta) = 1 - 3\varepsilon_4 + 4\varepsilon_4(\cos^4\theta_1 + \cos^4\theta_2 + \cos^4\theta_3) \quad (15)$$

要求 $\theta_1, \theta_2, \theta_3$ 要满足如下条件：

$$\cos^2\theta_1 + \cos^2\theta_2 + \cos^2\theta_3 = 1 \quad (16)$$

枝晶固-液界面迁移方向法向量 $\boldsymbol{n}$ 可以用 $\theta_1, \theta_2, \theta_3$ 表示：

$$\boldsymbol{n} = \cos\theta_1 \cdot i + \cos\theta_2 \cdot j + \cos\theta_3 \cdot k \quad (17)$$

使用方程(15～17)可控制晶粒的生长取向，当 $\theta_1, \theta_2, \theta_3$ 初始值发生改变时，晶粒生长取向也会随之改变.

2 初始条件及参数设置

以 Al-Cu 合金为研究对象，进行定向凝固的三维相场模拟，其中相关物性参数见表 1.

表 1 材料物性参数

Tab.1 Physical property parameters of material

物性参数	Al-Cu
界面能 $\sigma/(\mathrm{J \cdot m^{-1}})$	0.093
熔点温度 T_m/K	933.3
凝固潜热 $L/(\mathrm{kJ \cdot kg^{-1}})$	389.0
热导率 $k/(\mathrm{W \cdot (m \cdot k)^{-1}})$	192.6
平衡常数 k^e	0.14
液相溶质扩散系数 $D_l/(\mathrm{m^2 \cdot s^{-1}})$	3.0×10^{-9}
固相溶质扩散系数 $D_s/(\mathrm{m^2 \cdot s^{-1}})$	3.0×10^{-13}
液相线斜率 m^e	620

设模拟区域空间大小为 $N_x \times N_y \times N_z$，初始晶核的半径为 r_0.在直角坐标系 $O\text{-}xyz$ 上，x, y, z 分别对应空间坐标轴的 3 个方向量，其中胞晶向前生长是沿着 z 方向进行的，则：

$$\begin{cases} \varphi = 1, & T = T_m - \Delta T, \quad z^2 \leqslant r_0^2 \\ \varphi = 0, & T = T_m - \Delta T, \quad z^2 > r_0^2 \end{cases} \quad (18)$$

式中：T 为量纲温度；ΔT 为过冷度.在计算区域的边界上，采用 Zero-Neumann[13] 边界条件.使用的模拟计算参数值分别为 $\Delta x = 0.6\times10^{-8}$，$\Delta y = 0.6\times10^{-8}$，$\Delta z = 0.6\times10^{-8}$，$\Delta t = 1.5\times10^{-9}$，$\varepsilon_4 = 1.5\times10^{-9}$，$\delta = 4.5\Delta x/2$.

3 Multi-GPU 加速实现三维二元合金定向凝固

3.1 Multi-GPU 并行技术简介

近年来，基于 CPU+GPU 的混合异构计算系统开始逐渐成为国内外高性能计算领域的热点研究方向.在实际应用中，许多基于 CPU+GPU 的混合异构计算机系统表现出了良好的性能.本文使用 MPI+CUDA 混合粒度异构并行编程模式实现在 GPU 集群上的 Multi-GPU 高性能计算方法.

3.1.1 MPI 和 CUDA 并行概述

MPI(message passing interface)是一种基于信息传递的并行编程技术.它不是一门编程语，而是一个库，它使用 FORTRAN 或 C 结合 MPI 库，把原来串行编程语言扩展成为并行编程语言.MPI 库可以被 C、C++、FORTRAN77 和 Fortran90 调用，在语法上，它遵守所有对库函数和过程的调用规则，和一般的函数与过程没有区别.其次它是一种标准或规范的代表，而不是特指对它的具体实现.在本文中，所使用的 MPI 版本为 MPI2[14] 系列.

CUDA(compute unified device architecture)[15] 即统一计算架构，是由生产 GPU 的英伟达公司提出的 CPU+GPU 混合编程框架.CUDA C/C++语言有如下特点：1) SPMD 框架；2) 兼有分布式存储和共享内存的优点；3) 把握 GPU 的带宽是充分利用 GPU 计算资源的关键.一般，经过一定优化的 CUDA C/C++程序的计算速度相比于传统的 CPU 程序的计算速度要快几倍到几十倍.正因为如此，在目前深度学习领域，越来越多的科研工作者和工程师都开始利用 GPU 和 CUDA 来并行加速.

3.1.2 MPI+CUDA 异构协同并行技术

CPU+GPU 异构协同计算构架如图 2 所示，其可以划分成 3 个并行层次：节点间并行、节点内 CPU 与 GPU 异构并行、设备(CPU 或 GPU)内并行.根据这 3 个层次可以得到 MPI+CUDA 异构协同计算模式为：节点间分布式+节点内异构式+设备内共享式.

1) 节点间分布式

CPU+GPU 异构协同计算集群中，各个节点之间的连接与传统 CPU 集群一样，采用网络连接，因此，节点间采用了分布式的计算方式，采用 MPI 消息通信的并行编程语言.

(C)1994-2021 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

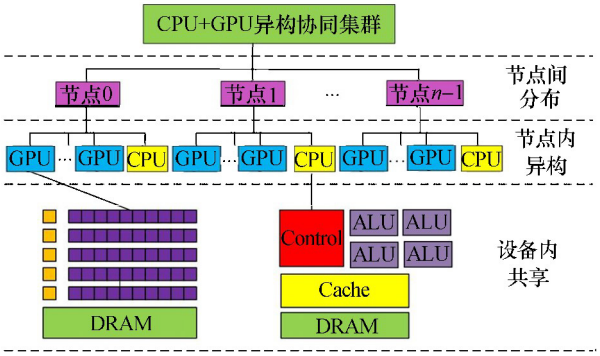


图 2　CPU+GPU 异构协同计算构架

Fig.2　CPU+GPU heterogeneous cooperative computation architecture

2）节点内异构式

CPU+GPU 异构协同计算集群中，每个节点上包含多核 CPU 和一块或多块 GPU 卡，节点内采用了异构的架构，采用主从式的编程模型，即每个 GPU 卡需要由 CPU 进程/线程调用.

由于每个节点上，CPU 核数也比较多，计算能力也很大，因此，在多数情况下，CPU 也会参与部分并行计算.由一个 CPU 进程/线程负责复杂逻辑和事务处理等串行计算，其他 CPU 进程/线程负责小部分并行计算，GPU 负责大部分并行计算.

在 CPU+GPU 共同计算模式下，把所有的 CPU 统称为一个设备(device)，每个 GPU 卡成为一个设备.根据这种划分方式，可以采用 MPI 进程节点内的各设备之间的通信和数据划分.

3）设备内共享式

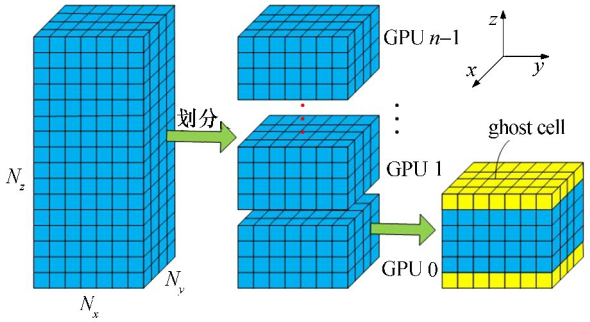
对于 CPU 设备，每个节点内的所有多核 CPU 采用了共享存储模型，因此，把节点内的所有多核 CPU 看作一个设备，可以采用 MPI 进程控制这些 CPU 核的并行计算.对于 GPU 设备，GPU 设备内有自己独立的 DRAM 存储，GPU 设备也是共享存储模型，在 GPU 上采用 CUDA 编程控制 GPU 众核的并行计算.

3.2　三维二元合金定向凝固的 Multi-GPU 实现

3.2.1　计算空间并行化划分

在模拟过程中，使用 CUDA CPU+GPU 混合编程框架，通过划分计算空间，使得每个 GPU 分别负责一个子区域的模拟计算.在大小为 $N_x \times N_y \times N_z$ 的计算空间上，由于使用的模拟规模大小 N_z 远大于 N_x 和 N_y，故沿 z 轴方向单一对整体模型进行分割，形成多个并行小模块，具体的划分方式如图 3 所示.

图 3a 为划分前的计算域，其大小为 $N_x \times N_y \times N_z$.计算空间中的每一个节点对应 GPU 中的一个线程.沿 z 轴将计算区域平均划分为 N 个子区域如图 3b 所示，每个子区域大小为 $N_x \times N_y \times N_z$.在实际模拟过程中，将每一个子区域分别交给一个 GPU 进行计算，每个 GPU 只需负责自己所分配的子区域的计算，这极大地提高了整个模型的计算效率.由于在实际模拟过程中每个子区域边界层计算需要其相邻子区域边界层值的参与，故在相邻 GPU 之间存在数据通信.为了便于数据通信，给每个区域在 z 轴方向上下各加一层大小为 $N_x \times N_y \times 1$ 的 ghost cell[15]（如图 3c 所示）用以实现 GPU 间的数据通信，故每个子区域大小变为 $N_x \times N_y \times (z+2)$.在实际模拟中，每个 GPU 中 $N_x \times N_y \times z$ 个线程用于计算，剩余的 $N_x \times N_y \times 2$ 个线程用于实现 GPU 间的数据通信.



(a) 划分前计算域　(b) z轴N个子区域　(c) z轴ghost cell

图 3　计算空间并行化划分

Fig.3　Parallelizing partition of computation space

3.2.2　GPU 边界交换

在合金的定向凝固数值计算过程中，每一个节点的计算都需要其相邻节点的值.当单个 GPU 计算沿 Z 轴边界的节点时，就需要使用其相邻 GPU 边界节点的值，此时相邻 GPU 之间的数据通信就十分重要.由于 GPU 之间不能直接进行数据交换，故使用 MPI 来实现相邻 GPU 间的数据通信.具体的 MPI 边界交换过程如图 4 所示.

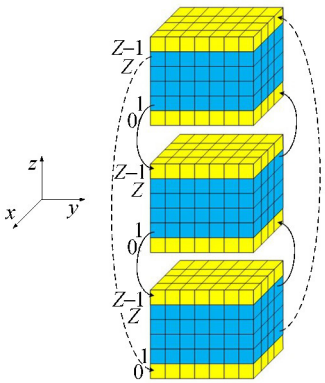


图 4　MPI 边界交换模型

Fig.4　MPI boundary exchange model

(C)1994-2021 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

图 4 以 3 个子区域为例，给每个子区域分配一个 MPI 进程，设沿 z 轴从下至上分别为进程 0～2. 由于在模拟计算过程中，边界点新值的计算需要相邻边界其他块的数据，因此在每个数据块上下各加一层数据空间，用于存放从相邻 MPI 通信得到的数据. 在具体的通信过程中，进程 1 的第 z 层将数据发送给进程 2 的第 0 层，第 1 层将数据发送给进程 0 的第 $z-1$ 层. 同时，进程 1 的第 0 层接收来自进程 0 的数据，第 $z-1$ 层接收来自进程 2 的数据. 对于进程 0 和 2，将进程 0 的第 1 层数据发送给进程 2 的第 $z-1$ 层，将进程 2 的第 z 层数据发送给进程 0 的第 0 层.

3.2.3　Multi-GPU 异构的设计实现

在 Multi-GPU 计算模型中，相邻 GPU 之间通过 MPI 进程连接，因此多个 GPU 在计算上是并发的. 在单个 GPU 上，计算区域上的多个线程通过 CUDA 编程并发执行，但边界区域的计算需要相邻 GPU 间的数据通信，故必须耗费一定的时间. 在一个时间步长上，单个 GPU 计算的时序划分如图 5 所示. GPU 完成一次对子区域的计算后，需要完成相邻 GPU 间的边界数据通信. 首先，将边界区域的值传送给 CPU(GPU to CPU)；然后通过 MPI 进程通信完成相邻子区域的数据交换；最后，再将交换完成的边界数据传回 GPU 中(CPU to GPU). 相邻 GPU 边界通信完成后，GPU 使用更新后的边界值以进行下一个时间步长的计算.

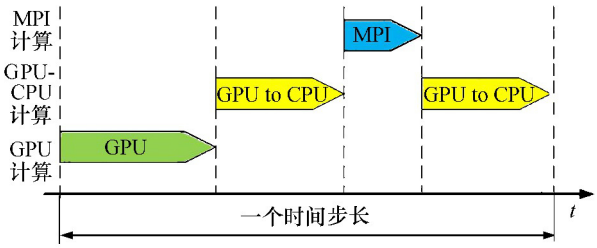


图 5　计算模型时序

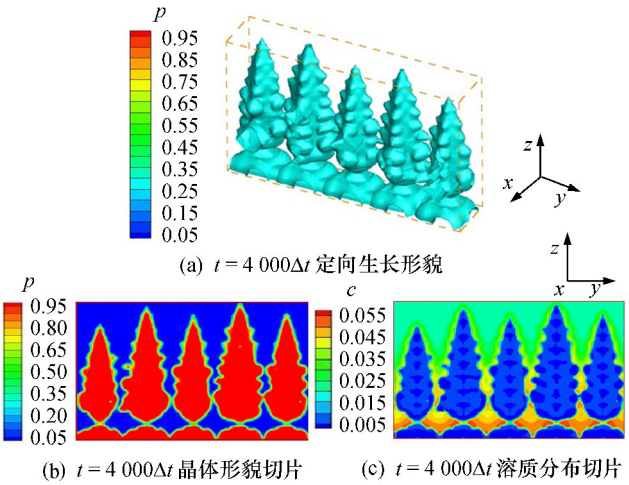
Fig.5　Time-series of calculation model

4　模拟结果及讨论

使用的 GPU 集群环境为：Linux OS，共 7 个物理节点，每个节点有 16 个核，每个物理节点有 3 个 Tesla M2090 型号 GPU.

4.1　Multi-GPU 并行模拟结果

图 6 为当温度取 905 K、各向异性系数为0.073，$t=4\ 000\Delta t$ 时的定向凝固结果图. 图 6a 为使用 Multi-GPU 计算模型模拟得到晶体定向生长形貌图；图 6b、c 分别为 6a 相应位置的晶体形貌切片图和溶质分布切片图. 同时用 Multi-GPU 并行实现了对不同取向合金晶粒生长的模拟. 通过使用 Multi-GPU 计算模型模拟得到的 Al-Cu 二元合金在凝固过程中不同取向晶粒的定向生长形貌如图 7 所示. 其中，图 7a 为 $t=5\ 000\Delta t$ 时刻的相场切面图，图 7b 为与之对应的溶质场切面图. 从图 7 可以明显看到不同取向的晶粒之间存在竞争生长[16]. 模拟过程中，设 A 枝晶的生长取向与热流方向一致，B 枝晶取向与热流方向有一个 15 ℃的夹角. 由于不同取向的晶粒之间存在竞争生长，A 枝晶明显高于 B 枝晶，这与冯力等[17]的研究模拟结果相一致.

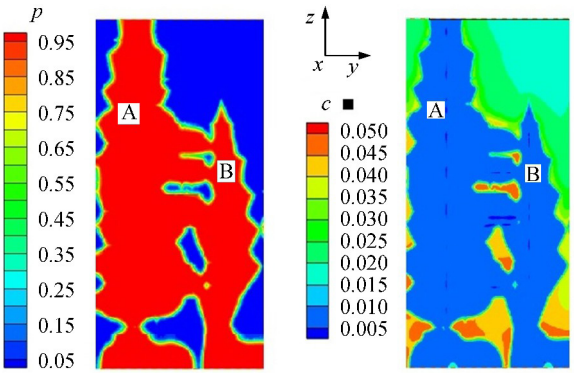


(a) $t=4\ 000\Delta t$ 定向生长形貌

(b) $t=4\ 000\Delta t$ 晶体形貌切片　(c) $t=4\ 000\Delta t$ 溶质分布切片

图 6　Multi-GPU 计算结果形貌图

Fig.6　Morphological map of Multi-GUP computation result



(a) 相场切面　(b) 溶质场切面

图 7　不同取向枝晶生长模拟结果

Fig.7　Simulation result of dendrite growth with different orientation

4.2　并行计算方法及性能优化

在 300×300×500 的模拟规模上，分别使用 CPU 串行计算方法和 Multi-GPU 计算模型对 Al-Cu 合金三维定向生长进行了模拟数值求解. 当模拟时间 $t=1\ 000\Delta t$ 时，不同计算模型的计算时间和加速比见表 2. 从表中可知，使用 Multi-GPU 计算模型模拟合金定向生长时，计算时间相较于 CPU 串行算法大幅减小，其最大可以得到 57.7 倍的加速比.

(C)1994-2021 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

从图 8 可以清晰地看出 Multi-GPU 计算模型的加速效果.Multi-GPU 计算模型的计算时间随着参与运算的 GPU 数量的增多而减少，加速比随着参与运算的 GPU 数量的增多而上升.故可得出，Multi-GPU 计算模型相较于 CPU 串行计算方法，在相同的模拟规模上，能够极大地提升对合金三维定向凝固的计算效率.随着 GPU 数量的不断增加，计算时间呈不断减少的趋势，加速性能不断提升，可以推测，当更多的 GPU 参与模拟计算时计算效率将会有进一步的提升.

表 2　Multi-GPU 模型计算时间

Tab.2　Calculation time of Multi-GPU model

节点数	计算时间/s	加速比
1	5 422	1
3	513	10.6
6	272	19.9
12	150	36.1
21	94	57.7

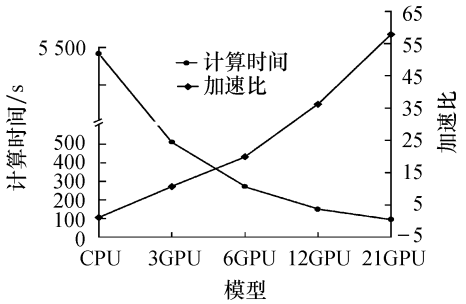


图 8　Multi-GPU 模型的计算时间及加速效果

Fig.8　Calculation time and acceleration effect of Multi-GPU model

5　结论

1）使用 MPI＋CUDA 异构协同并行技术，在 GPU 集群上，建立了 Multi-GPU 三维合金定向凝固过程的计算模型.2）使用建立的 Multi-GPU 计算模型，实现了对 Al-Cu 二元合金的三维合金定向凝固过程的模拟.再现了 Al-Cu 合金定向凝固的过程，并模拟了晶粒不同取向条件下的定向生长过程.3）通过与传统 CPU 串行算法的比较，Multi-GPU 并行计算模型拥有更为出色的计算效率.在相同的计算规模上，Multi-GPU 计算模型的加速性能随参与计算的 GPU 数量而增加.当使用 21 个 GPU 时，其加速比最大可达到 57.7.

参考文献：

[1]　黄春丽，常　辉，唐　斌，等.Ti-43Al 合金定向凝固的相场法模拟 [J].特种铸造及有色金属，2013，33(2)：119-123.

[2]　CHEN M，HU X D，JU D Y，*et al*.The microstructure prediction of magnesium alloy crystal growth in directional solidification [J].Computational Materials Science，2013，79(11)：684-690.

[3]　JONATHAN S，NIKOLAS P.Characterizing solute segregation and grain boundary energy in binary alloy phase field crystal models [J].Computational Materials Science，2014，81：493-502.

[4]　BI Z Q，ROBERT F S.Phase field modeling of shallow cells during directional solidification of a binary alloy [J].Journal of Crystal Growth，2002，237-239：138-143.

[5]　MATHIS P.Three-dimensional phase-field simulations of directional solidification [J].Journal of Crystal Growth，2007，303(1)：49-57.

[6]　YEH S Y，CHEN C C，LAN C W.Phase field modeling of morphological instability near grain boundary during directional solidification of a binary alloy：The hump formation [J].Journal of Crystal Growth，2011，324(1)：4296-303.

[7]　SHIMOKAWABE T，AOKI T，TAKAKI T，*et al*.Peta-scale phase-field simulation for dendritic solidification on the TSUBAME 2.0 Supercomputer [C].Washington：International Conference for High Performance Computing，2011.

[8]　ZHU C S，JIA J F，FENG L，*et al*.Research of three-dimensional dendritic growth using phase-field method based on GPU [J].Computational Materials Science，2014，91(2)：146-152.

[9]　KIM S，KIM W，SUZUKI T.Phase-field model for binary alloys [J].Physical Review E，1999，60(6)：7186-7197.

[10]　TOMOHIRO T，TAKASHI S，MUNEKAZU O，*et al*.Unexpected selection of growing dendrites by very-large-scale phase-field simulation [J].Journal of Crystal Growth，2013，382(6)：21-25.

[11]　HOYT J J，ASTA M，KARMA A.Method for computing the anisotropy of the solid-liquid interfacial free energy [J].Physical Review Letters，2001，86(24)：5530-5533.

[12]　FENG L，JIA J F，ZHU C S，*et al*.Research on phase-field model of tThree-dimensional dendritic growth for binary alloy [J].Journal of Computational & Theoretical Nanoscience，2015，12(11)：4289-4296.

[13]　TONG X，BECKERMANN C，KARMA A.Velocity and shape selection of dendritic crystals in a forced flow [J].Physical Review E，2000，61(1)：49-52.

[14]　刘　辉，胡　静，王振飞，等.MPIZ 中的并行 Z/O 的使用分析 [J].计算机工程，2003，29(2)：229-230.

[15]　GARLAND M，GRAND S L，NICKOLLS J，*et al*.Parallel computing experience with CUDA [J].Micro IEEE，2008(4)：13-27.

[16]　冯　力，胡海皇，朱昶胜，等.二元合金定向凝固的三维相场模拟 [J].兰州理工大学学报，2016，42(1)：11-16.

(C)1994-2021 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net