目录

[1 引 言 2](#_Toc482227633)

[1.1 课题背景 2](#_Toc482227634)

[1.2 研究意义 3](#_Toc482227635)

[1.3 论文组织结构 3](#_Toc482227636)

[2 相关研究和理论技术背景 5](#_Toc482227637)

[2.1 国内外相关研究 5](#_Toc482227638)

[2.1.1 分子动力学方法相关研究 5](#_Toc482227639)

[2.1.2 并行计算机的发展 5](#_Toc482227640)

[2.2 理论背景 5](#_Toc482227641)

[2.2.1 MD模拟基本思想 6](#_Toc482227642)

[2.2.2 空间分解 8](#_Toc482227643)

[2.3 技术背景 8](#_Toc482227644)

[2.3.1 并行计算 9](#_Toc482227645)

[2.3.2 MPI并行编程模型 9](#_Toc482227646)

[2.3.3 各种通信？？？ 11](#_Toc482227647)

[2.3.4 并行程序性能评价 11](#_Toc482227648)

[3 MD模拟空间分解并行化实现 13](#_Toc482227649)

[3.1 MD模拟过程分析 13](#_Toc482227650)

[3.1.1 原子信息存储 13](#_Toc482227651)

[3.1.2 计算相互作用力 14](#_Toc482227652)

[3.1.3 更新原子位置和速度 15](#_Toc482227653)

[3.2 MD模拟程序并行化 16](#_Toc482227654)

[4 MD模拟并行化通信策略研究 17](#_Toc482227655)

[5 实验结果分析 18](#_Toc482227656)

[6 结 论 19](#_Toc482227657)

1. 引 言
   1. 课题背景

[introduction\_to\_md\_标记]

自20世纪电子计算机出现以来，计算机模拟技术就被应用在各个专业的研究领域。计算机模拟指的是以数学模型为基础，通过计算机计算来研究某种特定系统的行为的一种方法。它已经成为计算物理、生物化学、工程领域和社会科学等多个专业领域的一种高效直观的研究方法。在各类研究过程中，实验总会消耗一定的时间和资源，由于这两个因素的限制，很多真实的实验往往很难得到实施，因此人们就提出利用计算机工作的高效性来对这些实验进行模拟。实践证明，计算机模拟已经对各科研领域做出了重大贡献。

分子模拟就是一种计算机模拟方法。分子模拟从分子体系的结构和分子间微观相互作用的角度来理解其性质，它是一种和传统实验截然不同的方法，可以说是传统实验方法的补充。目前主要的分子模拟方法有蒙特卡洛、分子力学和分子动力学方法等。其中，蒙特卡洛与分子动力学方法最为常见。蒙特卡洛方法在模拟一些晶格相对规则的物质上显得更为成功，而分子动力学则更多地用来模拟大量不规则运动的微观粒子。此外，虽然分子动力学可模拟的时间跨度较短，在真实的世界中，一些时间跨度大的过程如材料的老化等，就超越了分子动力学方法的能力，但是在描述的精确度上它比蒙特卡洛更加精确。在一些领域实际的科学研究中，有很多现象很难被直接观测到，这就给科研人员带来了诸多不便，从而间接地造成了某些科研的瓶颈。分子模拟技术使得科研人员能获取或者直接观测到微观世界中的粒子行为，既方便了科学研究，使不可能变为可能，也突破了时间、资源和经济因素方面上的限制。

分子动力学方法是一种分子模拟技术。它是一种通过数值模拟技术来模拟多粒子系统动态行为的方法，研究对象是分子或分子体系结构与性质。它的模型基础是经典力学模型，体系中粒子的运动可以看成是符合牛顿运动定律的，通过计算运动方程，得到体系中原子或分子各个时刻的位置和速度等微观运动状态，再利用某些积分统计计算，就不难获得模拟物质对象宏观上的特性。如今，MD方法已被用来研究生物、化学和材料领域的物质特性分析。以材料领域为例，从空间尺度的角度来看，材料性能的模拟可分级为原子、微观、介观和宏观。分子动力学就是一种在微观尺度上进行模拟的方法。

* 1. 研究意义

分子动力学（MD）模拟是计算模拟，必定带来一定的计算量。从空间角度和时间角度分别来分析其计算量：1）从空间角度来说，MD模拟是在原子或者分子的尺度上进行的。我们知道，在真实的世界中，即使是物质非常小的一部分，其中也包含了数以亿计的分子或者原子。所以说，MD方法的模拟对象的数量是极其庞大的，对计算性能就必然会有很高的需求。2）从时间角度来说，由于MD方法需要一定的精确性和稳定性，其整个模拟迭代过程所使用的步长通常在飞秒（即10-15秒）级，而它模拟的是真实世界中一些物质的变化，时间跨度通常比飞秒要大得多。因此，MD模拟过程的总迭代次数是非常巨大的。这就是导致MD模拟计算量需求大、成为一个典型的计算瓶颈问题的两点主要原因。可以看出，MD模拟方法对计算机的性能需求是无穷尽的，对于一些稍微复杂点的模拟体系，即使使用巨型计算机，也会消耗人们大量的时间。

为了提高计算性能，除了单方面提高计算机硬件的能力外，并行计算就是另一个值得深入研究的方向。并行计算将原任务拆分成一些子任务，并合理分配至各个处理器，各处理器同时地进行计算，再通过相互之间的协作与通信，共同形成一个有机的整体得到最终的计算结果。并行计算是突破单处理器计算性能限制的一个重要技术。另外，从并行的角度看，对它的研究主要是对计算节点协调、通信机制的研究，其发展也主要在这两个方面上体现出来。因此，对分子动力学方法的并行化研究及其通信机制的研究意义重大。

* 1. 论文组织结构

本论文共六章，整体提纲如下：

第一章主要阐述了本课题的背景、研究意义，研究内容？

第二章对分子动力学和并行计算的国内外研究现状进行了总结，同时对分子动力学的理论基础和并行计算的技术背景做了介绍。

第三章主要分析了MD模拟方法的并行化实现方法。

第四章针对MD模拟并行化程序的通信机制，研究了两种已有的通信策略，提出了将两种策略结合的方法，并在此基础上对其进行了改进，形成了一种新的通信策略。

第五章主要分析了实验结果，对前面的方法与策略进行了分析。

第六章是结论，是对本课题研究成果的总结。

1. 相关研究和理论技术背景
   1. 国内外相关研究
      1. 分子动力学方法相关研究

MD模拟方法是通过数值模拟技术来模拟多粒子系统动态行为的一种方法。它被广泛地用来研究固体、液体和气体物质的一些宏观特性。

Wainwright和Alder[]为了研究气液体在硬球模型下的状态方程，在1957年通过计算机模拟，分析了由一些刚性小球组成的分子体系的运动，因此成为了通过MD模拟方法来研究物体宏观特性的开创者。Lees[]等人在1972年将MD方法用在了速度存在变化的非平衡体系中。1980年，Andersen[]等人开创了恒压分子动力学方法，并对其进行了实验验证。Gillan[]等在1983年将MD方法用在了温度存在变化的非平衡体系中，与Lees等人提出的方法共同形成了非平衡体系下的分子动力学方法体系。1984年，Nose[]等人提出了恒温分子动力学方法，并对其进行了实验验证，与Andersen等人提出的方法相呼应。1985年，Hoover等人改进和优化了Nose提出的方法，提高了此方法的稳定性和可靠性。同样在1985年，Car[]等人针对金属和半导体，研究了它们的势函数，提出将电子论和分子动力学方法结合，开创了一种新方法，即第一原理分子动力学方法。1991年，Cagin[23]在提出了巨正则系综分子动力学，该方法则主要处理吸附问题。其实，从1980年开始，随着多体势函数的开创和计算机技术的发展，MD模拟方法体系越来越完善。如今，MD方法已经覆盖了诸多的专业领域与应用场景，各个领域的研究人员都利用MD方法更方便、更直观地进行科学研究。

* + 1. 并行计算机的发展

[并行计算导论——张林波]

早在20世纪40年代就出现了现代计算机，开始了计算机从串行计算时代到并行计算时代的一个发展历程。在20世纪60年代，磁芯存储器和晶体管相关技术的发展使得并行计算机逐渐出现在人们的视野中，随之而来的是流水线技术的开创。这使得并行计算机的性能大幅度提高，也推动了计算机技术发展。

在之后的迅速发展历程中，先是虚拟存储和缓存机制的开创，再到半导体存储器、集成电路的大规模采用，对向量计算机指令集的优化和完善，这些都对并行计算机的发展起到了里程碑的作用。从20世纪80年代起，微处理器技术的研究就得到了广泛关注，共享存储的多处理器系统被大量采用。90年代初，斯坦福大学的DASH计划实现了分布式共享存储器的缓存一致性，IEEE也为此提出了统一的协议标准。

如今的并行计算机已经进入了一个新时代，大量的高性能计算机厂商都有能力制造出高性价比的并行计算机，并行计算机正在逐渐向人们的生活进行靠拢，并行计算的应用发展也处于一个繁荣昌盛的局面。

* 1. 理论背景
     1. MD模拟基本思想

分子动力学方法[]是通过数值模拟技术来模拟多粒子系统动态行为的一种方法，研究对象是分子或分子体系结构与性质。它的模型基础是经典力学模型，体系中粒子的运动可以看成是符合牛顿运动定律的，通过计算运动方程，得到体系中原子或分子各个时刻的位置和速度等微观运动状态，利用某些积分统计计算，就不难获得模拟物质对象宏观上的特性。

1. MD模拟的原理

MD模拟的有效性基于两个假设[]：1）牛顿运动定律在体系中所有粒子的运动上均适用。2）叠加定理在体系中粒子相互作用上均适用。

假设一个原子数为N的模拟体系，原子*i*的位置矢量为**r***i*，质量是m*i*，速度是**v***i*，受到的力是**F***i*。原子*i*和原子*j*的相互作用力为*fij*，势能为*uij*，距离为r*ij*=| **r***i* - **r***j* |。

以原子*i*为例，在确定模拟体系中粒子的初始位置和速度后，我们可以求出原子*i*的势能*Ui*：



整个系统的总势能*U*则为：



而力是势能函数关于位移的负梯度，由此可以得到原子*i*受到的力**F***i*：

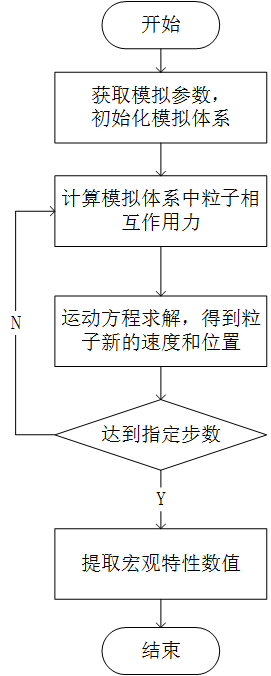


在经典力学模型的基础上，粒子运动符合牛顿运动定律，故可以对原子*i*在*t*时刻的速度**v***i*(*t*)和位置**r***i*(*t*)进行求解：





总结起来，整个模拟过程主要为四步：1）初始化模拟体系，包括粒子速度和位置等。2）计算粒子的相互作用力。3）根据经典力学模型，得到新的速度和位置。4）待体系稳定，进行宏观量的计算。其中，步骤2和步骤3形成一个循环迭代体，对应的流程图如图：



1. 势函数

在MD模拟过程中，计算原子受到的作用力是主要的部分，为了达到这个目的，往往需要先求出原子的势能，研究人员为了表达原子的势能与其所在位置的关系，引入了势函数[分子动力学中势函数研究—陈强]。最早的势函数为对势，在初期，MD模拟采用的都是对势模型。对势又包括间断对势和连续对势，连续对势作为主要的模型被用在MD模拟中。常见的对势有Lennard-Jones(LJ)势[]，Morse势[]，Born-Mayer势等。经过多年的发展，有了多体势，典型的多体势有EAM势[]和Finnis-Sinclair(F-S)势[]。

LJ，Morse 公式，各势函数特性。。。。。

1. 运动方程的求解

在计算得到了粒子所受的作用力后，紧接着做的工作则是根据力来计算粒子下一步的新速度和位置。解决这一问题的算法主要有Verlet算法[]、速度Verlet算法[]、Leap-frog算法[]和Beeman算法[]等。这里主要对Leap-frog算法进行介绍。

1. Leap-frog算法：

假设在时刻*t*，粒子的位置是r(*t*)，速度是v(*t*)，受力是F(*t*)，质量为m，模拟过程迭代的步长为∆*t*，并且****已知。

1. 根据F(*t*)，能得到时刻*t*的加速度a(*t*)：



1. 由a(*t*)计算****：

****

1. 由****计算****：

****

1. ****则可由平均值得出：

****

1. 由步骤3得到的****，又可得到****，转到步骤1进行循环迭代。
   * 1. 空间分解
   1. 技术背景
      1. 并行计算

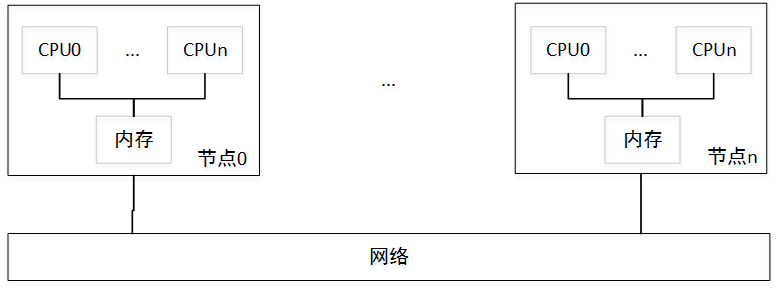
[高性能并行计算——迟学斌]

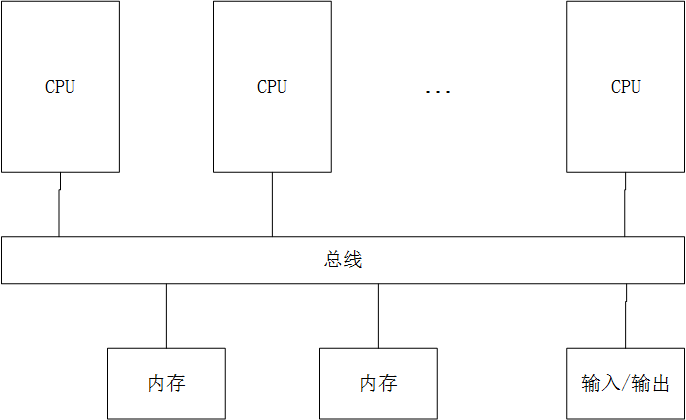
并行计算[]是为了解决单处理机的计算性能问题，由于物理层面上的限制，单处理机在硬件方面是存在瓶颈的，在一些复杂问题的求解中，并行计算则显得必不可少。其基本思想是将一个规模比较大的计算问题分割为一些小计算问题，然后将各个小任务合理分配至各个处理单元，它们同时地进行计算，再通过相互之间的协作与通信，共同形成一个有机的整体得到最终的计算结果。并行计算相当于有多个单处理机同时地服务于同一个计算问题，因此相比于串行计算来说，其时间消耗必然会大大减少。

从20世纪计算机问世以来，并行计算经历了从概念的提出到体系完善的一个发展过程。并行计算所带来的日益增长的计算性能，对人类生活和科学研究的影响都越来越大。如今的并行计算机进入了一个新的时代，在并行计算机的研制技术上，我国已然在世界名列前茅。如曙光、天河和神威等超级计算机都为国家科研打下了物质基础。

* + 1. MPI并行编程模型

从存储方式的角度来看，并行计算系统可分为两大类：分布式存储系统（DMP）和共享内存系统（SMP）。如图:

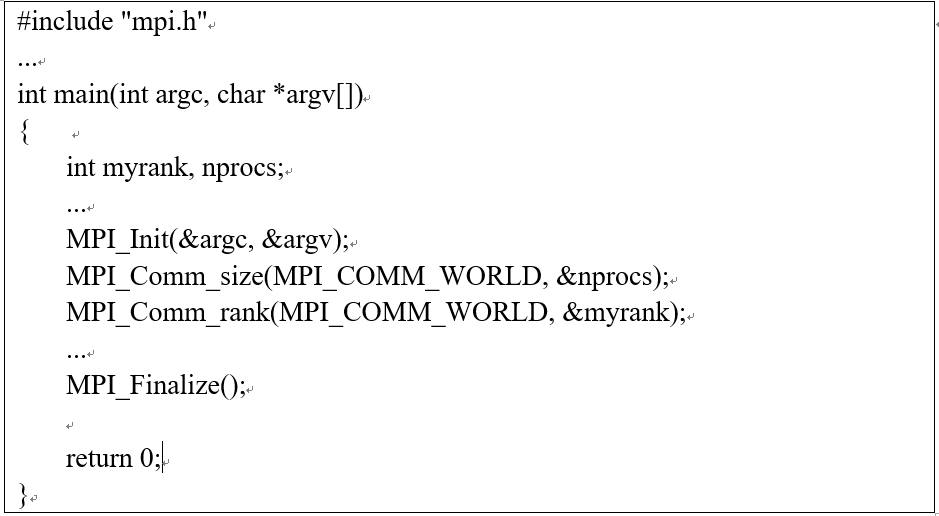




在DMP结构下的并行编程模型中，MPI（。。。。）[]使用最广泛。它是人们提出来的一种编程标准，旨在提高以消息传递为基础的并行程序的效率、一致性、可移植性和可拓展性。

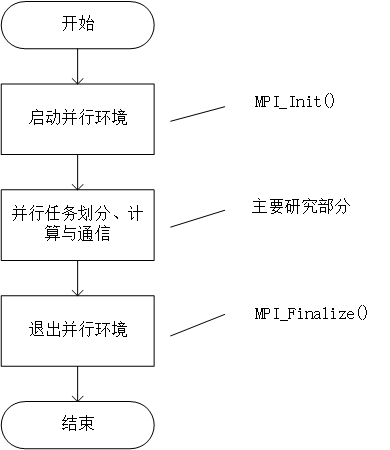
在MPI标准中，定义了一些方便用于进程间消息传递的接口。如今，一些通用的MPI系统已经被研发出来，开源系统中比较著名的有MPICH[]和LAM MPI[]。其中，MPICH使用最广泛，目前许多的机群系统上也主要是以MPICH为并行环境。它提供的接口能容易地被多种语言调用，如C、C++和Fortran语言。[并行计算导论——79]早期的MPI实现是基于MPI 1.0的，它是MPI标准的第一个版本。而在1998年，MPI 2.0版本推出，相比于第一版，它增加了一些功能，如动态进程管理、单边通信、线程安全和并行I/O等。

MPI作为一种编程模型，实际应用中，程序必然会有与模型对应的典型结构。以C语言为例，MPI程序的结构一般如图：



MPI中所有函数接口及常量都以MPI\_开头。在使用MPI函数前，程序中必须包含头文件mpi.h。此外，在所有其它MPI函数调用的开头和结尾，必须分别有MPI\_Init()与MPI\_Finalize()这两个函数，前者用来初始化MPI，后者则是退出MPI系统。最常用的函数有MPI\_Comm\_size()和MPI\_Comm\_rank()，它们分别用于获取指定通信域中进程的总数量和本进程对应的标识号。除图中展示的函数之外，MPI还提供了大量编程接口，如MPI\_Send()和MPI\_Recv()，它们用于进程间的点对点通信，MPI\_Send()将数据信息发送至指定的进程，MPI\_Recv()则是接收指定进程发送来的数据信息。

从程序总体结构的角度来看，MPI并行程序分为三个部分：1）启动并行环境。包括通信器和通信环境的启动。2）并行任务划分、计算和通信。这部分是我们主要的研究对象，研究如何合理地分配任务和进行高效的通信。3）退出并行环境。在退出后，就不能再调用任何MPI函数了。总体结构可用图来表示：



* + 1. 各种通信？？？
    2. 并行程序性能评价

实际编程中，在完成了并行程序的编写后，一个必需的工作就是做程序的性能做出评价。目前已有几种评价指标[]：

1. 并行加速比和效率

假设程序在串行的情况下，单处理器完成任务所需的时间为T。同样的问题，在经过并行化后，由N个进程并行完成计算所需的时间为T*N*，则可计算其加速比S*N*和并行效率E*N*：





通俗地来说，加速比指的是计算任务在引入了N个进程并行计算后，与其串行程序相比，所消耗时间的减少倍数。并行效率则指的是此N个进程或处理器资源的利用程度。

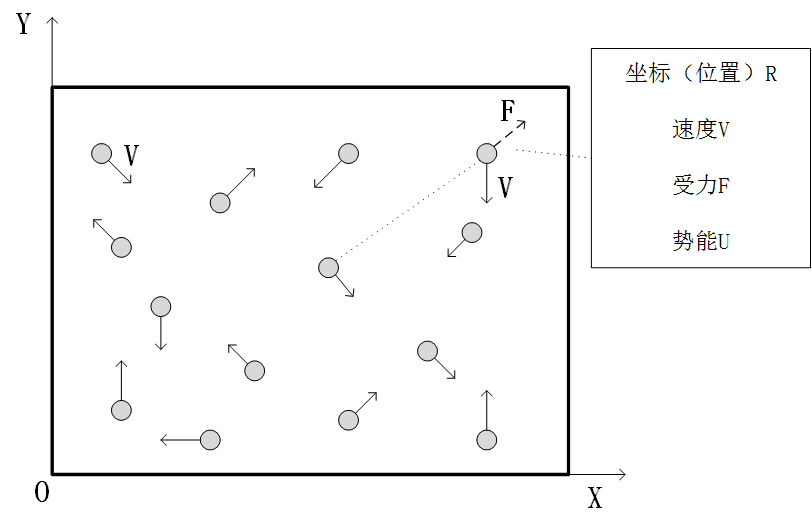
2）。。。？

1. MD模拟空间分解并行化实现
   1. MD模拟过程分析

在2.2节中已经介绍，MD整个模拟过程主要为四步：1）初始化模拟体系，包括粒子速度和位置等。2）计算粒子的相互作用力。3）根据经典力学模型，得到新的速度和位置。4）待体系稳定，进行宏观量的计算。其中，步骤2和步骤3形成一个循环迭代体，迭代一定次数后退出循环。

* + 1. 原子信息存储

MD模拟是在微观尺度上进行的，其对象是原子，因此必须记录原子的行为和状态信息。如图，将一个模拟体系赋予坐标系（二维体系），则每一个体系中的原子都有唯一的坐标值即位置；每一个原子时刻都在运动，所以有唯一的速度值；其次，体系中两两原子间都有相互作用，这带来了原子的受力和势能，也需要记录。此外，为了防止受力的重复计算，还需要一个能够唯一标识原子的序号。故得到存储原子信息的结构体Atoms（三维体系），如表：

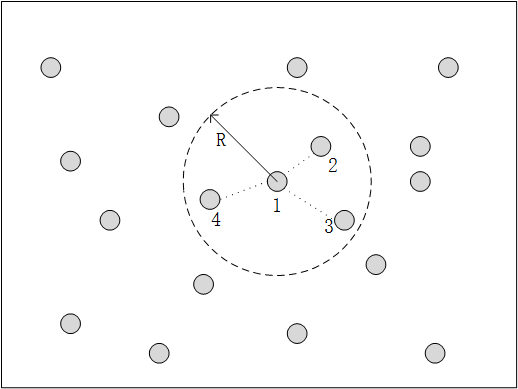


Atoms

|  |  |
| --- | --- |
| 位置pos | X方向pos[0] |
| Y方向pos[1] |
| Z方向pos[2] |
| 速度vel | X方向vel[0] |
| Y方向vel[1] |
| Z方向vel[2] |
| 受力force | X方向force[0] |
| Y方向force[1] |
| Z方向force[2] |
| 势能u | |
| 序号id | |

* + 1. 计算相互作用力

在体系初始化完成后，就需要对体系中每个原子的受力进行计算。对于MD方法的串行程序，其计算方法是遍历体系中的每个原子，对每个原子，又需要计算它与其它所有原子的受力叠加，所以该算法的复杂度为O(N2)。其计算量大，为了减少计算量，。。。引入了截断半径[]这一概念。如图，在计算原子1时，我们认为只有与原子1距离不超过截断半径R的其他原子，才与原子1有相互作用，如图中的原子2、3、4，这就减少了大量的计算。



在串行程序中，计算原子受力的算法如下：

|  |
| --- |
| **MD串行程序计算作用力伪代码** |
| **atoms：**原子信息结构体数组  **atomnum：**总原子数量  **r0：**截断半径 |
| **1:** for(int i=0;i < atomnum;i++)  **2:** for(int j=0;j < atomnum;j++)  **3: if( atoms[i].id >= atoms[j].id )**  **4:** continue;  **5:** r = ( atoms[i].pos- atoms[j].pos ) \* ( atoms[i].pos - atoms[j].pos );  **6:** r = sqrt(r);  **7: if( r > r0 )** //距离大于截断半径  **8:** continue;  **9:** u = calu(r); //计算势能  **10:** f = calforce(r); //由势函数的梯度函数求得  **11:** atoms[i].force -= f;  **12:** atoms[j].force += f;  **13:** atoms[i].u += 1/2\*u;  **14:** atoms[j].u += 1/2\*u; |

其中，第3行用于判断原子i和原子j是否已经参与计算，防止重复计算。第7行则判断两原子的距离是否大于截断半径，若大于则不计算。第9、10行则利用在。。节介绍的势函数来计算势能和作用力，11~14行对原子的受力和势能进行叠加。

* + 1. 更新原子位置和速度

在2.2.1中，对Leap-frog算法进行了介绍。我们利用此算法来更新原子的坐标和速度，伪代码如下：

|  |
| --- |
| **MD更新原子坐标、速度伪代码** |
| **atoms：**原子信息结构体数组  **atomnum：**总原子数量  **n：**当前迭代次数  **N：**总迭代次数  **m：**原子的质量  **dt：**迭代步长 |
| **1:** while( n < N )  **2:** {  **3:** for(int i;i< atomnum; i++)  **4:** {  **5:** atoms[i].vel + = atoms[i].force/ m \* 0.5 \* dt;  **6:** atoms[i].pos += atoms[i].vel \* dt;  **7:** }  **8:**  **9:** **ComputeForce();** //重新计算原子的受力，即F(t+dt)  **10:**  **11:** for(int i;i< atomnum; i++)  **12:** atoms[i].vel + = atoms[i].force/ m \* 0.5 \* dt;  **13:** } |

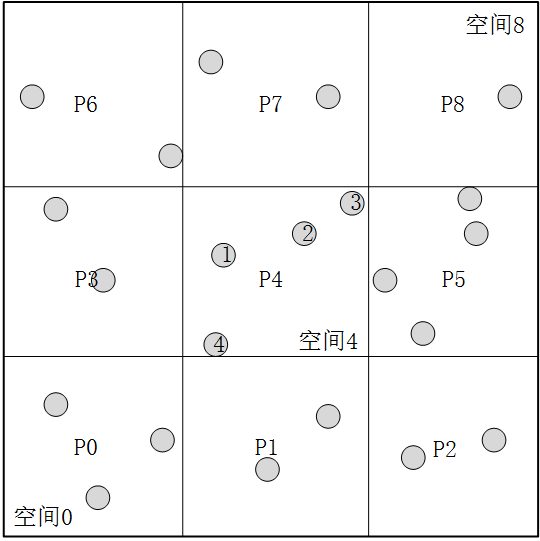
其中，第9行ComputerForce()指的是3.1.2中描述的算法，即计算相互作用力。

* 1. MD模拟程序并行化
     1. 任务划分

数据分解/任务分解

主从/对等

采用任务分解和对等的并行划分方法，将整个模拟体系在实际的物理层面上平均划分为N个子空间，N为指定的并行进程数，每个进程只负责其对应子空间内部原子的计算。如图，将整个体系平均分成了9个子空间（空间0~8），每个子空间对应一个进程。以进程P4来举例，P4进程只计算坐标分布在空间4的原子1、2、3、4。



Linked-cell

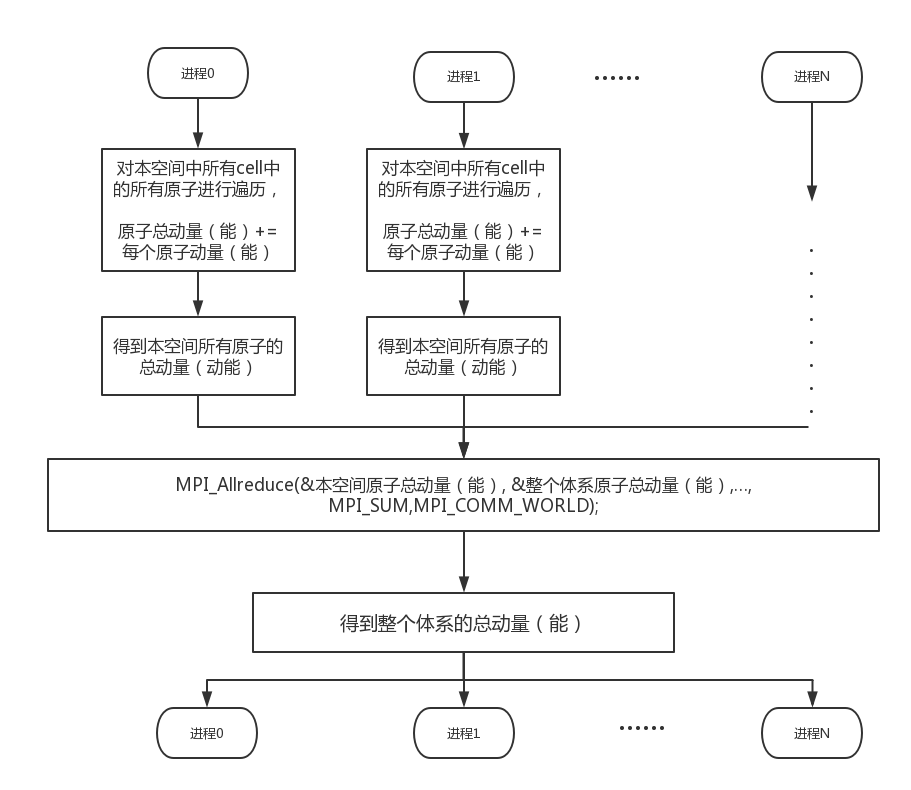
* + 1. 通信
    2. 宏观量提取

在体系达到平衡（即原子总势能比较稳定）后，我们可以开始提取感兴趣的宏观量，下面以温度这一宏观值为例子，说明在MD并行化中提取宏观量的方法。

要计算体系的宏观值，需要一个从微观到宏观转换的一个途径。在计算温度时，就可以通过计算体系中所有原子的总动能来进行转换，总动能和温度的关系满足公式：

要获得整个体系的总动能，首先要计算每个进程中原子的总动能，再将所有进程的这一值相加。假设进程0~N中原子总动能分别为K0，K1，…，KN，则可求得体系总动能K：

在MPI编程模型中，函数MPI\_Allreduce()可完成这一工作。MPI\_Allreduce()。。。。因此，可按图所示的程序结构来计算体系的总动能，从而通过式求得温度这一宏观量。



MD并行化程序中提取体系的温度的算法如下：

1. MD模拟并行化通信策略研究

第三章3.2节中说明到，MD模拟并行化程序中通信是不可避免的。每个进程在计算对应子空间中边界原子的受力时，需要其它的邻居进程中相应一部分原子的坐标信息，这部分的信息需要通过与其它进程进行通信才能获得，这就引起了我们对其通信策略的研究。

最基本的通信方式就是直接点对点通信。其它某个进程需要本进程的数据，或者本进程需要其它某个进程的数据，就直接地将所需数据通过MPI\_Send()、MPI\_Recv()发送给相应进程或从相应进程接收。如图：

1. 实验结果分析
2. 结 论