

学校编码: 10384
学号: 2322014115333

分类号_密级
UDC

厦 门 大 学

硕 士 学 位 论 文

基于 CUDA 并行粒子群的 Pt-Pd 合金纳米粒子结构优化研究

Study on Structure Optimization of Pt-Pd Alloy
Nanoparticles with CUDA-based Parallel Particle Swarm
Optimization Algorithm

李泽鹏

指导教师姓名: 刘瞰东 教授

专 业 名 称: 系统工程

论文提交日期:

论文答辩时间:

学位授予日期:

答辩委员会主席: _____

评 阅 人: _____

2017 年 月

厦门大学学位论文原创性声明

本人呈交的学位论文是本人在导师指导下,独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考其他个人或集体已经发表的研究成果,均在文中以适当方式明确标明,并符合法律规范和《厦门大学研究生学术活动规范(试行)》。

另外,该学位论文为()课题(组)的研究成果,获得()课题(组)经费或实验室的资助,在()实验室完成。(请在以上括号内填写课题或课题组负责人或实验室名称,未有此项声明内容的,可以不作特别声明。)

声明人(签名):

年 月 日

厦门大学博硕士学位论文摘要库

厦门大学学位论文著作权使用声明

本人同意厦门大学根据《中华人民共和国学位条例暂行实施办法》等规定保留和使用此学位论文，并向主管部门或其指定机构送交学位论文（包括纸质版和电子版），允许学位论文进入厦门大学图书馆及其数据库被查阅、借阅。本人同意厦门大学将学位论文加入全国博士、硕士学位论文共建单位数据库进行检索，将学位论文的标题和摘要汇编出版，采用影印、缩印或者其它方式合理复制学位论文。

本学位论文属于：

1. 经厦门大学保密委员会审查核定的保密学位论文，于 年 月 日解密，解密后适用上述授权。

2. 不保密，适用上述授权。

（请在以上相应括号内打“√”或填上相应内容。保密学位论文应是已经厦门大学保密委员会审定过的学位论文，未经厦门大学保密委员会审定的学位论文均为公开学位论文。此声明栏不填写的，默认为公开学位论文，均适用上述授权。）

声明人（签名）：

年 月 日

厦门大学博硕士学位论文摘要库

摘要

Pt-Pd 合金纳米粒子在催化性能和光学性能上有着其他合金纳米粒子不可比拟的优势, 因此对其进行全面的研究具有重要意义。目前, 有很多智能算法应用于求解合金纳米粒子结构, 例如粒子群算法和差分进化算法。在原子规模较小时, 这些智能算法均能取得较为满意的结果, 但随着原子规模的增加, 计算量的大幅度提高, 算法计算时间过长是亟待解决的问题。本文针对该问题提出了一种基于 CUDA 的并行粒子群算法。

本文主要研究内容包括:

本文采用 QSC 多体势描述 Pt-Pd 合金纳米粒子中原子间相互作用, 以该势能函数的能量最小值作为求解指标, 参考了改进粒子群算法在该问题上的求解应用, 并提出了一种基于种群的粗粒度和基于原子的细粒度混合并行算法, 结合问题具体特征, 设计了种群-线程块二维编码方式, 使得算法具有良好的扩展性, 同时结合了 GPU 的硬件特性, 在保证运算效率最优的前提下选择了合理的最佳线程数, 并采用合并访问技术提高了数据传输的速度, 进一步提高运算效率。

为了验证该算法的有效性, 本文对不同尺寸的 Pt: Pd=1: 1 比例的合金纳米粒子进行求解, 同时采用了三个不同的指标进行验证, 分别是等规模等迭代次数、等规模等求解精度、等规模等终止条件。同时我们也对算法的收敛性和稳定性进行了多次独立重复实验验证。实验结果表明本文所提出的基于 CUDA 的并行粒子群算法对合金纳米粒子结构优化的求解是有效的、稳定的。

本文所提出的基于 CUDA 并行粒子群算法对大规模原子的合金纳米粒子结构优化有一定指导意义, 对其他智能算法的并行化也具备参考作用。

关键词: 并行粒子群、纳米粒子、加速比

Abstract

The structure research of Pt-Pd based nanoparticles has been a hot issue in material fields because of its extraordinary catalytic and optical potential. There are lots of intelligent algorithm involved in studying the stable structure of Pt-Pd based nano-particles, such as particle swarm optimization(PSO), differential evolutionary algorithm. Most of them perform well in optimization with small atomic scale. However, their computational efficiency decrease with the increasing particles size as computation greatly improve. Thus, in this paper, we propose a CUDA based parallel PSO to improve the performance of traditional PSO.

In our simulations, for the above Pt-Pd based particles, the Q-SC potential is adopted to describe the interactions between atoms. The Q-SC potential provides a proper basic property model for nanocrystals, leading to an accurate prediction of the crystals' structure. For the problem, parameters are optimized to describe the surface, cohesive, and vacancy formation energies and other parameters for better simulating the metallic nanocrystal structures. Moreover, we propose a CUDA based parallel PSO (GPSO) for calculating the stable structure of Pt-Pd cluster. In the algorithm, two dimensional coding method of population thread block is designed which could be adopt in other works. And combined with the hardware characteristics of GPU, the GPSO could select optimal threads for computing while ensuring the best operation efficiency. And the data access speed of GPSO is improved by using the combined access technology.

To validate the proposed GPSO, we simulate the stable structure of Pt-Pd particles for different size. And we adopt three index for validation: equal number of iterations、equal scale precision and equal scale termination condition. Moreover, the convergence and stability of the algorithm are examined. Simulation results show that, our proposed GPSO is effective and stable to optimize the structure of alloy nanoparticles.

The research results have practical significance and application value to improve

the efficiency of structure study of nanoparticles.

Keyword: parallel PSO, nanoparticles, accelerating ratio

厦门大学博硕士学位论文摘要库

目录

摘要	I
Abstract	II
第一章 绪论	1
1.1 背景	1
1.2 国内外研究现状	3
1.3 研究计划与结构安排	7
第二章 系统建模与 CUDA 并行计算	8
2.1 结构预测模型	8
2.1.1 势能函数介绍	8
2.1.2 QSC 势能函数	9
2.2 GPU 概述	10
2.2.1 GPU 发展简介	11
2.2.2 GPU 和 CPU 的区别	11
2.2.3 GPU 的特点	12
2.3 CUDA 概述	13
2.3.1 CUDA 的软件体系	13
2.3.2 CUDA 的编程模型	14
2.3.3 CUDA 的存储层次	16

2.3.4 CUDA 的应用领域	18
2.4 并行算法	18
2.4.1 并行算法的实现策略	19
2.4.2 并行算法的设计过程	19
2.5 本章小结	20
第三章 基于 CUDA 的并行粒子群算法	22
3.1 基于 CPU 的改进粒子群算法	23
3.1.1 粒子群算法	23
3.1.2 改进粒子群算法	24
3.2 可行性分析	27
3.3 CUDA 环境搭建	28
3.4 基于种群的粗粒度与原子的细粒度混合并行粒子群算法	31
3.4.1 CPSO 算法并行化	31
3.4.2 算法主要步骤	33
3.5 关键参数设计	35
3.5.1 全局内存合并访问	35
3.5.2 种群与线程块的设计	36
3.5.3 最佳线程数设计	36
3.5.4 并行规约算法的使用	37

3.5.5 线程通信的设计	38
3.6 本章小结	38
第四章 实验结果分析	40
4.1 运行时间与加速比	40
4.1.1 等规模、等迭代次数的加速比.....	41
4.1.2 等规模、等求解精度的加速比.....	42
4.1.3 等规模、等终止条件的加速比.....	42
4.2 算法的收敛性与稳定性分析.....	43
4.2.1 算法的收敛性分析	43
4.2.2 算法的稳定性分析	44
4.3 本章小结	46
第五章 总结与展望	47
5.1 工作总结	47
5.2 未来展望	47
参考文献	49
攻读硕士学位期间发表的论文.....	53
致谢	55

Contents

Abstract in Chinese	I
Abstract in English	II
Chapter 1 Introduction	1
1.1 Introduction	1
1.2 Research Status	3
1.3 Research Plan and Paper Structure	7
Chapter 2 System Model and CUDA	8
2.1 Structure Model	8
2.1.1 Potential Energy Function.....	8
2.1.2 QSC potential.....	9
2.2 Introduction of GPU	10
2.2.1 Development of GPU.....	11
2.2.2 Comparison of GPU and CPU	11
2.2.3 Advantages of GPU.....	12
2.3 Introduction of CUDA	13
2.3.1 Software Architecture	13
2.3.2 Programming Model	14
2.3.3 Storage Hierarchy	16
2.3.4 Application Area	18
2.4 Parallel Algorithm	18
2.4.1 Parallel algorithm implementation strategy	18
2.4.2 Parallel algorithm design process	19
2.5 Brief summary	20
Chapter 3 Parallel particle swarm algorithm based on CUDA	22
3.1 Improved PSO based on CPU	23

3.1.1 Particle Swarm Optimization.....	23
3.1.2 Improved Particle Swarm Optimization	24
3.2 Parallelism analysis.....	27
3.3 Environment Construction	28
3.4 Hybrid Parallel Algorithms.....	31
3.4.1 CPSO algorithm parallelization	31
3.4.2 Main Steps of Algorithm.....	32
3.5 Key parameter design.....	35
3.5.1 Merge Access of Global Memory	35
3.5.2 Population and Block Design.....	36
3.5.3 Best number of threads designed	36
3.5.4 Parallel Reduction.....	37
3.5.5 Thread Communication	38
3.6 Brief summary.....	39
Chapter 4 Analysis of experimental results.....	40
4.1 Running time and acceleration ratio.....	40
4.1.1 Equal Scale and Iterations.....	40
4.1.2 Equal Scale and Accuracy.....	41
4.1.3 Equal Scale and Termination	42
4.2 Analysis of Astringency and Stability.....	43
4.2.1 Analysis of Astringency	43
4.2.2 Analysis of Stability	44
4.3 Brief summary.....	46
Chapter 5 Conclusions and Future Works	47
5.1 Conclusions.....	47
5.2 Future Works.....	47
References	49
Published and finished papers during the study period	53

Acknowledgements54

厦门大学博硕士学位论文摘要库

第一章 绪论

本章介绍论文研究背景及其工作成果在实际应用中的意义。包括研究背景、国内外研究现状、研究计划与文章结构。下面进行详细介绍。

1.1 背景

近年来，将多元金属纳米粒子引进材料制备流程作为制备催化剂的研究方向，正在受到越来越多学者的关注。金属纳米粒子通过其协同效应，大大提高了电化学反应的催化活性，降低材料制备成本，成为材料化学的研究热点。

通常来讲，我们所指的纳米粒子是指颗粒尺寸在 1-100nm 之间的纳米量级超细微粒。形象点来讲，纳米粒子是大于原子团簇小于微粉的超微小粒子、比常见的细菌病毒结构要小几十倍、比红血球要小 100 多倍。日本名古屋大学上天良二教授给纳米微粒下过这样的定义：用电子显微镜（TEM）才能看到的微粒被称为纳米微粒^[1]。由于与常规物质相比，纳米粒子本身的结构更加复杂、原子组合形式与传统物质大不相同，在一定条件下引起了颗粒性质的质变，从而产生了许多独特的性质。例如，当纳米粒子的尺寸小于或等于光波的波长时，将会出现小尺寸效应，可以用于制作磁性信用卡、磁性钥匙、隐形飞机等^[2]。此外，纳米粒子位于表面的原子占据总原子数的大部分，这种小尺寸大表面的性质我们称为表面与界面效应，它是的纳米粒子具有更高的活性，当遇见其他原子时，有较强的结合倾向^[3]。其它的诸如量子尺寸效应、宏观量子隧道效应^[4-5]，让纳米金属粒子在在催化、滤光、光吸收、医药、磁介质及新材料等领域有着广阔的应用前景^[6]。本文关注纳米金属粒子的催化活性，通过基于 CUDA 的并行粒子群算法对其结构性质进行研究，试图更全面了解其催化特性。

使用金属纳米粒子作为材料制备电化学反应催化剂的优点在许多文献中均有记载^[7-8]。目前，关于纳米粒子催化剂的研究主要有三种类型：（1）直接使用纳米粒子作为高分子高聚物氧化还原及合成过程的催化剂，能够大大提高催化效果，节省消耗，如铂、银等；（2）将纳米粒子作为添加剂掺入液体和气体燃料中，可加强发动机动力，提高效率；（3）在某些高温实验中，通过加入少量 Al 的纳米粒子，可以数倍提高燃烧效率，更好的控制燃烧温度。Au-Pd 合金纳米粒

子在甲酸氧化、乙烯氧化和乙烯乙酰氧基制乙烯基乙酸酯制备中的应用。此外，因为不满足于单金属的纳米粒子催化效率，研究者试图在单金属纳米粒子中掺入少量廉价金属粒子，期望改变纳米粒子特效，达到更好的催化效应，我们称之为合金纳米粒子。合金纳米粒子指的是包含两种及以上金属元素的纳米粒子，随着组成元素、粒子构型、表面偏聚和原子分布等因素的不同，在光学、电子以及催化性能上展现出区别于单纳米粒子的独特性能^[9-10]。合金纳米粒子催化剂通常包括一种具有高催化活性的初级金属和一种易获取的辅助金属，可以在材料制备过程中提高催化活性以及防止中毒问题，能有效降低催化成本，解决其资源匮乏和价格高昂的问题^[11]。目前，大多数工作集中于研究双金属合金纳米粒子的催化活性，及其在化工工业、制造业中的实际应用。例如，2013年，Sun 课题组发现 Pt 基双金属 Pt-Co 和 Pt-Fe 作为氧化还原反应的电极材料，有着极大的催化活性^[12]。此外，Au-Pd 合金纳米粒子作为催化剂，在甲酸氧化、乙烯氧化和乙烯乙酰氧基制乙烯基乙酸酯等工业应用方面也展示出良好的应用前景^[13-14] 作为一类重要的金属催化剂材料，Pt 基金属催化剂在化学科学和化工领域有着重要和广泛的应用^[15]。贵金属 Pt 因其优异的反应性和稳定性，已被公认为是工业应用领域的最佳催化剂之一^[16-17]。金属钯 (Pd) 是地壳中含量稀少的金属，其作为催化剂具有活性高、催化效率高、反应条件温和等优点，在天然产物合成、医药生产和石油化工领域有着广泛的应用。Pt-Pd 双合金纳米粒子具有比其它合金纳米粒子更好的催化性能和更强的选择性。Pt-Pd 双合金纳米粒子的结构特性，及其催化活性的研究具有更加广泛的前景。

由于原子结构、原子比例以及结构内部的原子分布等因素对合金纳米粒子的催化活性和选择性有很大影响。此外，由于纳米合金粒子的表面效应，大多数原子集中于材料表面，而化学催化反应多发生在纳米粒子的表面，故研究表面原子的分布对于研究纳米粒子的催化性能具有十分重要意义。另一方面，很多的催化反应都是在高温条件下发生，而随着温度的变化，纳米粒子的构型、稳定性以及原子排布等等也可能发生变化，这些都会对合金纳米粒子的催化性能产生影响，故纳米粒子的稳定结构也是纳米粒子性能分析的重要研究点。目前针对合金纳米粒子稳定结构和原子分布的研究，大多使用传统的依然是材料制备实验验证方法，对纳米粒子进行观察、试验研究。这种方法成本高昂，实验过程复杂、存

Degree papers are in the "[Xiamen University Electronic Theses and Dissertations Database](#)". Full texts are available in the following ways:

1. If your library is a CALIS member libraries, please log on <http://etd.calis.edu.cn/> and submit requests online, or consult the interlibrary loan department in your library.
2. For users of non-CALIS member libraries, please mail to etd@xmu.edu.cn for delivery details.

厦门大学博硕士论文摘要库