

Lenovo 联想



联想制造行业 HPC解决方案

Lenovo 联想



手机专线 400 819 6776
座机专线 800 830 6776
dcg.lenovo.com.cn

Ultrabook、赛扬、Celeron Inside、Core Inside、英特尔、英特尔标志、英特尔凌动、Intel Atom Inside、英特尔酷睿、Intel Inside、Intel Inside 标志、英特尔博锐、安腾、Itanium Inside、奔腾、Pentium Inside、vPro Inside、至强、至强融核、Xeon Inside 和英特尔傲腾是英特尔公司或其子公司在美国和/或其他国家（地区）的商标。

咨询电话 400 819 6776

英特尔®至强®可扩展平台 加速探索与获取洞察

联想 CAE 仿真 HPC 解决方案

联想 CAE 仿真 HPC 解决方案广泛适用于航空，航天，汽车，船舶，核，电等制造相关的领域。

CAE 仿真应用分析

CAE 高性能运算的应用可以分为隐式有限元分析 (IFEA)、显式有限元分析 (EFEA) 和计算流体动力学 (CFD) 三个子学科。采用隐式算法的软件主要有 ABAQUS/Standard、ANSYS、MSC.NASTRAN 等，适合求解静力、模态、屈曲等问题；采用显式算法的软件主要有 ABAQUS/Explicit、LS-DYNA、PAM-CRASH 等，适合求解接触、碰撞、冲击等问题。

几乎所有的 CAE 高性能计算都依赖于独立软件开发商 (ISV) 提供的商业软件，只有流体动力学算题中结构网格计算类型的部分软件是用户自己开发的。因此制造业用户在购买硬件平台的同时通常会购买相应的科学计算软件产品。而在某种程度上，往往是应用软件的特性决定了硬件平台的选择。

从对计算资源的需求来说，隐式解法的基本特点是内存占用多、磁盘 I/O 大、进程通信量大，因此，隐式解法要求系统的内存容量大、访存带宽高、磁盘 I/O 速度快、通信延迟低；相对而言，显式解法对内存、磁盘 I/O 和通信延迟的要求要低一些。

从软件的扩展性上来说，隐式算法和显式算法有明显的区别。采用隐式算法的软件，扩展性相对较差，计算性能在 4 到 8 个物理 CPU 以上就很难获得进一步的提升。而采用显式算法的软件，扩展性就要好得多，在 64 到 128 CPU 以内都能获得较好的并行性能，伴随设计和仿真的需求，目前联想已经在国内用户部署了单户超过 2000 台服务器的案例。

下表给出了常用的 CAE 软件，并列出了这些软件的特点，包括并行方式和可扩展性。

CAE 应用软件分类	应用软件	并行方式	扩展性
静态隐式有限元分析 (IFEA Statics)	ABAQUS	threads	
	ANSYS	OpenMP, MPI	
	MSC.Nastran	threads, MPI	
动态隐式有限元分析 (IFEA Dynamics)	ABAQUS	threads	
	ANSYS	OpenMP, MPI	
	MSC.Nastran	threads, MPI	
显式有限元分析 (EFEA)	LS-DYNA	OpenMP, MPI	
	PAM-CRASH	OpenMP, MPI	
	RADIOSS	OpenMP, MPI	
计算流体动力学 (CFD)	FLUENT	MPI	
	STAR-CC	MPI	
	PowerFLOW	OpenMP, MPI	

表 常用分析软件

从上表中我们可以了解到 CAE 应用软件具有以下特点：

- IFEA 类应用软件（如 ABAQUS、ANSYS 和 MSC Nastran）硬件平台支持的可扩展性不是很好。Nastran 对内存，I/O 性能要求高；
- IFEA 类应用软件通常使用共享内存方式（threads 或 OpenMP），进行并行处理，其中 ABAQUS 不支持消息传递方式（MPI）的并行；
- EFEA 类应用软件（如 RADIOSS、LS-DYNA 和 PAM-CRASH）和计算流体动力学软件（如 FLUENT、STAR-CD 和 PowerFlow）的硬件平台支持的扩展性相对较好。RADIOSS/LS-DYNA 对 CPU，I/O 性能要求高；
- EFEA 类应用软件和 CFD 软件以采用消息传递并行方式（MPI）为主。



仿真高性能计算常见软件

类别	软件名称	原厂商
结构	ANSYS	ANSYS, Inc.
	NASTRAN	MSC Software Corporation
		Simens PLM Software Inc.
	ABAQUS	Dassault Systemes
	OptiStruct	Altair
	Adina	Adina
	SAP2000	Computers and Structures Inc.
	Autodyn	ANSYS, Inc.
Marc	MSC Software Corporation	
流体	FLUENT	ANSYS, Inc.
	CFX	ANSYS, Inc.
	STAR-CD	Siemenis
	STAR-CCM+	
	FloTHERM	Mentor Graphics
	Flow3D	Flow Science
	NUMECA	NUMECA
	Powerflow	Powerflow
	Xflow	Next Limit
	Cfd++	MetacomTech
FENSAP-ICE	NTI	
碰撞	LS-DYNA	LSTC
	Radioss	Altair
电磁	HFSS	ANSYS
	Maxwell	
	CST	CST
	Opera	Vector Fields
	Feko	EMSS

类别	软件名称	原厂商
多体动力学	ADAMS	MSC Software Corporation
	RecurDyn	FunctionBay
耐久	MSC.Fatigue	MSC Software Corporation
噪声	Sysnoise	LMS
	Actran	MSC Software Corporation
材料	Materials Studio	Accelrys
发动机	Ricardo	Ricardo
	Fire	AVL
	GT-Power	GammaTechnologies
水利	Mike21	DHI
多物理场	COMSOL	COMSOL
铸造	ModeFlow	Autodesk
	HyperXtrude	Altair
颗粒	Edem	DEM - Solutions
其他		

高性能计算常见应用特性分析

联想高性能计算系统集成和支持了多个领域的多种商业和开源的科学计算应用软件，包括商业应用软件如 MOLPRO、GAUSSIAN、Q-CHEM、MATLAB、VASP、TURBOMOLE、WIEN2K、SPARTAN、Materials Studio、Linda、LS-DYNA、FLUENT、CRYSTAL、ADF 等；开源应用软件如 GROMACS、GrADS、ABINIT、GMT、CASTEP、CPMD、DL_POLY、DOCK、GRAPES、MM5、NAMD、AutoDock、VMD、TINKER、OpenMX、VENUS、WRF 等。

1. MOLPRO

MOLPRO 是国际上广泛使用的专业级电子结构量化计算软件，MOLPRO 的特色是高精度计算，通过多参考 CI，耦合簇和有关的方法，广泛处理电子相关问题。直接积分局域电子相关方法使得同分子尺寸正相关的计算量大为减少，从而能够对更大的分子体系进行准确的从头计算。MOLPRO 基于 Linux 操作系统运行，程序主体是用 Fortran 90 语言编写，支持大多数常见的 MPP 超级计算机和计算集群。对于分布式内存系统如集群，由 GlobalArrays 并行工具集支持并行运行；对于共享内存系统，由 OpenMP 的方式实现了部分代码的并行化。需要注意的是，MOLPRO 的并行部分通讯代价较大，一般不建议基于普通以太网运行。

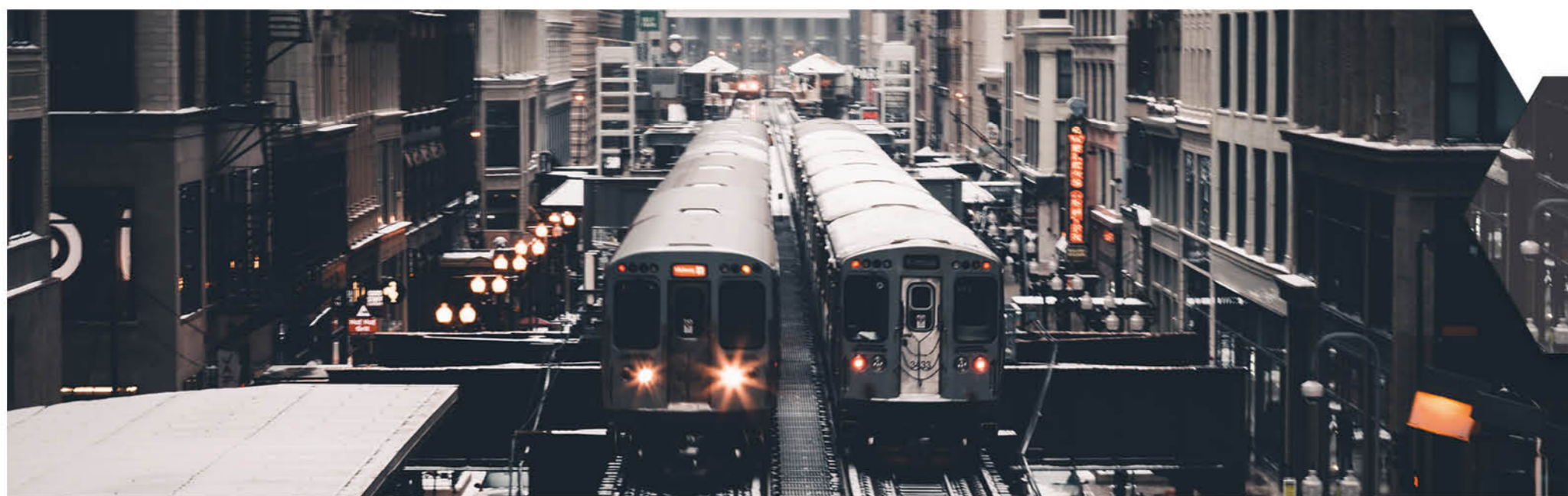
MOLPRO 中并行化了传统积分的 SCF、DFT、MRCI、MP2、LMP2、CCSD(T) 能量和 SCF、DFT 梯度计算，以及直接积分和密度拟合的 SCF、DFT、LMP2 和 LCCSD(T) 计算。在最新版本中还并行化了 DF-HF、DF-KS、DF-LCCSD(T)。

MOLPRO 目前的并行代码包括两种形态，一是运行于分布式内存的多处理器系统上，如计算集群，这种方式需要 GlobalArrays 并行工具的支持；另一种方式是运行在共享内存系统上，这部分代码采用 OpenMP 进行并行化。由于计算模型导致的并行任务间通讯负载较大的问题，MOLPRO 并行版在普通网络上难以表现出良好的加速比，通常建议其在专用高速网上运行。

MOLPRO 通常有三种编译模式：

- 1 串行模式：运行时只有单个实际执行体
- 2 MPP 模式：一个任务被分为多个执行实体，同时运行在多个处理器上
- 3 MPPX 模式：多个任务分配到多个处理器上同时执行，每个任务用一个处理器串行执行，例如，在梯度的有限差分求解中，多个构型计算在多个处理器上同时进行，处理不同的数据，属于 SPMD 的计算模式。就目前而言，这种模式只用于数值求一阶梯度和 Hessian

MOLPRO 的运行形态在编译时指定为上述三种模式之一，并且会在输出结果中显示。



2. GAUSSIAN

Gaussian 是目前最流行的量子化学综合软件包，用于研究许多化学领域的课题，例如取代基的影响，化学反应机理，势能曲面和激发能等。

Gaussian 用 Fortran 语言编写，从量子力学的基本原理出发，可计算能量、分子结构、分子体系的振动频率以及大量从这些基本计算方法中导出的分子性质。它能用于研究不同条件下的分子和反应，包括稳定的粒子和实验上难以观测的化合物，例如瞬时的反应中间物和过渡结构。

Gaussian 03 软件主要采用两种并行方式

- 对于 IBM 小型机或者 SGI 的 Origin 系列或者 Altix 系列的高性能机来说，采用基于 OpenMP 的并行方式。OpenMP 模式下的多个线程并发地运行在基于共享内存方式或者基于 NUMA 体系结构的高性能计算机上，以此提升程序的运算速度和运算规模。这种并行方式受到单节点的处理器数的限制。如果服务器的处理器数为 4，则 OpenMP 并行方式最多只能使 4 颗处理器并行工作；
- 对于分布式内存的集群系统，Gaussian 03 用 Linda 并行库来实现跨节点的并发执行。TCP-Linda 是专门为 Gaussian03 设计，用以实现其分布式内存系统下的并行。Gaussian 03 在提交任务的时候选择分布式内存方式还是共享内存方式。

Linda 模型定义了一个功能强大的逻辑存储器 (TS) 和在其上的一组核心操作 (in, out, read, eval)，它们能够方便地嵌入到不同的语言 (如, C, Fortran) 中而构成相应的并行语言 (C-Linda 和 Fortran-Linda 等)，该模型同时还支持动态程序设计和两种不同的编程风格 (Master/Slaver 和 Divide-and-Conquer)，为用户开发不同类型的应用程序提供了灵活的手段。

TS 是一个可被多个进程共享的、能同时存放数据和任务的数据箱。进程从 TS 中提取任务或数据进行计算，并将结果或生成的新任务放入 TS 中。并行执行的进程之间通过 TS 进行间接的通信和同步。



3. Q-CHEM

Q-CHEM 是由遍及全球的多个研究机构共同开发的从头计算量子化学软件包，它包含了当前流行的各种最先进量子化学理论方法和工具。Q-CHEM 的特点是与当前最先进的量子化学理论和计算方法结合的非常紧密。Q-CHEM 采用了全新的方法理论、最先进的算法和现代编程技术进行设计，系统地组合各种计算方法和工具，极大地提高了计算速度和准确性，能够以较高精度进行大分子体系的运算。

Q-CHEM 主要用作电子结构从头计算，可以对分子的基态和激发态进行第一定律计算。Q-CHEM 可以采用串行和并行两种方式运行。Q-CHEM 只的 HF、DFT 方法及它们的二阶导数计算。采用 MPI 编写，使用分布式模式并行运行。Q-CHEM 对解析和数值积分的计算采用的动态负载均衡的办法，并且在求解耦合扰动 SCF 方程中采用全局内存使用共享的方式，使得它能够利用并行计算机的分布内存进行大结构的频率计算。

4. MATLAB

MATLAB 是建立在向量、数组和矩阵基础上的一种分析和仿真工具软件包，自 1984 年由美国 MathWorks 公司推向市场以来，历经二十多年的发展与竞争，已成为国际公认的最优秀的工程应用开发环境。

MATLAB 包含各种能够进行常规运算的“工具箱”，如常用的矩阵代数运算、数组运算、方程求根、优化计算及函数求导积分符号运算等；同时还提供了编程计算的编程特性，通过编程可以解决一些复杂的工程问题；也可绘制二维、三维图形，输出结果可视化。

MATLAB 在 2004 年拥有了第一代的并行与分布式处理产品分布式工具箱 (Distributed Computing Tools)。分布式工具箱将待处理任务分配给多个处理器，使采用不同运算结构的 MATLAB 用户共享同一个处理器池的计算能力。在最新的版本中，MATLAB 能使跨节点运行的任务之间相互通信，做到真正的并行运算，此功能是通过 MPI 实现。分布式计算工具箱可以在多处理器计算环境中使用 MATLAB 解决计算、数据密集型问题。



5. VASP

VASP 是固体物理程序中非常稳定，性能优秀的软件之一，被广泛的用于固体性质的计算，一直是相关领域研究人员的关注热点。VASP 使用赝势和平面波基组，进行量子力学分子动力学计算，它基于 CASTEP 1989 版，由奥地利 Vienna 大学开发。

VASP 中采用基于有限温度下的局域密度近似（用自由能作为变量）的方法，对每一 MD 步骤用有效矩阵对角方案和有效 Pulay 混合求解瞬时电子基态。这些技术可以避免原始的 Car-Parrinello 方法（基于电子、离子运动方程同时积分的方法）存在的一切问题。离子和电子的相互作用采用超缓 Vanderbilt 赝势 (US-PP) 或投影扩充波 (PAW) 方法描述，可以在相当程度上减少过渡金属或第一行元素的每个原子所必需的平面波数量。同时，VASP 可以很容易地进行力与张量的计算，以达到把原子衰减到其瞬时基态的目的。VASP 的并行由 MPI 实现，可以在分布式内存环境上进行并行计算。

6. TURBOMOLE

TURBOMOLE 是一个强大的量子力学软件包，由德国卡尔斯鲁厄 (Klsruhe) 大学的 Ahlrichs 教授领导的理论化学研究小组开发而成。TURBOMOLE 经过了十多年的不断改进，已经成为化学、物理和工程人员的有力工具。

与众多同类软件不同，TURBOMOLE 着重解决如何用尽量短的时间和尽量少的内存需求，快速稳定地处理工业应用型的分子。特别是独有的 RI-DFT 方法，可以较其它大多数量子力学程序节省 10 倍的 CPU 时间。由于它使用了辅助函数（单位元分解近似使得 TURBOMOLE 非常适合于计算大分子或重复计算中等分子），TURBOMOLE 可以以串行和并行两种方式运行。并行代码用 MPI 编写。

7. WIEN2K

WIEN2K 采用密度泛函理论来计算固体的电子结构，是基于键结构计算最准确的方案——完全势能（线性）增广平面波 ((L)APW)+ 局域轨道 (lo) 方法。在密度泛函中可以使用局域（自旋）密度近似 (LDA) 或广义梯度近似 (GGA)。

WIEN2K 主要运行在 Unix/Linux 上，有串行和并行方式。

WIEN2K 程序的 I/O 操作较频繁，可能导致处理器的闲置状况，通常解决方案是扩充读写缓冲，减少对磁盘的访问。WIEN2K 中某些代码对处理器资源的消耗极大，其中一些已经用 MPI 方式加以并行化。WIEN2K 的并行模式分 K 点 (K point) 并行和细粒度 (fine grained) 并行，二者属于不同层次上的并行划分，在安装时的并行机选项中可以指定具体的并行方式。

8. SPARTAN

SPARTAN 是由美国 Wavefunction 公司研发的多功能化学软件，是化学领域强大的分子力学和量子力学计算程序。SPARTAN 具有优秀的图形显示功能和成熟的算法，为制药与生物技术机构在靶标识别与确立、先导物的选择与优化和工艺优化过程提供关键数据支持。

SPARTAN 采用的理论方法有从头 Hartree-Fock、密度泛函（局域密度近似，以及 BP, BLYP, EDF1, B3LYP）、MPn (MP2, MP3, MP4, LMP2)、精细的相关能计算 (CCSD, CCSD(T), OD, OD(T), G2, G3)、半经验方法 (MNDO, MNDO(d), AM1, PM3)、蒙特卡罗和分子力学。

SPARTAN 具有强大的图形和用户界面功能：从计算的 IR 数据绘制红外光谱图、从 Hartree-Fock 分子轨道理论绘制 ¹³C NMR 图、分子数据库及搜索、氢键显示、内反应坐标 (IRC) 的产生和追踪、SDF, TGF, MOL 各式的分子坐标文件的输入输出、动画速度的人为控制和键型显示等。

9. Materials Studio

Materials Studio 是 Accelrys 公司专为材料科学领域开发的新一代材料计算软件，用以帮助研究人员解决化学及材料工业中的许多重要问题。Materials Studio 软件采用 Client/Server 结构。Materials Studio 将高质量的材料模拟带入了个人电脑的时代，极大的降低了研究的门槛。

多种先进算法的采用使得 Materials Studio 在性质预测、聚合物建模和 X 射线衍射模拟等方面具有强大的功能。同时，Materials Studio 可以生成的高质量图片、能处理各种来源的图形、文本以及数据表格。

Materials Studio 采用客户端 / 服务端的工作模式，较小计算量的任务直接运行在客户端，而长时间或大运算量的计算则运行到服务器端。

Materials Studio 中许多模块都实现了并行化，其中 Dmol3 模块是世界上最快的从头计算代码之一，也已成为制药业的一个重要的工具。而 CASTEP 模块的并行版本则可以模拟包含数百原子的大系统。

Materials Studio 的所有模块都是通过第三方队列软支持串行工作提交，比如主流的 OpenPbs 和 LSF。对于 Linux 平台，还支持跨节点的 MPI 并行方式。

10. Linda

Linda 是美国耶鲁大学与科学计算协会共同研制的用于实现并行程序设计的、与机器无关的程序环境。Linda 通过增加一些函数对传统的程序设计语言进行扩充（如 C、Fortran 等），使其能实现并行程序的设计。将 Linda 映射到各计算语言中，就形成了可进行并行计算的程序语言 C-Linda、Fortran-Linda。Linda 可以运行在共享和分布式内存系统上。

Linda 运行在分布存储多处理机上，引入了虚拟共享存储概念，通过在各处理机上实现一个虚拟的共享存储器，将分布存储多处理机模拟成为基于共享存储器的多处理机，从而支持共享存储编程方式，提供比消息传递方式更方便的并行编程模式。

Linda 的虚拟共享存储器称为元组空间（Tuple Space）。元组空间由一组有序的元组（tuple）组成，元组的每个域都包含有实际的数据。元组空间是相联存储器，元组的标识与选择是通过域值匹配，而不是通常采用的地址选择方法。

Linda 提供了以下 4 种对元组的基本操作：



out: 将数据放入元组空间，整个操作是顺序进行的



eval: 功能同 out, 但它是并行执行的



in: 从元组空间中选择匹配的数据，并将数据从元组空间中删除



rd: 功能同 in, 但它不将数据从元组空间中删除

当两个进程需要交换数据时，不是采用消息传递来直接通信，而是通过读写元组空间来完成（即共享内存系统的并行程序设计）。例如，如果 A 进程需要向 B 进程传递数据，则需要完成以下的操作：A 向 Tuple 空间写一个数据，B 在 Tuple 空间中读取需要的数据。Linda 在编译系统和运行系统上作了很多优化工作，使用 Linda 编写的应用程序在效率上能够接近用传统消息传递方式编写的程序。

TCP-Linda 是专门为 Gaussian03 设计，实现 Gaussian03 在分布式内存系统上并行的必须程序，使 Gaussian03 能突破单节点的限制，充分利用可用的计算资源，对于极耗资源的量子化学计算来说，具有相当的实用意义。

11. LS-DYNA

LS-DYNA 最初是由 John O. Hallquist 博士在美国劳伦斯·利弗摩尔国家实验室开发。LS-DYNA 最早实践了显式有限元理论，当代所有的显式求解程序都源于 LS-DYNA。

LS-DYNA 以拉格朗日（Lagrange）算法为主，同时有欧拉（Euler）求解技术；以显式求解为主，兼有隐式求解功能；以结构分析为主，兼有热分析、流体 - 结构耦合功能；以非线性动力分析为主，兼有静力分析功能（如动力分析前的预应力计算和薄板冲压成形后的回弹计算）；特别适合求解各种结构的高速碰撞、爆炸和金属成型等高度非线性瞬态动力学问题。

LS-DYNA 主要应用在如下领域：

- 汽车工业：碰撞分析、乘员约束系统及气囊设计、乘客被动安全、部件加工、轮胎在积水路面排水性和动平衡分析；
- 国防与军工：内弹道及终点弹道效应、装甲和反装甲系统、穿甲弹与破甲弹设计、战斗部结构设计及起爆参数 / 杀伤元素优化、冲击波传播、空气 / 水 / 土壤与容器中爆炸、爆炸容器的设计优化分析、激光束 / 定向能等多种动态载荷加载模拟分析、爆炸对建筑物等设施结构的破坏分析等；
- 电子工业：跌落冲击分析、包装设计、热分析、电子封装、电子产品抗冲击性设计；
- 航空航天：鸟撞、叶片包容性设计、异物损伤分析、飞机结构冲击动力分析、碰撞、坠毁、冲击爆炸及动态载荷、特种复合材料设计、制造工艺仿真及优化；
- 建筑业：地震安全、混凝土结构、爆破拆除、公路桥梁设计；
- 石油工业：液体晃动、完井射孔、管道设计、爆炸切割、事故模拟、海上平台设计。

LS-DYNA 具有良好的并行设计，能够支持分布式及共享内存方式的并行。LS-DYNA 能够支持网格计算（Grid Computing），将多台计算节点组合成多个网格点以实现协同计算。

在用户模型定义准确、单元规模和处理器数目匹配的情况下，LS-DYNA 的性能加速比和处理器数目基本呈线性关系。

LS-DYNA 得到了主流作业调度软件 Platform LSF 的有力支持。在共享内存和分布式内存系统上，LS-DYNA 作业都具有检查点（checkpoint）和重启功能。



12. FLUENT

FLUENT 软件最初原发于英国谢菲尔德大学 (Sheffield University)，现已成为一款商用 CFD 软件。FLUENT 占有全球商用 CFD 软件领域第一的市场份额，在航空航天、旋转机械、航海、石油化工、汽车、能源、计算机 / 电子、材料、冶金、生物、医药等领域有广泛的应用，美国宇航局 (NASA)、美国国防部 (DOD)、美国能源部 (DOE)、ABB 公司、西屋公司、波音公司、福特公司、三菱公司、IBM 公司、杜邦公司及各大汽车厂商等都是 FLUENT 的用户。

FLUENT 主要用于计算流体流动和传热问题。其提供的非结构网格生成程序，对相对复杂的几何结构网格生成非常有效。FLUENT 具有网格自适应能力，能高效地精确求解大梯度的流场。

FLUENT 采用的是客户端 / 服务器 (Client/Server) 设计模式。用户在客户端进行模拟问题的设定和数据输入，然后将计算任务提交服务器；服务器进行模拟计算并将结果传回客户端。

FLUENT 的并行计算主要是在服务器端进行的。FLUENT 并行运算由一个主机进程和多个节点进程组成。节点进程的数量和系统的处理器数量有关，计算任务均由节点进程完成。FLUENT 能支持共享式和分布式内存系统上的并行计算。

在网格处理技术方面，FLUENT 在并行环境下可以实现网格的自动分区并动态地平衡计算负载。

FLUENT 的并行效率和互连网络有很大关系。核心的线性方程组求解过程产生频繁的信息传递和交换，因而使用如 InfiniBand 等高速网能有效地提高程序的扩展性。ISGI、HP 和 Intel 等多种优化 MPI 接口也对 FLUENT 的并行性能有非常正面的影响。此外，FLUENT 中不同算法在共享式或者分布式系统上也会表现出一定的性能落差。

13. CRYSTAL

CRYSTAL 是研究晶态固体的最流程序之一，并且是第一个公开发布的程序。CRYSTAL 程序密度泛函或各种混合近似方法，计算周期体系的电子结构。周期体系的 Bloch 函数作为原子中心 Gaussian 函数的线性组合展开。采用强大的屏蔽技术研究实空间区域。

CRYSTAL 可以用于研究分子，多聚物，表面及晶体的物理和电磁性质，使用全电子基组或者价基组进行限制性闭壳层、限制性开壳层或者非限制性计算。可以自动操作空间对称性并对分子提供点群对称性和平移对称性。

CRYSTAL 具有如下功能：

- 哈密顿量计算，求解基于数值求积分方案的数值网格并进行基于数值方案的密度拟合；
- 能量导数计算；
- 提供单点能计算和自动几何优化等计算类型；
- 支持多种基组：Gaussian 型基组、用户自定义赝势基组、Hay-Wadt 大核和小核基组等；
- 独有的周期体系；
- 多种波函特性与分析：能带结构、态密度、全电子电荷密度、电场梯度、结构因子、静电势及其导数等；
- CRYSTAL 已经实现了代码的并行化，以 MPI 实现，能够在分布式内存系统上进行并行计算。

14. ADF

ADF 是一个通用密度泛函程序包，基于密度泛函理论 (DFT)，主要应用于量子化学计算。广泛应用于医药化学、材料学等研究及应用领域，尤其是同类和异类催化、无机化学、重元素化学、生物化学及多种光谱学。

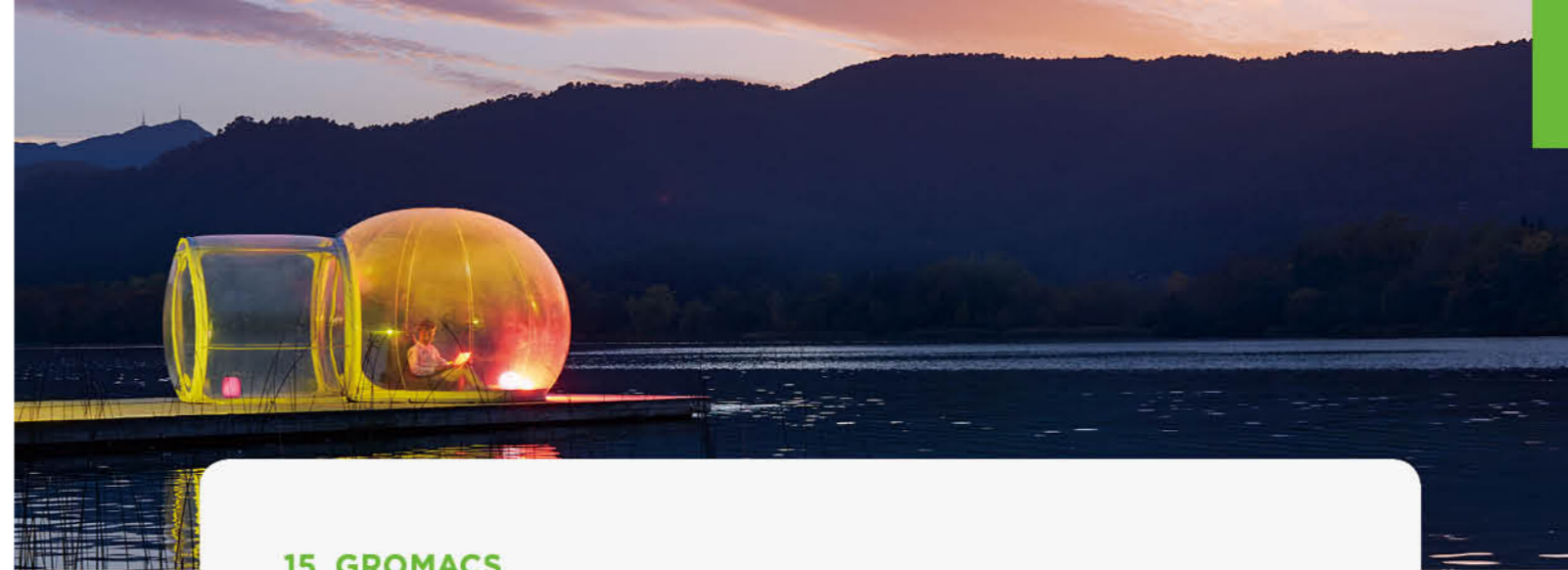
ADF 的优势主要体现在计算速度和对过渡金属的处理上面。主要具有以下功能：几何优化、过渡态、反应路径及红外频率的表征及计算；分子性能测试的分析与表征；模拟溶剂、蛋白质及其它物化环境；强大的图形用户界面；进行聚合物、异类催化剂及大量结晶的研究。

ADF 主要有如下特色：

- 精度方面：精确的、可调节的数值积分方案；应用于整个周期表的，最高到四 zeta 的 Slater 型轨道；无需赝势或 ECP 近似；对过渡金属化合物稳定的 SCF 收敛性；现代的交流相关能泛函和势能泛函。
- 独有的 slater 轨道：采用 Slater 型基组 (STO)；正确反映原子轨道的尖峰区和渐进行为；BAND 采用数值的轨道和 STO 轨道。

ADF 以单程序多数据 (SPMD) 的模式实现并行计算，在处理器中分配格点和原子对，然后对其执行相同的计算。

ADF 的并行用消息传递机制实现，基于 MPI 和 PVM 开发了专用的并行库，极大地提高了通讯的效率。通常情况下，高达 90% 以上的 CPU 时间都被用来进行数值积分。



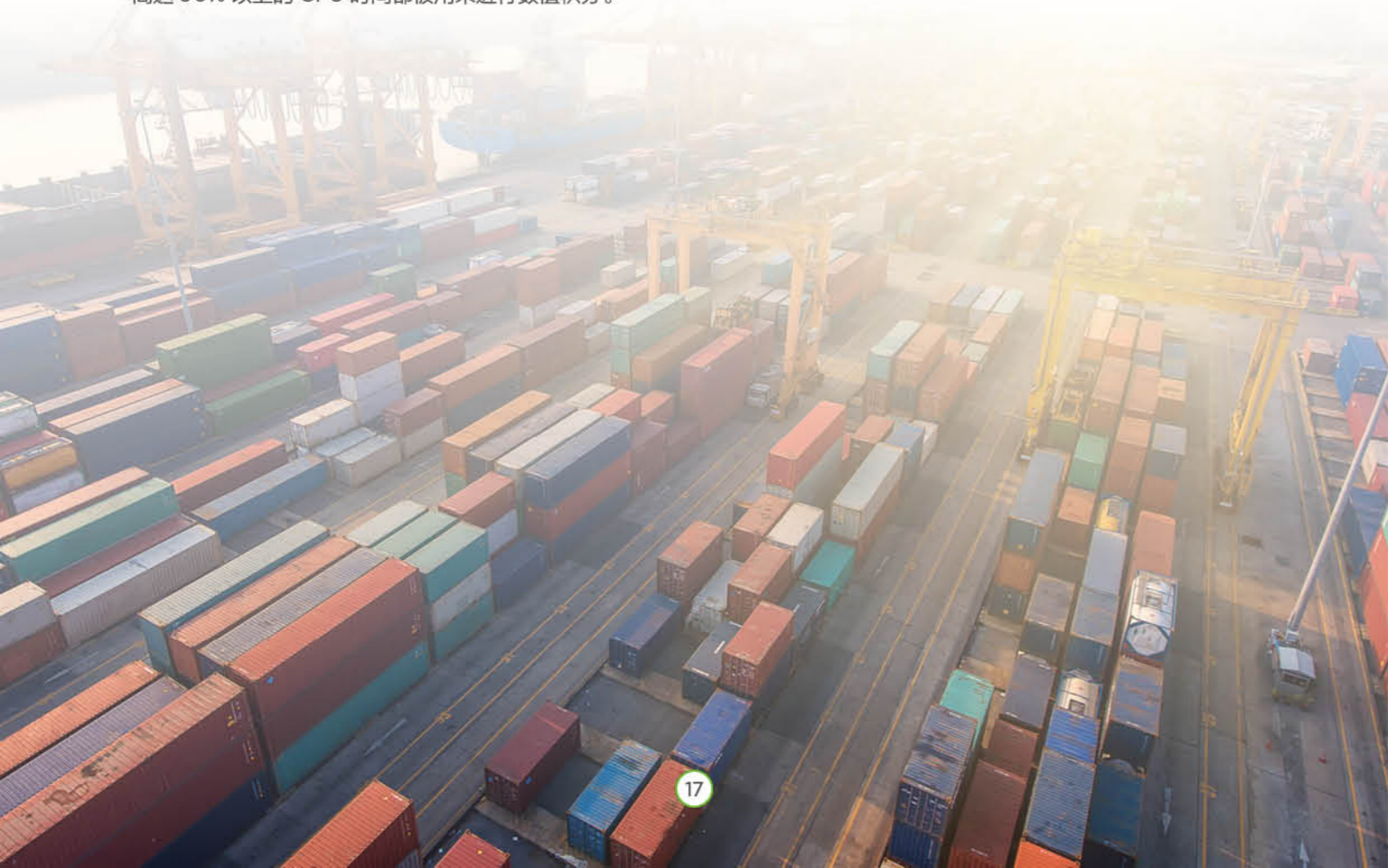
15. GROMACS

GROMACS (<http://www.gromacs.org/download/index.php>) 是由 Groningen 大学开发一个分子动力学模拟包，在基于 Fortran77 的 GROMOS 的基础上，加入了 C 语言和大量的优化代码。GROMACS 支持所有的当代分子动力学应用算法，其一个著名的用途是进行快速准确的蛋白质模拟。

GROMACS 具有如下特点：

- 性能远高于同类软件：将最内层循环的针对不同体系结构进行优化；
- 交互界面友好：提供清晰的拓扑和参数文件；进行及时的进度提示；能用 gzip 读取压缩文件；提供简单实用的命令行控制方式；
- 数据文件独立于硬件体系，无须区分大小端 (big/little endian)；版本间数据文件格式兼容；
- 能够以并行方式运行，并行代码用 MPI 编写而成；
- 精巧的算法保证对性能调节不会影响计算过程和结果的准确性；
- 能够自动的构建蛋白质分子拓扑；
- 正在向量子化学和生物信息学进行扩展。

GROMACS 代码中对部分算法进行了并行化。例如对 MD (Molecular Dynamics) 算法，对数据进行一维的分割，各计算点只和相邻点发生数据通讯，这样可以使并行代码编写简单化，而且还能将琐碎的通讯合成大数据量的通讯，由此减少通讯的额外开销。除 MD 算法外，GROMACS 还对 FFT 和排序算法进行了并行化。



16. GrADS

GrADS (<http://www.iges.org/grads/>) 是用于气象数据处理和显示的交互式工具，通过其提供的集成环境可以容易地对数据进行读取、加工、图形化显示和打印输出，同时具有分析功能强，坐标丰富，显示速度快等优点，因此已经成为国内外气象数据显示方面通用的标准图形环境之一。

GrADS 既可以处理站点数据，也可以处理格点数据。GrADS 对数据的处理使用四维数据环境，包括了三维空间和时间。在 GrADS 中，原始数据和元数据分别存储在不同的文件中。原始数据文件保持的是纯数据，没有空间和时间标识。元数据文件称为数据描述文件，包含了对原始数据文件的描述以及如何获取等信息。所有数据集通过数据描述文件被放置到四维空间中。GrADS 可以识别二进制的格式，也可以采用 GRIB, NetCDF 或 HDF-SDS 等通用的数据交换格式。

用户可以在交换环境下，通过在命令行输入类似 Fortran 语句的表达式进行操作。可以将键入的命令记录到一个文本文件中，通过 exec 命令批处理执行。同时 GrADS 提供了一种脚本语言作为编程界面，解释器就是 GrADS 本身，由 run 命令控制执行。该语言提供了变量、流控制、输入输出等高级语言功能，用户可以容易地以编程方式处理复杂的分析和图形显示。除了能够批量方式运行 GrADS 处理冗长的数据外，使用脚本还可以让用户显示按钮或下拉菜单，并根据用户选择执行相应的动作。

GrADS 提供了丰富的内建函数，用户也可以借助任何编程语言添加自己的函数。GrADS 支持多种图形化显示方式，并可以 postscript 或其他图形格式输出。

GrADS 目前版本为 1.8s11 和 1.9b4，支持包括 Linux, Mac, IRIX, AIX, Windows 在内的大多数主流操作系统。



17. ABINIT

ABINIT (<http://www.abinit.org/>) 是由 Xavier Gonze 所领导、世界上众多电子结构计算研究人员集体开发的平面赝势法电子结构计算程序包。

程序包基于密度泛函理论 (Density Functional Theory, DFT)，采用赝势和平面波基矢的方法来处理由电子和核所组成的体系，它可以计算体系的总能、电荷密度以及电子结构。

ABINIT 也可以按 H-F 力和压力来优化体系的几何结构，或进行根据这些力进行分子动力学模拟或计算得到动力学矩阵、Born 有效电荷及介电张量。在密度泛函理论的框架下可以计算分子体系的激发态，或基于多体微扰论 (GW 近似) 来处理激发态。除了主要计算模块外，程序包也提供了一些不同的工具模块用来处理计算结果和数据。

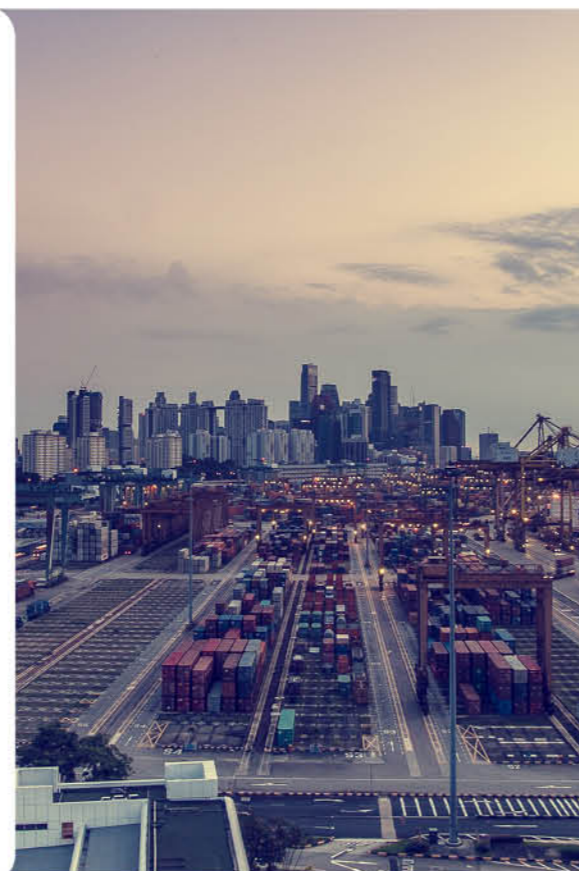
ABINIT 具有如下计算功能：

- 通常的电子结构计算 (晶格参数、结合能、体弹性模量、能带结构、电子态密度和电荷密度分布)；
- 分子动力学模拟；
- 晶体磁性和磁结构的计算；
- 基于线性响应或密度泛函微扰理论计算声子色散曲线、声子态密度和热力学量，介电性质、Bohr 有效电荷、压电系数和弹性常数、电 - 声耦合常数；
- 计算线性和非线性的光学性质；
- 采用 GW 近似对半导体的 LDA 带隙进行修正；
- 基于含时密度泛函理论计算体系的激发态的性质。

18. GMT

GMT (<http://www.soest.hawaii.edu/gmt/>) 是大约 60 多个 UNIX/LINUX 工具的集合。它使得用户可以处理二维及三维的数据集 (包括 filtering, trend fitting, gridding, 投影等)。GMT 支持 30 多种常用的投影及线性、对数和指数拉伸, 并且支持诸如海岸线、河流及行政界线等。

GMT 系统最早由哥伦比亚大学的 Wessel 和 Smith 开发, 全球大约有 6000 多位的使用者。早期是在 UNIX 系统上开发, 可以和其它许多 UNIX 的工具一起使用。GMT 主要是在指令模式下执行。GMT 是免费软件, 数据输出的主要格式是 PS(postscript file), 因此几乎在各种平台上都可支持。



19. BLAST

BLAST (<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/BLAST/>) 是基于局部序列排比的常用数据库搜索工具, 建立在严格的统计学的基础之上的, 它集中于发现具有较高的相似性的局部比对。

BLAST 具有如下特点:

- 使用方便、功能齐全;
- 速度快、结果可信度高;
- 配套数据库不断更新;
- 提供 web 上的免费服务;
- BLAST 算法本身具有良好的并行性, 其并行版基于 MPI。

20. CASTEP

CASTEP (<http://www.tcm.phy.cam.ac.uk/castep/index.html>) 是由剑桥大学凝聚态理论研究组开发的一套先进的量子力学程序, 可以进行化学和材料科学方面的研究。CASTEP 一个基于密度泛函方法的从头算量子力学程序, 可以模拟固体、界面和表面的性质, 适用于多种材料体系, 包括陶瓷、半导体和金属等。

基于总能量赝势方法, CASTEP 根据系统中原子的类型和数目来进行各种性质的预测。CASTEP 使用的平面波赝势技术已经过实践的考验, 每年发表的数百篇科学文献充分说明了其在许多领域中的成功应用。

CASTEP 主要具有如下功能:

- 基于总能量赝势方法, 预测出包括晶格常数、几何密度、弹性常数、能带、态密度、电荷密度、波函数以及光学性质在内的各种性质;
- 电子的交换和相关效应采用局域密度近似 (LDA) 和广义密度近似 (GGA);
- 电子波函数用平面波基组扩展 (基组数由 Ecut-off 确定);
- 分子轨道波函数采用原子轨道的线性组合 (LCAO) 构成。

21. CPMD

CPMD (<http://www.cpmc.org/>) 是以 CPMD (Car-Parrinello Molecular Dynamics) 方法为基本思想所编写, 是 1993 年 IBM 瑞士研究所的一个计算物理研究计划的产物。

CPMD 是一种量子化学计算方法, 将分子动力学和密度泛函有机结合, 最大限度的发挥了密度泛函的优势。CPMD 是从头计算法的延伸, 在精确模拟和简化模型上有独特的优势。CPMD 主要应用于固体和液体, 静力学和动力学, 固态物理和固态化学。

CPMD 主要有如下特点和功能:

- 孤立体系和周期边界体系的计算;
- 线性响应函数计算, NMR, Raman 和 IR;
- 激发态的分子动力学;
- 对分子和晶体使用对称性;
- TDDFT 计算激发态;
- QM/MM 方法;
- 波函数优化;
- 多电子特性;
- OpenMP 并行化。
- 几何优化与过渡态寻找;
- 周期体系的偶极矩;
- 恒定能量, 恒温, 恒压的分子动力学;
- 路径积分分子动力学;