

## Секция «Вычислительная математика и кибернетика»

### Эффективное использование графических процессоров в задачах глобальной оптимизации

*Климов Георгий Петрович*

*Аспирант*

*Московский физико-технический институт, факультет инноваций и высоких технологий, Москва, Россия*

*E-mail: [tolkachev@physics.msu.ru](mailto:tolkachev@physics.msu.ru)*

Данная работа посвящена исследованию двух методов глобальной оптимизации, являющихся параллельными модификациями метода Monotonic Basin Hopping (МВН) [1] применяемого для решения задач поиска структуры молекулярных систем в физике. Практическая часть заключается в эффективной реализации исследуемых методов на современных высокопроизводительных графических процессорах, установлении связи входных параметров алгоритмов с характеристиками аппаратного обеспечения (АО) и данными конкретной задачи. Для выделенного круга задач проведен сравнительный анализ эффективности использования двух методов.

Метод МВН успешно используется для решения задач поиска конфигурации молекулярного кластера [2, 3, 4]. Его суть кратко можно изложить так [5]:

- 1) берется начальное приближение глобального экстремума функции в исследуемой области
- 2) совершается случайное смещение из исходной точки в окрестности заданных пределов
- 3) к полученной таким образом точке применяется алгоритм локальной минимизации
- 4) если удалось улучшить начальное приближение, то оно заменяется найденным значением и алгоритм продолжается из найденной точки
- 5) если значение улучшить не удалось, то возвращаемся на первый шаг алгоритма
- 6) цикл продолжается до выполнения условия останова

Однако описанный алгоритм является последовательным. Автором предложен вариант распараллеливания данного метода. Он заключается в разбиении исследуемой области на равные участки и параллельной реализации алгоритма на каждом из них с запретом пересечения границ.

Второй вариант параллельного использования взят из работы [6] и относится к популяционным алгоритмам. На каждом шаге несколько нитей исполнения программы реализуют МВН и независимо улучшают набор начальных приближений. Из получившейся популяции решений выбираются наилучшие приближения, которые снова передаются на вход алгоритма.

Программно исследуемые алгоритмы реализованы с помощью технологии CUDA [7, 8], дающей возможность эффективного программирования на высокопроизводительных графических процессорах Nvidia. Проведены тесты производительности в зависимости от входных параметров алгоритмов (радиус смещения, число шагов цикла), характеристик АО (число процессоров) и условий задачи (размер исследуемой области). Были выявлены взаимосвязи и сформулированы рекомендации, которые позволяют оптимизировать входные параметры алгоритма под конкретное АО.

Для сравнительного анализа модификаций МВН была проведена серия измерений производительности (времени работы программы) на ряде тестовых функций [9], а также на задаче молекулярного кластера.

Результаты тестирования позволили сформулировать выводы: для вычислительно менее сложных задач эффективнее оказывается реализация МВН с разбиением исследуемой области на участки. Для задач с большей вычислительной сложностью подходящим оказывается популяционный подход. В работе объяснены причины такой зависимости, заключающиеся в особенностях работы с памятью графических процессоров, и определен критерий перехода.

### Литература

1. Northby J. A. Structure and binding of Lennard-Jones clusters:  $13 \leq n \leq 147$  // J. Chem. Phys. 1987. 87. 6166–6178.
2. Xue G. L. Improvements on the Northby algorithm for molecular conformation: better solutions // Journal of Global Optimization. 1994. 4(4). 425–440.
3. Doye J. P. K., Wales D. J., Berry R. S. The effect of the range of the potential on the structure of clusters // J. Chem. Phys. 1995. 103. 4234–4249.
4. Leary R. H. Global optimization on funneling landscapes // J. Global Optim. 2000.18. 367–383.
5. Посыпкин М.А. Методы решения задач конечномерной оптимизации в распределенной вычислительной среде. // Третья Международная конференция «Системный анализ и информационные технологии» САИТ – 2009: Труды конференции. М., 2009, С. 729-740
6. Andrea Grosso, Marco Locatelli, Fabio Schoen, A population based approach for hard global optimization problems based on dissimilarity measures, Math. Program. 110(2), 2007, pp. 373-404
7. Боресков А. В., Харламов А. А. Основы работы с технологией CUDA. М.: ДМК Пресс, 2010.
8. Дж. Сандерс, Э. Кэндрот. Технология CUDA в примерах. ДМК Пресс, 2011
9. Test functions for unconstrained global optimization [HTML] ([http://www-optima.amp.i.kyoto-u.ac.jp/member/student/hedar/Hedar\\_files/TestGO\\_files/Page364.htm](http://www-optima.amp.i.kyoto-u.ac.jp/member/student/hedar/Hedar_files/TestGO_files/Page364.htm))

### Слова благодарности

Я хотел бы выразить искреннюю благодарность Посыпкину Михаилу Анатольевичу, ведущему научному сотруднику ИПИ РАН, а также Афанасьеву Александру Петровичу, профессору ИПИ РАН, за помощь в постановке научной задачи и критические замечания, позволившие значительно повысить уровень работы.