

# 基于改进细胞链表算法的分子动力学模拟性能优化模型

金明灿<sup>1,2,3</sup> 胡长军<sup>1,2</sup> 李建江<sup>1,2</sup> 苗庆松<sup>1,2</sup>

(北京科技大学计算机与通信工程学院 北京 100083)<sup>1</sup>

(中国科学院计算技术研究所计算机体系结构国家重点实验室 北京 100083)<sup>2</sup>

(平壤机械大学信息工程学院 平壤 70050)<sup>3</sup>

**摘要** 在改进的细胞链表算法中,细胞大小的减少会降低该算法的通信量和粒子之间距离计算的次数,同时会增加邻居细胞的数量。多细胞分子动力学算法是分子动力学模拟中普遍使用的并行算法。将改进细胞链表算法的基本思想应用到多细胞分子动力学算法中,推导出了一个分子动力学模拟性能评价模型,并据此提出一个优化模型来加速分子动力学模拟。实验结果表明,根据该优化模型确定的细胞大小可以提高分子动力学模拟程序的性能。

**关键词** 并行计算,细胞链表算法,多细胞分子动力学算法,性能评价,细胞大小的优化

**中图分类号** TP391.9 **文献标识码** A

## Optimization Model for Performance of Molecular Dynamics Simulation Based on Modified Cell-linked List Method

JIN Ming-can<sup>1,2,3</sup> HU Chang-jun<sup>1,2</sup> LI Jian-jiang<sup>1,2</sup> MIAO Qing-song<sup>1,2</sup>

(School of Computer and Communication Engineering, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China)<sup>1</sup>

(State Key Laboratory of Computer Architecture, Institute of Computing Technology, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China)<sup>2</sup>

(School of Information Engineering, University of Machine Pyongyang, Pyongyang 70050, Korea)<sup>3</sup>

**Abstract** In the modified cell-linked list method, the reduction in cell sizes results in the reduction of communication loads and calculation costs of distance between particles, the requirements of more neighboring cells. The multi-cell molecular dynamics (MD) method is a parallel one that is widely used for MD simulation. This paper applied the key idea of modified cell-linked list method to the multi-cell MD method, derived a performance evaluation model for the MD simulation and proposed an optimal model for the acceleration of MD simulation according to that. The experimental results show that cell sizes which are optimized by using the optimal model, can improve the performance of molecular dynamics simulation.

**Keywords** Parallel computing, Cell-linked list method, Multi-cell MD method, Performance evaluation, Cell size optimization

## 1 引言

分子动力学模拟是当前使用最广泛的计算大型复杂系统的方法,广泛应用于爆炸模拟、药物研究、高分子聚合物研究和材料模拟等领域。分子动力学模拟研究的意义在于:利用分子动力学模拟能够完成现实中很多根本无法完成的实验,甚至假想实验,能有效降低研究成本、减少研究时间和避免材料的浪费。分子动力学研究的目的是从粒子的微观作用推算宏观性质。所以,分子动力学模拟越来越得到研究人员的重视,其发展非常迅速,并逐渐成为一门成熟科学。分子动力学模拟技术虽然取得了长足的进步,但是还面临着许多新的挑战(比如更大规模的分子系统模拟)。由此可见,分子动力学

模拟属于计算高度密集型的应用,迫切需要更快、更有效和更准确的方法。

大规模集群的出现为解决像分子动力学一样的大规模科学问题提供了一个很好的机会,并且并行计算也成为模拟和现代科学研究的重要方法。大规模集群需要设计有效的并行算法,以便充分地利用其计算能力。良好的并行算法需要处理好处理器之间通信的优化<sup>[1-3]</sup>和粒度优化<sup>[4]</sup>。

目前有很多跟通信有关的分子动力学模拟研究。其中,有3个具有代表性的并行算法<sup>[5]</sup>:原子分解法(RD: Replicated Data or atom decomposition)、作用力分解法(FD: Force Decomposition)和空间分解法(SD: Spatial Decomposition or geometric decomposition)。这些方法根据处理器里粒子之间

到稿日期:2012-05-06 返修日期:2012-08-01 本文受中国科学院计算机系统结构重点实验室开放课题(CARCH201108),北京市教委重点学科(XK100080537)资助。

金明灿(1976-),男,博士生,主要研究领域为并行计算,E-mail:kmc76321@yahoo.cn;胡长军(1963-),男,博士,教授,博士生导师,主要研究领域为并行计算与并行编译、网络存储体系结构、云计算与服务计算、数据工程与软件工程;李建江(1971-),男,博士,副教授,主要研究领域为并行计算与并行编译;苗庆松(1990-),男,硕士生,主要研究领域为并行计算与并行编译。

距离与截断半径大小比较的结果来区分。原子分解法和作用力分解法不要求粒子之间距离比截断半径小,但是空间分解法要求这一点。因此,空间分解法的通信成本比原子分解法和作用力分解法少得多,空间分解法普遍用于大规模系统的模拟。作用力分解法的效率只依赖于处理器数,空间分解法的效率只依赖于截断半径。表1( $R$ 是截断半径, $P$ 是处理器数)根据处理器数和截断半径比较几个并行算法的通信量<sup>[2]</sup>。通信量可以用处理器数和截断半径来表示,更好的分子动力学模拟并行算法可以用粒子数、处理器数、截断半径和数据粒度来评价。Snir's hybrid(SH)算法<sup>[6]</sup>和Shaw's Neutral Territory(NT)算法<sup>[2,3]</sup>结合了作用力分解法和空间分解法的优点。NT算法的基本思想是两个粒子之间作用点不放在它们所在的处理器里,这个思想跟传统的空间分解法完全相反。传统的空间分解法、SH、NT算法被称为一般空间分解法。

表1 几个并行算法的通信量比较

算法	作用范围尺度	处理器数尺度
RD	None	None
FD	None	$o(P^{-1/2})$
SD	$o(R^3)$	None
NT和SH	$o(R^{3/2})$	$o(P^{-1/2})$

Rice提出了一个基于细胞减小的改进细胞链表算法<sup>[4]</sup>,研究了细胞大小对分子动力学模拟加速的影响。细胞链表算法也是一种空间分解法。细胞链表算法把模拟空间分为一些大小大于或等于截断半径的细胞,它使粒子之间距离计算次数从 $o(N^2)$ 减少到 $o(N)$ 。改进细胞链表算法中,细胞越小,通信量和粒子之间距离计算次数越少,邻居细胞数越多。邻居细胞数的增加引起计算量和存储量的增加,一般大规模科学问题都受到存储量的影响。所以,细胞大小的优化对分子动力学模拟加速有非常重要的作用。

本文针对加速分子动力学模拟,在Van der Waals作用力计算中,采用多细胞分子动力学算法<sup>[7]</sup>和改进细胞链表算法,研究模拟性能的评价和细胞大小的优化。针对上述问题,为了让计算更简单,做了以下假定:第一,模拟空间是对称型的几何领域,并且满足周期边界条件。分子动力学模拟的常用方法是空间分解法。因此,空间结构越复杂,空间分解也越复杂。周期边界条件表示分子系统的特性(见图1)。第二,所有粒子在每个时间步骤只能移动到邻居细胞里。第三,所有粒子均匀地分布在模拟空间里。本文第2节简单介绍改进细胞链表算法和多细胞分子动力学算法;第3节提出我们的模拟性能评价模型和优化模型;第4节得出实验结果并做出相应的分析;最后得出结论。

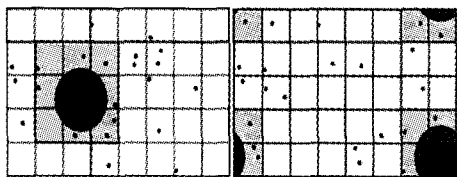


图1 周期边界条件

## 2 细胞链表算法与多细胞分子动力学算法

### 2.1 改进细胞链表算法

细胞链表算法将模拟空间分为若干细胞,细胞的大小大

于或等于截断半径,模拟空间中的每个粒子根据自身的空间位置分配到细胞中。在该算法中,粒子 $i(1 \leq i \leq N, N$ :粒子数)作用力计算最重要的部分是确定粒子 $i$ 的邻居粒子。包含粒子 $i$ 的细胞被称为原细胞,粒子 $i$ 的邻居粒子在原细胞或邻居细胞里。对两个细胞 $C_1$ 和 $C_2$ ,如果满足以下条件:

$$\forall i \in C_1, |r_i - r_j| \leq R \rightarrow \exists j \in C_2 \quad (1)$$

细胞 $C_2$ 被称为原细胞 $C_1$ 的邻居细胞。其中, $|r_i - r_j|$ 是两个粒子 $i, j$ 之间的距离, $R$ 是截断半径。根据周期边界条件,每个原细胞被26个(三维)邻居细胞包围。因此,粒子 $i$ 的邻居粒子可以在26个邻居细胞里寻找。如果模拟空间中粒子数为 $N$ ,细胞数为 $M$ ,粒子均匀地分布在模拟空间里,需要的距离计算次数为:

$$27 \times N \times N_{CELL}, (N_{CELL} = N/M^3) \quad (2)$$

式中,27是细胞数(26个邻居细胞和原细胞), $N_{CELL}$ 是一个细胞里的平均粒子数。式(2)表明,细胞链表算法使粒子之间距离计算次数从 $o(N^2)$ 减少到 $o(N)$ 。

良好的并行算法应具有较少的通信量。但是,细胞链表算法却具有较大的通信量。如果细胞的大小等于截断半径,那么在每个粒子作用力计算的过程中,该算法的通信量是 $27 \times R^3$ 。当细胞大小等于粒子直径时,在这种极端情况下,每个细胞只包含一个粒子,该算法的通信量为 $4/3 \times \pi \times R^3 \approx 4.189 \times R^3$ ,是细胞链表算法通信量的15.514%。所以说,细胞链表算法在通信量方面有待改善。

改进细胞链表算法的基本思想是减小细胞的大小。随着细胞的减小,粒子的作用域从边长为 $3R$ 的立方体逐渐变为半径为 $R$ 的球。而且,随着邻居细胞数量的增加,产生了一些问题。例如,将图2(a)中每个细胞再分为4个更小的细胞,从而得到图2(b)。图2(a)中每个细胞大小等于截断半径 $R$ ,图2(b)中的细胞半径为 $R/2$ 。

从图2可以得到:第一,图2(a)中邻居细胞面积是 $9R^2$ ,图2(b)中邻居细胞面积是 $6.25R^2$ ,图2(b)减少了三分之一。第二,不必要的粒子之间距离计算次数从9减少到4。第三,邻居细胞数从8增加到24。根据图2分析,减小细胞大小使得通信量降低(减少1/3),粒子之间距离计算次数减少(减少1/2),邻居细胞数量增加了两倍。通信量和距离计算次数的减少可以提高分子动力学模拟程序的加速性能,但是邻居细胞数量的增加会制约程序的性能。细胞大小减小,邻居细胞数增加,产生了一些空细胞(细胞中没有粒子),这些空细胞可以减少该算法的通信量和粒子之间距离的计算次数,从而提高程序的性能。

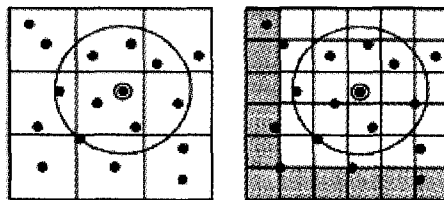


图2 不同细胞大小的细胞链表算法

图2 不同细胞大小的细胞链表算法

### 2.2 细胞分子动力学算法

细胞链表算法是多细胞分子动力学算法的基础,为了理解的方便,我们以二维空间进行描述。图3表示在二维空间

上的多细胞分子动力学算法。模拟空间分为  $P = P_X \times P_Y$  个处理器空间域,其中  $P_X$  是  $X$  轴处理器数, $P_Y$  是  $Y$  轴处理器数。每个处理器空间域再分为大小至少等于截断半径的细胞,每个粒子根据自身的空间位置分配到合适的细胞里。如图3所示, $P=16, P_X=4, P_Y=4$ ,每个处理器包含16个细胞。

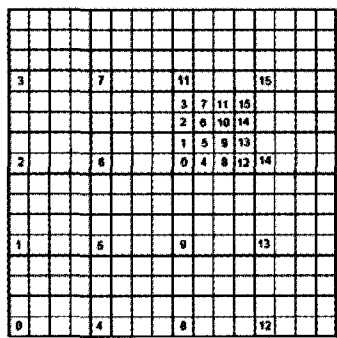


图3 二维空间上多细胞分子动力学算法

多细胞分子动力学算法中作用力的计算如下:第一,选择处理器中一个细胞(被称为原细胞);第二,计算原细胞里粒子之间的作用力;第三,计算原细胞里粒子和邻居细胞里粒子之间的作用力;第四,根据粒子作用力和位置信息,重新计算粒子的位置,并检查粒子的位置信息,确定粒子是否从原细胞转移到其他细胞里。重复执行以上4个步骤直到条件满足。多细胞分子动力学算法的主要特征是所有处理器都具有同一处理结构。

### 3 主要研究

分子动力学模拟性能的提高是本文的研究目标,实现这一目标的主要思想是将改进细胞链表算法的基本思想应用到多细胞分子动力学算法中。为了研究三维分子系统的性能,设定参数:系统中粒子总数为  $N$ ,截断半径为  $R$ ,处理器数为  $P(=P_X \times P_Y \times P_Z, P_X: X$  轴处理器数,  $P_Y: Y$  轴处理器数,  $P_Z: Z$  轴处理器数),模拟空间的大小为  $L(=L_X \times L_Y \times L_Z)$ ,大小为  $R$  的细胞分为  $N_X \times N_Y \times N_Z$  区域。在多细胞分子动力学算法中,每个处理器中细胞数为  $C_P$ ,一个细胞里平均粒子数为  $A_{CELL}$ ,每个细胞的邻居细胞数为  $C_N$ ,如式(3)~式(5)。式(5)中  $[a]$  表示小于  $a$  的最大自然数。

$$C_P = \frac{L_X \times L_Y \times L_Z \times N_X \times N_Y \times N_Z}{P_X \times P_Y \times P_Z \times R^3} \quad (3)$$

$$A_{CELL} = \frac{N \times R^3}{L_X \times L_Y \times L_Z \times N_X \times N_Y \times N_Z} \quad (4)$$

$$C_N = [(2 \times N_X + 1) \times (2 \times N_Y + 1) \times (2 \times N_Z + 1) / 2 + 0.5] \quad (5)$$

粒子作用力计算所需的通信量为  $Q$ ,所有粒子作用力计算的平均距离计算次数为  $N_P$ ,如式(6)、式(7)所示。

$$Q = \left(\frac{R}{N_X} + 2 \times R\right) \times \left(\frac{R}{N_Y} + 2 \times R\right) \times \left(\frac{R}{N_Z} + 2 \times R\right) \quad (6)$$

$$N_P = N \times C_N \times A_{CELL} \quad (7)$$

计算时间是分子动力学模拟性能评价的主要指标,本文的主要思想能够反映在作用力计算时间的计算过程中。考虑多细胞分子动力学算法的特征,模拟系统的计算时间等于多个处理器中最长处理时间。模拟系统的计算时间  $t_{MD}$  如式(8)所示。

$$t_{MD} = \max_{0 \leq i \leq P} t_{MD}^i \quad (8)$$

式中,  $t_{MD}^i$  表示第  $i$  个处理器的计算时间,它由作用力计算时间  $t_f^i$ 、积分时间  $t_i^i$  和粒子移动时间  $t_M^i$  来决定。因为模拟程序的大部分计算是作用力的计算,可以用式(9)来表示。作用力计算时间是由原细胞里粒子之间作用力  $t_{home}^i$ 、原细胞里粒子和邻居细胞里粒子之间作用力  $t_{neigh}^i$  来决定的。

$$t_{MD}^i \approx \max_{0 \leq i \leq P} t_f^i \quad (9)$$

$$t_f^i = t_{home}^i + t_{neigh}^i \quad (10)$$

原细胞里粒子之间作用力的计算由5个步骤来完成:第一,计算原细胞的索引(原细胞索引的计算时间  $\tau_{ind,1}^i$ );第二,访问原细胞数据(原细胞的访问时间  $\tau_{acc}^i$ );第三,检查原细胞里有没有粒子(检查时间  $\tau_{cre}^i$ );如果有粒子,执行第四步,否则执行第五步;第四,计算原细胞里粒子之间作用力,它由原细胞里任何两个粒子之间距离计算  $\tau_{dst}^i$ 、作用力计算  $\tau_f^i$  和作用力的求和  $\tau_{sum}^i$  决定。如果  $C_P$  个原细胞中  $C_b^i (0 \leq C_b^i \leq C_P)$  个细胞里有粒子,则  $C_P$  个原细胞里粒子之间作用力计算时间可以用式(11)表示;第五,如果被计算的原细胞数比处理器里细胞数  $C_P$  更小,计算第一步;否则,结束计算。

$$t_{home}^i = C_P \times (\tau_{ind,1}^i + \tau_{acc}^i + \tau_{cre}^i) + C_b^i \times A_C \times (A_C - 1) / 2 \times (\tau_{dst}^i + \tau_f^i + \tau_{sum}^i) \quad (11)$$

式中,  $A_C$  是  $C_b^i$  个细胞中每个细胞的平均粒子数。

$$A_C = \frac{N}{P_X \times P_Y \times P_Z \times C_P} \quad (12)$$

原细胞里粒子之间作用力计算时间  $t_{home}^i$ 、原细胞里粒子和邻居细胞里粒子之间作用力计算时间  $t_{neigh}^i$  的差距是第一、第二步:每个原细胞被  $C_N$  个邻居细胞包围。如果邻居细胞索引计算时间是  $\tau_{ind,2}^i$ ,每个原细胞的平均  $C_b^i (0 \leq C_b^i \leq C_N)$  个邻居细胞里有粒子和平均  $C_b^i (0 \leq C_b^i \leq C_b^i)$  个邻居细胞放在别的处理器里(通信时间  $\tau_{com}^i$ )。

$$t_{neigh}^i = C_b^i \times C_N \times (\tau_{ind,2}^i + \tau_{cre}^i) + C_b^i \times (C_N - C_b^i) \times \tau_{acc}^i + C_b^i \times C_b^i \times \tau_{com}^i + C_b^i \times C_b^i \times A_C \times A_C \times (\tau_{dst}^i + \tau_f^i + \tau_{sum}^i) \quad (13)$$

因为  $C_P, C_N, A_C, C_b^i, C_b^i$  和  $C_b^i$  都依赖于参数  $N_X, N_Y$  和  $N_Z$ ,作用力计算时间  $t_f^i$  是参数  $N_X, N_Y$  和  $N_Z$  的函数。则对于集合:

$$S = \{(C_b^i, C_b^i, C_b^i, N_X, N_Y, N_Z) \mid 0 \leq C_b^i \leq C_P, 0 \leq C_b^i \leq C_N, 0 \leq C_b^i \leq C_b^i, C_b^i \leq C_b^i, N_X, N_Y, N_Z \in NA\} \quad (14)$$

$NA$  是自然数集合,模拟系统的最小模拟时间如式(15)表示。

$$\min_S t_{MD} = \min_S \max_{0 \leq i \leq P} t_f^i \quad (15)$$

本文提出的优化模型综合考虑了通信量、距离计算次数、邻居细胞数量的增加和内存访问等因素的影响,求解优化模型式(15),得到细胞大小的优化值,从而提高分子动力学模拟性能。参数  $\tau_{ind,1}^i, \tau_{ind,2}^i, \tau_{acc}^i, \tau_{com}^i, \tau_{cre}^i$  等的值完全依赖于具体处理器硬件特性。

### 4 实验结果与分析

实验硬件环境为:4X4 英特尔 Xeon<sup>R</sup> E7320 多核处理器,16GB 内存,操作系统为 Fedora 9,编译器为 GCC4.3.0。我们用 C 语言和 OpenMP 做了一个分子动力学模拟实验。实验数据如表2所列。

表2 实验数据

实验参数	值
材料名	Ar
粒子数	1500000
核数	1 to 16
时间步	0.00462
密度	0.8442
作用半径	2.58

分子动力学模拟过程中作用力的计算部分是最耗时的部分。因此,用一个步骤的作用力计算时间来评估我们的方法。为了评估我们的方法,展示并分析了两个实验结果。首先,按照处理器数的增加和细胞大小的减小模拟作用力计算,图4中显示其结果。图4中有两个曲线,一个曲线对应于核数为8的结果,另一个对应于核数为12的结果。横轴表示细胞大小的减小。例如,当横轴的值 $N_M=N_X=N_Y=N_Z=2$ 时,细胞大小的实际值是 $R/N_M$ 。纵轴用秒表示一个时间步骤的作用力计算时间。从图4的结果可以推算出:1)核数为8和12时,细胞大小的优化值是 $N_M=3$ ;2)改进细胞链表算法比传统的更好。当细胞的大小被优化时,其效率比传统的增加了2.5倍左右。因为核数为8的情况下,传统的( $N_M=1$ )作用力计算时间是413.1149秒, $N_M=3$ 时的计算时间是117.604秒;3)超过优化值以后,作用力计算时间增加,这是因为邻居细胞数的增加需要更多的计算。

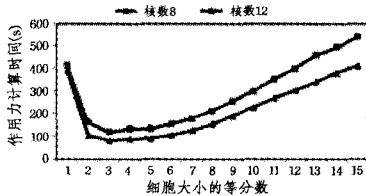


图4 随着细胞大小减小的作用力计算时间(粒子数1,500,000;核数8,12)

表3 用优化模型和模拟性能评价模型的几个参数的理论值

$N_M$	$C_P^1$	$C_P^2$	$C_P^3$	作用力计算时间(S)
2	548	4	2	161.6494
3	1748	10	4	118.5066
4	3812	24	7	127.8615
5	8321	53	19	132.0262

表4 对几个演算的处理器时间

演算	处理器时间
$\tau_{ind,1}$	0.36
$\tau_{ind,2}$	0.9
$\tau_{acc}$	0.08
$\tau_{com}$	0.12
$\tau_{cre}$	0.01
$\tau_{dst}$	0.29
$\tau_f$	0.25
$\tau_{sum}$	0.02

其次,比较核数为8时的理论值和实验值,进而评价我们所提方法的正确性。为了实现它,求解式(9)和式(15),得到表3的理论值。表3中的理论值是基于表4中几个演算的处理器时间。从表3能够得到随着细胞大小减小的作用力计算时间曲线(见图5)。图5中一个是对应理论值的曲线,另一个是对应于实验值的曲线。实验值是从图4得来的。因为

$C_P^1$ 、 $C_P^2$ 和 $C_P^3$ 都为等分数 $N_M$ 的函数,图5中横轴仅仅表示细胞大小等分数,也跟参数 $C_P^1$ 、 $C_P^2$ 和 $C_P^3$ 一起表示。

根据表5和图5可以推算出:1)性能评价模型和优化模型是正确的,其平均相对误差是1.30053%( $= (1.154845 + 0.761645 + 3.078018 + 0.20761)/4$ );2)细胞的大小能够被优化,能够随着处理器数目、截断半径和细胞大小而预测出模拟时间。

表5 几个细胞大小的理论值和实验值之间误差的比较

理论值	实验值	相对误差(%)
161.6494	159.7826	1.154845
118.5066	117.604	0.761645
127.8615	131.7971	3.078018
132.0262	132.3003	0.20761

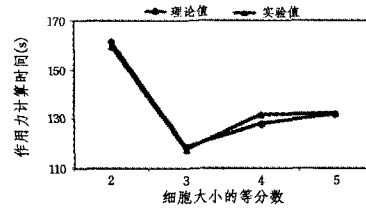


图5 随着细胞大小减小的理论值和实验值之间的比较

**结束语** 从表3可以看出:有粒子的原细胞数 $C_P^1$ 和有粒子的邻居细胞数 $C_P^2$ 之间比值越大,模拟时间越小(表3的值 $C_P^1$ 和 $C_P^2$ 之间的比是137、174.8、158.8333、157)。改进的细胞链表算法比传统的算法效率更高,优化值使其效率比传统的增加了2.5倍左右。理论值和实验值之间平均相对误差是1.30053%左右,因此优化模型和模拟性能评价模型是比较正确的。通过优化模型(15)和性能评价模型(9),细胞大小能够被优化,并且可以根据处理器数目、截断半径、细胞大小预测模拟时间。这些方法能够应用于其他的分子动力学模拟算法。

### 参考文献

- [1] 杨晓东,陆松,牟胜梅.并行计算机体系结构技术与分析[M].北京:科学出版社,2009
- [2] Bowers K J, Dror R O, et al. Zonal Methods for the Parallel Execution of Range-limited N-body Simulations [J]. Journal of Computational Physics, 2007, 221(1): 303-329
- [3] Shaw D E. A Fast, Scalable Method for the Parallel Evaluation of Distance-limited Pairwise Particle Interactions [J]. Journal of Computational Chemistry, 2005, 16(13): 1318-1328
- [4] Mattson W, Rice B M. Near-neighbor calculations using a modified cell-linked list method [J]. Computer Physics Communications, 1999, 119(2/3): 135-148
- [5] Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-range Molecular Dynamics [J]. Journal of Computational Physics, 1995, 117(1): 1-19
- [6] Snir M. A Note on N-body Computations with Cut-offs [J]. Theory of Computing Systems, 2004, 37(2): 295-318
- [7] Beazley D M, Lomdahal P S. Message-Passing Multi-Cell Molecular Dynamics on the Connection Machine 5 [J]. Parallel Computing, 1994, 20(2): 173-195