

# 启发式指导下的本科生-研究生协同教学模式：以并行编程解决科学问题为例

张丽丽 崔永鑫 黄以能 王亚娇 安小冬 张兴隆  
伊犁师范大学 物理科学与技术学院, 新疆 伊宁 835000

**[摘要]** 本文提出了一种启发式指导下的本科生-研究生协同教学模式, 并以作者指导本科生-研究生协同编写 Ising 自旋体系 Fortran 并行程序中的应用为例, 探讨了该模式在物理学科教育和科学研究中的重要作用。通过该教学模式, 学生不仅能够掌握 Fortran 并行编程技能、并行计算原理以及相关的物理和数学知识, 还能在参与 Ising 自旋体系 Fortran 并行程序的编写与调试过程中, 培养跨学科的学习能力和实践经验。这一教学模式不仅提升了学生的计算能力, 促进了科学研究的深入发展, 还为其他领域的并行计算提供了有益的参考。更重要的是, 它有助于提升具备专业技能和创新能力的科技人才的培养质量。因此, 启发式指导下的本科生-研究生协同教学模式在推动科学计算领域的技术进步和人才培养方面具有深远的意义。

**[关键词]** 本科生-研究生协同教学模式; Ising 自旋体系; Fortran 并行程序

DOI: 10.33142/fme.v6i1.14983      中图分类号: TP332      文献标识码: A

## Undergraduate Graduate Collaborative Teaching Model under Heuristic Guidance: Taking Parallel Programming to Solve Scientific Problems as an Example

ZHANG Lili, CUI Yongxin, HUANG Yineng, WANG Yajiao, AN Xiaodong, AN Xinglong  
College of Physical Science and Technology, Yili Normal University, Yining, Xinjiang, 835000, China

**Abstract:** This article proposes a heuristic guided undergraduate graduate collaborative teaching model, and takes the application of the author's guidance in writing Ising spin system Fortran parallel programs as an example to explore the important role of this model in physics education and scientific research. Through this teaching mode, students can not only master Fortran parallel programming skills, parallel computing principles, and related physics and mathematics knowledge, but also cultivate interdisciplinary learning ability and practical experience by participating in the writing and debugging of Ising spin system Fortran parallel programs. This teaching model not only enhances students' computing abilities and promotes the in-depth development of scientific research, but also provides useful references for parallel computing in other fields. More importantly, it helps to improve the quality of training technology talents with professional skills and innovative abilities. Therefore, the undergraduate graduate collaborative teaching model under heuristic guidance has profound significance in promoting technological progress and talent cultivation in the field of scientific computing.

**Keywords:** undergraduate graduate collaborative teaching mode; Ising spin system; Fortran parallel program

### 引言

在当前的高等教育中, 启发式教学模式因其能够调动学生学习积极性、培养其问题解决能力而备受关注。这一模式强调教师的引导作用和学生的主动学习, 通过问题导向、案例分析和互动讨论等方式, 激发学生的思考能力和创新能力<sup>[1-2]</sup>。本文将探讨启发式指导下的本科生-研究生协同教学模式在并行编程中的应用, 并分析其在教学效果和人才培养方面的优势。

并行编程作为计算机科学中的重要领域, 因其能够利用多台计算机或处理器的计算能力, 解决大规模、复杂的问题而显得尤为重要。然而, 并行编程的学习难度较大, 对编程技能和计算物理的理解都有较高要求<sup>[3]</sup>。因此, 如何有效地教授并行编程, 成为了一个亟待解决的问题。

在本科生和研究生的协同教学中, 研究生的科学问题导向和本科生的编程热情可以形成互补。研究生作为科研活动的主体, 往往能够提出具有挑战性的科学问题, 但可能缺乏熟练的并行编程技能。而应用物理学本科生, 尤其

是编程爱好者, 对新技术充满好奇, 且在学习计算物理方面有深厚基础, 因此成为解决这一问题的理想人选。



图 1 本科生-研究生协同教学模式示意图

图 1 展示了, 在启发式指导下, 本文提出的本科生-研究生的协同教学模式, 具体步骤如下: 首先, 教师需要明确教学目标, 即解决特定的科学问题——Ising 自旋体系 Fortran 并行程序的设计, 并引导学生理解并行编程的基本概念。然后, 通过案例分析、情境导入等方式, 激发学生的思考, 引导他们逐步探索并解决通信、控制等核心问题。在这一过程中, 教师需要适时渗透计算物理和并行编程的基础知识, 帮助学生构建完整的知识框架。

随着该项工作的深入,学生可以逐步解决主进程对子进程的控制问题,实现子程序的反复任务计算。在这一过程中,教师需要关注学生的思考流程,及时给予点拨和启发,帮助他们顺利跨越学习障碍。

这种教学模式的优势在于,它不仅能够培养学生的编程技能和问题解决能力,还能够促进本科生和研究生的学术交流与合作,为未来的科研工作打下坚实的基础。同时,通过解决具体的科学问题,学生可以更直观地理解并行编程的应用价值,从而激发他们的学习兴趣和动力。

综上所述,启发式指导下的本科生-研究生协同教学模式在并行编程中具有显著的教学效果和人才培养优势。未来,我们可以进一步探索和完善这一模式,为培养具有创新精神和实践能力的高素质人才提供更多有益的经验 and 启示。

### 1 待解决科研问题

黄以能老师带领研究生赵薇和安小冬在研究基于 Ising 自旋体系的自旋玻璃 (SG) 转变现象,该现象由 Cannella 和 Mydosh 通过交流磁化率的测量发现。但是,目前最为常用的表征变温 SG 转变的关键实验,为加场降温 (FC) 和零场降温-加场升温 (ZFC-FH) 的 FH 过程所组合测量的磁化强度 (M)。黄以能课题组利用 Monte Carlo (MC) 方法对其模拟时,发现在高温时,所需翻转 MC 步过大,导致模拟时间过长,而并行可以将模拟体系分割成多个小矩阵,并让其翻转对应 MC 步,这大大缩短了模拟时间<sup>[4]</sup>。具体思路见下文。

#### 1.1 模拟系统

图 2 为单链铁磁体示意图,其中一条黑色点线图表示一条自旋链,即共有  $m = 25$  条自旋链,每条自旋链里有  $n = 16$  个自旋。由于在实际模拟系统中,总自旋数较大,图 1 仅以  $m = 25$  ( $m$  为自旋链条数)、 $n = 16$  ( $n$  为一条自旋链中的自旋) 为例。

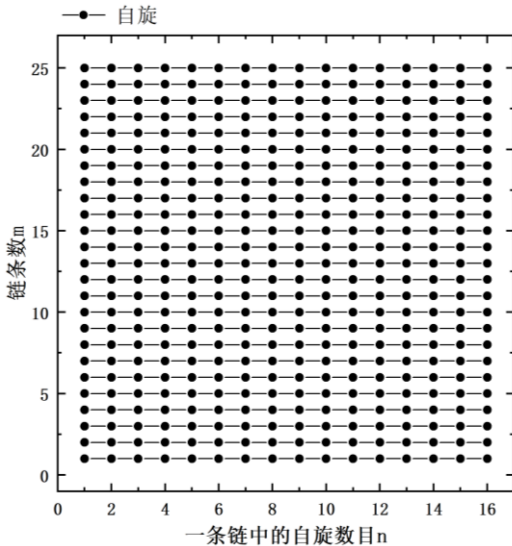


图 2 单链铁磁体示意图

#### 1.2 MC 步长的选取

(1) 模拟系统中自旋的随机选取。利用随机数函数产生 0 到 1 之间的 2 个随机数  $r_m, r_n$ , 设  $l_c, i_c$  分别为对  $mr_m, nr_n$  所取的整数, 则  $\sigma_{i_c}^{(l_c)}$  即为在模拟系统中随机选取的 1 个自旋。

(2) 随机选取自旋的随机翻转。利用随机数函数产生 0 到 1 之间的随机数  $r$ ; 当  $p_{i_c}^{(l_c)} > r$  ( $p_{i_c}^{(l_c)}$  为  $\sigma_{i_c}^{(l_c)}$  向  $-\sigma_{i_c}^{(l_c)}$  跃迁的概率) 时, 自旋发生翻转; 当  $p_{i_c}^{(l_c)} \leq r$ , 自旋不发生翻转。

(3) 自旋尝试翻转次数。当温度为  $T_k$ 、 $\Delta t$  时间内, 单个自旋的平均尝试翻转次数  $\nu \Delta t$  ( $\nu$  为单位时间内单个自旋的平均尝试翻转次数), 即模拟系统中总的自旋尝试翻转次数 ( $f_k$ ) 为:

$$f_k = \lfloor mn\nu_0 e^{-U_B/k_B T_k \Delta t} \rfloor \quad (1)$$

其中  $\lfloor \dots \rfloor$  表示取整数。易见,  $f_k$  随温度的升高以指数形式增大, 即当  $T_k$  足够高时  $f_k \gg 1$ , 当  $T_k$  足够低时  $f_k = 0$ 。

(4) 体系趋于热平衡的最少自旋尝试翻转次数的模拟。可以想象, 只要体系中自旋尝试翻转的次数足够多, 体系总是能够趋于热平衡。也可以想象, 体系趋于热平衡存在最少的自旋尝试翻转次数 ( $q_E^{(k)}$ ), 并且  $q_E^{(k)}$  随  $T_k$  的降低而增加。

(5) 各温度点体系中自旋翻转次数的模拟。由于  $f_k$  随温度降低减小, 而  $q_E^{(k)}$  增加, 所以存在某个温度点 ( $T_r$ ), 当  $T_k < T_r$  时,  $f_k < q_E^{(k)}$ 。因此, 对降温过程, 如 FC 和 ZFC 过程, 从足够高的  $T_0$  开始进行阶梯降温, 用平衡态蒙特卡罗方法相继模拟出各个  $T_k$  的  $q_E^{(k)}$ , 同时与  $f_k$  进行比较; 当发现  $f_k < q_E^{(k)}$  即  $T_r$  时及以下温度, 一个阶梯内体系中自旋尝试翻转次数为  $f_k$ 。可以预知,  $T_r$  及以下温度, 体系未能到达平衡态, 即玻璃态。

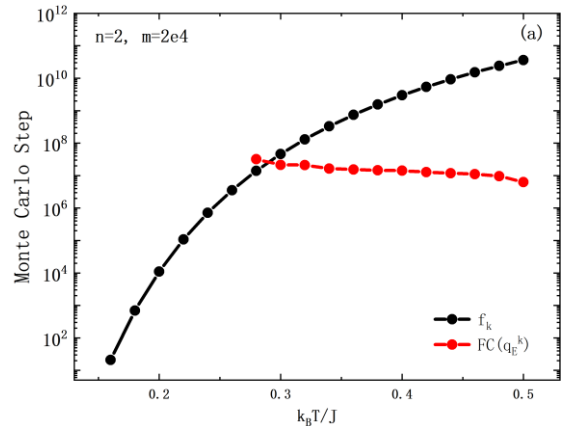


图 3  $n = 2, m = 2 \times 10^4$  时, FC 过程中各温度点  $f_k$  随温度的变化曲线 (黑色实心点线图),  $q_E^{(k)}$  随温度的变化曲线 (红色实心点线图)

由图 2 可知, 当  $n = 2, m = 2 \times 10^4$  时, 在高温部分单个自旋在单个温度点翻转的次数在  $10^7$  附近。利用 MATLAB 模拟  $T = [0.1, 0.5]$  范围, 并在该范围内选取 20 个温度点时, 所需模拟时间所需为 22 h, 如若想模拟较大温度区间、温度点更密或大体系时, 所需模拟时间将会更

多，这对后续的模拟工作造成了很大困难。

基于上述分析可知当 T 较高、T 较密、模拟体系更大时，对应的 MCS 过大，在模拟时花费的时间过长。根据调研知，采用 Fortran 并行程序计算 Ising 自旋体系，可大大降低模拟时间<sup>[5]</sup>，即将一个较大的 Ising 自旋体系分割成多个小体系，让每个小体系在对应温度点翻转 MCS。最后再汇集每个小体系的计算结果，进行数据处理。

## 2 解决问题

解决以上基于 Ising 模型的复杂自旋玻璃 (SG) 转变现象的研究，是可以应用 Fortran 并行程序解决的。

首先，Ising 模型作为描述铁磁质相变现象的经典模型，其数值模拟涉及大量的自旋状态计算和更新，并且随着系统规模的增大，计算量急剧增加<sup>[6]</sup>。通过编写 Fortran 并行程序，可以利用多核处理器和分布式计算系统的优势，将计算任务分配给多个处理器或线程同时执行，从而显著提高计算效率<sup>[5]</sup>。这对于大规模 Ising 模型的数值模拟和复杂相变现象的研究具有重要意义。

其次，Fortran 语言在科学计算领域具有广泛的应用和深厚的积累。其简洁的语法、高效的性能以及良好的可移植性使得它成为高性能计算领域的重要编程语言之一<sup>[7]</sup>。编写 Ising 自旋体系的 Fortran 并行程序，可以为物理学家和计算科学家提供一个强大的工具，用于探索和研究 Ising 模型的相变现象、临界行为以及与其他物理系统的相互作用等。这对于推动凝聚态物理、统计物理以及相关交叉学科的发展具有重要意义。

随着计算机技术的不断发展，并行计算已经成为高性能计算的一个重要方向。Fortran 语言提供了丰富的并行计算语句和工具，如 Parallel、Coalesce 和 Distribute 等，以及支持 OpenMP 和 MPI 等并行编程模型的接口<sup>[8-10]</sup>。

## 3 启发过程

### 3.1 简单并行程序的测试——各并行子程序“Hello world”的输出：

为了方便学生对并行程序执行过程的初步了解，首先引入一个简单的并行程序。程序 1 展示的是一个基于 FORTRAN77+MPI 的并行程序示例<sup>[8-10]</sup>。接下来，该程序结构将会被分几个部分详细解析。

首先，程序的第一部分引入了 MPI 在 FORTRAN77 中的头文件 mpif.h。若该程序为 Fortran 90 版本，则需将 include 'mpif.h' 替换为 use mpi，即将 MPI 作为一个 Fortran90 模块进行调用。

其次，第二部分定义了与 MPI 相关的变量。MPI\_MAX\_PROCESSOR\_NAME 是 MPI 预定义的宏，它表示在特定的 MPI 实现中，允许机器名字的最大长度，这个长度存储在变量 processor\_name 中。同时，程序定义了整型变量 myid 和 numprocs，它们分别用于记录当前并行执行进程的标识和所有参与计算的进程数量。namelen 则用于

记录实际得到的机器名字的长度。rc 和 ierr 则分别用于接收 MPI 过程调用结束后的返回结果和可能的错误信息。

接下来是第三部分，MPI 程序的初始化和结束工作分别由 MPI\_INIT 和 MPI\_FINALIZE 完成。这两个函数是 MPI 程序的标准开头和结尾。

最后，在第四部分中详细描述了 MPI 程序的主体部分，其中包含了各种 MPI 过程调用语句和 FORTRAN 语句。MPI\_COMM\_RANK 用于获取当前正在运行的进程的标识号，并将其存储在 myid 中。MPI\_COMM\_SIZE 则用于获取所有参与运算的进程的个数，并将其存储在 numprocs 中。MPI\_GET\_PROCESSOR\_NAME 用于获取运行当前进程的机器的名称，该名称存储在 processor\_name 中，其长度则存储在 namelen 中。write 语句是普通的 FORTRAN 语句，它用于打印当前进程的标识号、并行执行的进程个数以及运行当前进程的机器的名字。需要注意的是，虽然这些语句在程序体中，但它们是以并行方式执行的，即每个进程都会执行这些语句。例如，当该程序启动时，假设共产生了 4 个进程并同时运行，且这些进程都在名为 node1 的机器上运行，其标识分别为 0、1、2、3。尽管该 MPI 程序本身只有一条打印语句，但由于启动了四个进程同时执行，因此最终的执行结果将包含四条打印语句（见输出结果）。本程序的执行流程详见图 4。

程序如下：

```

program main
include 'mpif.h'
character *(MPI_MAX_PROCESSOR_NAME)processor_name
integer myid, numprocs, namelen, rc, ierr
call MPI_INIT(ierr)
call MPI_COMM_RANK(MPI_COMM_WORLD, myid, ierr)
call MPI_COMM_SIZE(MPI_COMM_WORLD, numprocs, ierr)
call MPI_GET_PROCESSOR_NAME(processor_name, namelen, ierr)
write(*,10) myid,numprocs,processor_name
10 FORMAT('Hello World! Process 'J2,' of 'I1,' on ',20A)
call MPI_FINALIZE(rc)
end
    
```

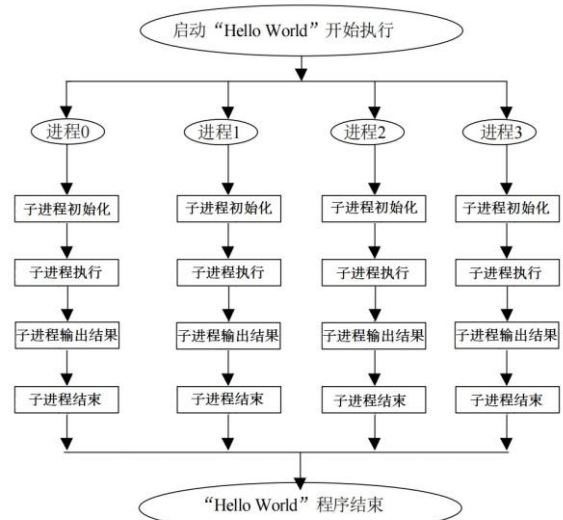


图 4 简单 FORTRAN77+MPI 程序

在 Linux 操作系统的机器上执行以下命令指令：

```
# mpiifort xx.f90 -o test /intel mpi 并行库编译 fortran 并行程序,生成可执行文件 test
# mpirun -np 4 ./test /提交编译好的程序,由 4 个进程同时执行
```

可得如下输出结果：

```
# Hello World! Process 1 of 4 on node1
# Hello World! Process 0 of 4 on node1
# Hello World! Process 2 of 4 on node1
# Hello World! Process 3 of 4 on node1
```

### 3.2 与 Ising 自旋体系相匹配的并行模式的筛选

MPI (Message Passing Interface) 包含对等模式和主从模式两种基本并行程序设计模式。在对等模式中，所有进程地位相等，执行相同程序但处理不同数据，通过消息传递实现通信和同步，适用于任务独立且需频繁通信的场景。而在主从模式中，存在主进程和从进程，主进程负责 I/O、任务分发和结果收集，从进程执行具体计算任务，适用于任务可分解为多个独立子任务且主进程需收集结果的场景。两者在进程地位、任务分配和通信方式上有所不同，但都是 MPI 的基本模式，可根据应用场景选择使用。

本次要解决的 Ising 自旋体系的并行计算的设计思路为，将一个较大的体系分解成  $M$  个小体系，将这  $M$  个小体系的计算分配给  $M$  子进程执行，要执行的子程序之间不需要信息交换，相对独立，等所有子体系的计算执行完毕，并返回结算后，所有子程序的计算结果再经过一个主进程的收集拼接成一个大体系的计算结果。因此主从模式比较适合作为本文中 Ising 自旋体系的解决方案。

### 3.3 主从模式设计的初次尝试

基于以上分析，本科生导师带领应用物理学专业本科生开始对主从模式设计的初次尝试，具体流程如图 5 所示。各子进程执行相同的程序体，在随机数的引导下生成各自独有的 Ising 自旋小体系，并执行计算。当各子进程计算结束时，分别把结果送回主进程。然后，主进程对收集来的结果进行数据处理，将各小体系拼接成一个大体系，通过分散拆分→汇集拼接的过程，实现了对复杂 Ising 自旋大体系的计算。虽然这种模式，实现了 Ising 自旋大体系的并行计算要求，但是已经返回计算结果的子程序没有被再次分配工作，继续计算任务。这种模式造成了计算资源的闲置浪费，还限制了拼接后大体系的规模。

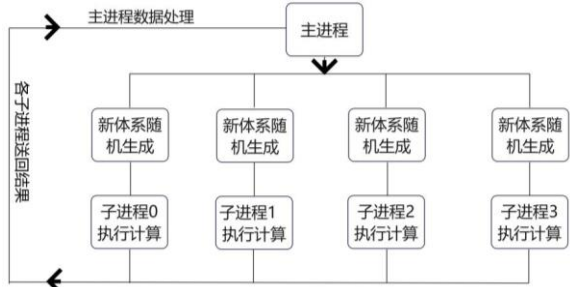


图 5 Ising 自旋体系并行程序设计——简单主从模式流程图

### 3.4 主从模式的优化

上一节中，提出了子进程结束第一轮计算任务后，就没有再执行新的任务，因此存在计算资源浪费，拼接形成的大体系受限于执行计算任务计算机的 CPU 核数等问题。因此本节重点在于如何设计子进程被反复调用执行计算，增加小体系的数量，最终实现大体系的足够大的规模，具体设计思路如图 6 所示。当主进程给各子进程发出计算指令后，各子进程在随机数的触发之下，生成各自独有的小体系，开始第一轮的计算。图中  $j$  的作用在于记录子进程返回主进程的结果的数量。子进程每返回一个计算结果， $j$  的数值增加 1。每返回一个计算结果， $j$  的大小就会和设定好的小体系的数量  $M$  比较，若  $j \leq M$ ，那么主进程会再次触发指令启动各子进程的计算。如此反复，直至满足  $j > M$ ，主进程对汇集的  $M$  个小体系的结果进行数据处理。至此并行程序结束。

优化后的主从模式，其小体系的数量不再受限于参与计算的计算机硬件参数。每一个子进程一旦提交了计算结果，只要不满足  $j > M$ ，都将进入下一轮的计算。拼接而成的大体系的规模可随意调整。使用一个并行 Fortran 程序即可完成对复杂 Ising 自旋体系的规模控制和数据处理。目前这个并行策略已经应用到具体 Ising 自旋体系的模拟中，并取得相当好的效果。

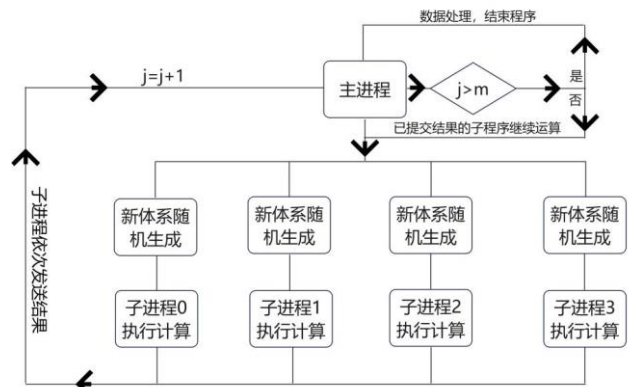


图 6 Ising 自旋体系并行程序设计——优化主从模式流程图，其中  $j$  为记录子程序返回结果的数量

### 3.5 主从模式在具体 Ising 自旋体系中的应用测试

图 7 中黑色点线图为串行运算模拟的结果，红色点线图为并行运算模拟的结果。当  $n = 2$ 、 $m = 2 \times 10^4$ 、 $\bar{U}_B = 5$ 、 $\bar{J}_B = 1 \times 10^{-1}$ 、 $\bar{R}_c = 1 \times 10^{-12}$ 、 $\lambda = 1e5$ 、 $dT = 0.02$  时，在  $T = [0.1, 0.5]$  范围内，对 FC、ZFC-FH 过程模拟 10 个温度点时：(1) 串行运算所需时间分别为：12h、32h，并行运算所需的时间为：1.5h、9h；(2) 串行运算模拟出来的数据有波动，并行运算模拟出来的数据较为光滑。

在相同参数条件下，并行运算模拟所用的时间较于串行运算显著缩短，使计算更加高效；图 7 也展现了并行运

算相较于串行运算模拟出来的曲线更加光滑。因此，并行运算相较于串行运算在时间和数据量处理上具有显著优势。

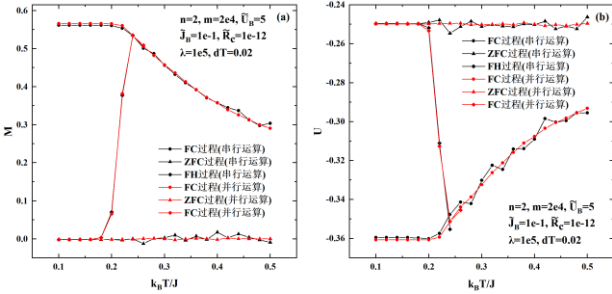


图 7 当  $n = 2$ 、 $m = 2 \times 10^4$ 、 $\bar{U}_B = 5$ 、 $\bar{J}_B = 1 \times 10^{-1}$ 、 $\bar{R}_C = 1 \times 10^{-12}$ 、 $\lambda = 1e5$ 、 $dT = 0.02$  时，(a)  $M$  随约化温度的变化曲线；(b)  $U$  随约化温度的变化曲线。图中实心圆点线图均代表 FC 过程翻转  $q_E^{(k)}$  次的结果，实心三角均表示 ZFC-FH 中 ZFC 过程翻转  $q_E^{(k)}$  次的结果，实心菱形表示 ZFC-FH 中 FH 过程翻转  $f_k$  次的结果。其中黑色点线图为串行运算模拟的结果，红色点线图为并行运算模拟的结果

### 4 结论

在本文中，我们探讨了启发式指导下的本科生-研究生协同教学模式在编写 Ising 自旋体系 Fortran 并行程序中的应用与价值。通过这一教学模式，不仅能够有效利用并行计算技术和工具，推动其在科学计算领域的深入应用与发展，并为其他领域的并行计算实践提供有益的参考框架，还强调了该过程中对学生综合能力的培养。在启发式指导下，本科生与研究生共同参与 Ising 自旋体系 Fortran 并行程序的编写与调试，这一过程要求他们掌握扎实的编程技能、深入理解并行计算原理，以及具备相关的物理和数学知识。这种跨学科的学习与实践，不仅提升了学生的专业技能和实践经验，还促进了他们成为具备创

新思维和问题解决能力的科技人才。因此，启发式指导下的本科生-研究生协同教学模式，在提升计算效率、加速科学研究进程、推动技术进步以及培养未来科研与技术领域所需的专业人才方面，展现出了显著的优势与深远的意义。综上所述，该教学模式对于促进 Ising 自旋体系 Fortran 并行程序及相关领域的发展有一定的启发意义。

基金项目：伊犁师范大学教改项目（YSYB202271），大学生创新创业项目（S202310764007）。

### 【参考文献】

[1] 颜焯, 梁艳华, 党庆一. 启发式教学法在应用型本科计算机教学中的应用 [J]. 九江学院学报 (自然科学版), 2014, 29 (3): 88-89.  
 [2] 谭中奇, 梁永辉, 毛宏军, 等. 研究生光电技术实验课程教学探索与实践 [J]. 教育教学论坛, 2015 (3): 22-24.  
 [3] 李维权. 任务并行编程模型下排列熵算法的并行实现 [J]. 软件工程, 2024 (27): 40-43.  
 [4] 赵薇. 自旋玻璃转变的蒙特卡罗模拟研究 [D]. 新疆: 伊犁师范大学, 2024.  
 [5] 都志辉. 高性能计算并行编程技术: mpi 并行程序设计 [M]. 北京: 清华大学出版社, 2001.  
 [6] 刘鹏茂. 基于 mpi 大地电磁二维正则化反演并行算法研究 [D]. 湖南: 中南大学, 2012.  
 [7] 韦祥文. Mpi 平台下二维欧拉方程数值解法 [D]. 陕西: 西北工业大学, 2003.

作者简介：张丽丽（1982—），女，汉族，江苏徐州人，博士，副教授，伊犁师范大学物理科学与技术学院，研究方向：计算凝聚态物理。