

РЕАЛИЗАЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ ЭВОЛЮЦИОННЫХ АЛГОРИТМОВ ОПТИМИЗАЦИИ НА ПЛАТФОРМЕ BOINC¹

М.А. Посыпкин¹, Т.Е. Власов²

¹ИСА РАН, Проспект 60-летия Октября, 9

*²Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова
Россия, Москва, Ленинские горы
posypkin@isa.ru, zasalamel@ya.ru*

Рассматривается задача отыскания геометрической структуры кластера одинаковых атомов, взаимодействие которых описывается парными потенциалами. Применяемые для расчета методы стохастической оптимизации [1] характеризуются высокой ресурсоемкостью, которая затрудняет их применение для анализа соединений с большим количеством атомов.

На текущем этапе создан тестовый стенд, моделирующий работу грид-системы из персональных компьютеров, позволяющий производить эксперименты над кластерами малых и средних размерностей. При помощи стенда появилась возможность выявлять и исключать из дальнейшего рассмотрения заведомо неудачные алгоритмы, тем самым экономя вычислительные ресурсы.

Планируется провести ряд экспериментов в основе которых будут положены генетические алгоритмы и принцип несходства (Dissimilarity) конфигурации атомов [2]. Лучшие алгоритмы, отобранные с помощью тестового стенда, будут размещены в реальной грид-системе в рамках проекта OPTIMA@home [3].

- [1] Посыпкин М.А. Методы и распределенная программная инфраструктура для численного решения задачи поиска молекулярных кластеров с минимальной энергией //Вестник нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского № 1. 2010. С. 210-219.
- [2] A.Grosso, M.Locatelli, F.Schoen, A population based approach for hard global optimization problems based on dissimilarity measures, Mathematical Programming, 110, 373-404 (2007)
- [3] Проект добровольных вычислений OPTIMA@home
<http://boinc.isa.ru/dcsdg/>

¹ Работа выполнена при частичной поддержке проекта EU FP7 DEGISCO и гранта РФФИ 10-07-00640.

IMPLEMENTATION OF THE DISTRIBUTED EVOLUTIONARY ALGORITHMS FOR BOINC PLATFORM¹

M.A. Posypkin¹, T.E. Vlasov²

¹ *Institute of Systems Analysis RAS, pr. 60-letya Oktyabrya, 9, Moscow*

² *Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia*

posypkin@isa.ru, zasalamel@ya.ru

The problem of determining the geometric structure of a cluster of identical atoms interacting by a pair potential is considered. Stochastic optimization methods [1] usually used for the calculation of the minimal energy are very resource demanding, what makes them difficult to use for analysis of clusters with a large number of atoms.

We implemented a test bed that simulates operation of desktop grid systems for experimenting with small and medium-sized clusters. This test bed provides the opportunity to evaluate and discard obviously bad algorithms. This will save computational resources in the distributed implementation.

The future plans foresee making a series of experiments based on genetic algorithms and dissimilarity measure for atomic configurations [2]. The successful approaches will be selected with the help of the test bed and will be deployed on a real desktop grid system within the OPTIMA @ home project [3].

- [1] Posypkin M.A. Searching for minimum energy molecular clusters: methods and distributed software infrastructure for numerical solution of the problem //Vestnik of Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod, № 1. 2010. C. 210-219.
- [2] A.Grosso, M.Locatelli, F.Schoen, A population based approach for hard global optimization problems based on dissimilarity measures, *Mathematical Programming*, 110, 373-404 (2007).
- [3] Volunteer computing project OPTIMA@home <http://boinc.isa.ru/dcsdg/>

¹ Partially supported by European Union Seventh Framework Programme (FP7/2007- 2013) under grant agreement n° 261561 (DEGISCO) and by the RFBR grant 10-07-00640.