

# Исследование эффективности высокопроизводительного алгоритма параметрической идентификации кристаллических решёток, основанного на технологии CUDA

А.С. Широканев<sup>1,2</sup>, Д.В. Кириш<sup>1,2</sup>, А.В. Куприянов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королева, Московское шоссе 34А, Самара, Россия, 443086

<sup>2</sup>Институт систем обработки изображений РАН - филиал ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Молодогвардейская 151, Самара, Россия, 443001

**Аннотация.** Исследование вещества с кристаллической структурой – сложный многоэтапный процесс. Ключевым этапом в анализе кристаллического вещества является оценивание параметров элементарной ячейки. Оценка параметров элементарной ячейки кристаллической решётки представляет собой отдельную задачу, заключающуюся в поиске параметров модели кристаллической решётки по той информации, которую удаётся извлечь из вещества. В последнее время наиболее точную информацию о структуре вещества можно получать с электронного микроскопа, линейное разрешение которого достаточно высокое, чтобы наблюдать атомарную структуру вещества. Задача оценивания параметров в данном случае сводится к реконструкции трёхмерной структуры кристаллической решётки по двумерным снимкам, полученным с электронного микроскопа, и оцениванию параметров элементарной ячейки кристаллической решётки по сформированной трёхмерной структуре. В предыдущих работах были представлены алгоритмы параметрической идентификации кристаллических решёток, основанные на решении задачи локальной оптимизации. Однако анализ большой базы данных кристаллических решёток занимает достаточно много времени. В настоящей работе предлагается технология анализа большой базы кристаллических структур, основанная на применении высокопроизводительного алгоритма параметрической идентификации кристаллических решёток с использованием технологии CUDA. Исследование эффективности технологии проводилось на видеокарте GeForce NVidia GTX 1070 Ti. При размерностях данных свыше 32 ускорение оказывается выше 70. Алгоритм эффективнее работает при использовании большого количества CUDA-блоков.

## 1. Введение

В настоящее время большинство работ посвящено реконструкции трёхмерных объектов [1-4]. Частным случаем является трёхмерная реконструкция кристаллических решёток [5-8]. Среди существующих методов оценивания параметров трёхмерной кристаллической решётки выделяются методы: компаратор национального института [5], идентификация на основе плотности упаковки решётки [6], метод сравнения изоповерхностей [7]. Наиболее точными методами исследования трёхмерной структуры кристаллических решёток являются

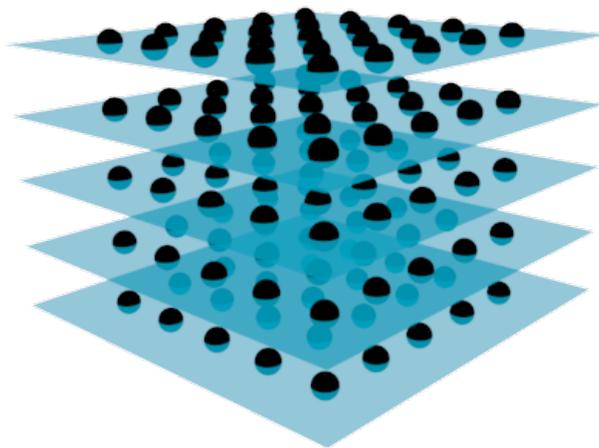
методы параметрической идентификации [9-16]. Существующие алгоритмы параметрической идентификации трёхмерных кристаллических решёток представлены в работах [9-14].

Кристаллическая решётка может быть описана различными математическими моделями, но наипростейшей моделью является решётка Браве. Элементарная ячейка Браве описывается тремя векторами трансляции, по которым формируется вся кристаллическая структура [17]. Существует алгоритм параметрической идентификации на основе оценивания параметров элементарной ячейки Браве [12], который является наиболее простым по сравнению с алгоритмами, в основе которых лежит другая модель, например модель решётки, описываемая элементарной ячейкой Вигнера-Зейтца [9-11]. К сожалению, соответствующая задача параметрической идентификации не является корректно поставленной по Адамару, так как решение может быть не единственным, что является следствием проблемы неоднозначности решётки Браве [17].

Алгоритм, представленный в работе [16], позволяет улучшить точность параметрической идентификации по сравнению с алгоритмами, представленными в работах [9-12]. Однако алгоритм обладает высокой вычислительной сложностью, что затрудняет его использование на больших выборках. Технология анализа наноструктур будет применяться на больших базах кристаллических структур. Очень важно учитывать, при каких параметрах алгоритм будет обладать максимальной эффективностью. Кристаллические структуры отличаются параметрами элементарных ячеек, однако объём структуры (количество узлов) можно зафиксировать. В настоящей работе проводится экспериментальное исследование, в результате которого выясняется наиболее оптимальный объём структуры, обеспечивающий минимальное общее время оценки параметров вещества.

## 2. Метод параметрической идентификации кристаллических решёток

Алгоритм, предложенный в работе [16], обладает лучшей декомпозицией по данным, чем алгоритм, представленный в работе [15], благодаря разбиению проблемы на 3 независимые задачи, каждая из которых разбивается на мелкие подзадачи, связанные с отдельным узлом решётки. Идея основывается на том свойстве, что периодически повторяющиеся плоскости проходят через все узлы решётки (рисунок 1). Данные плоскости можно ориентировать в трёх разных направлениях. Таким образом, получаем 3 независимые задачи.



**Рисунок 1.** Периодически повторяющиеся плоскости, проходящие через узлы решётки.

Алгоритм заключается в выполнении следующих шагов [18]:

1. Преобразование векторов трансляции в векторы независимого базиса (не распараллеливаемая часть);
2. Решение независимых задач локальной оптимизации каждого вектора из полученного базиса (параллельная часть на CUDA);
3. Преобразование вычисленных векторов в векторы трансляции (не распараллеливаемая часть).

Проблема неоднозначности решёток Браве приводит к появлению нескольких глобальных минимумов [19]. Любой глобальный минимум является решением задачи параметрической идентификации. Искажение структуры решётки может привести к появлению новых локальных минимумов, что добавляет дополнительные трудности применению градиентных методов. Найденные экстремумы подвергаются дополнительной корректировке, если найденные векторы будут близки к линейно-зависимым. В этом случае вектор, если он один, который зависит от других двух, оптимизируется другой целевой функцией, зависящей от всех векторов – векторов трансляции [15]. Если векторов два, то они оптимизируются той же целевой функцией, в которой фиксируется один свободный вектор.

### 3. Высокопроизводительный алгоритм параметрической идентификации кристаллических решёток

Применение градиентного метода наискорейшего спуска обладает высокой вычислительной сложностью, так как коэффициент спуска  $\lambda$  требует значительных вычислений на каждой итерации. В настоящей работе рассмотрим алгоритм, основанный на градиентном методе с постоянным шагом. В данном случае каждая задача векторного алгоритма представляет собой последовательность следующих действий:

$$\begin{aligned} i_l &= \arg \min_i \left[ (\bar{x}_l, \bar{d}) - i \|\bar{d}\|^2 \right]; \\ w_l &= (\bar{x}_l, \bar{d}) - i_l (\bar{d}, \bar{d}); \\ \bar{c}_l &= [\bar{x}_l - 2i_l \bar{d}]; \\ \bar{u}_l &= \begin{pmatrix} w_l \bar{c}_l \\ w_l \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Декомпозиция по данным приводит к тому, что отдельно взятая задача функционирует только с одним узлом решётки. Таким образом, количество задач пропорционально количеству узлов трёхмерного пространства.

После выполнения всех задач необходимо выполнить редукцию результатов, то есть вычислить сумму векторов  $\bar{u}_l$ , чтобы окончательно сформировать результаты целевой функции и градиента. Редукция на GPU реализуется по схеме «Разделяй и властвуй» с устранением конфликтов по банкам [20].

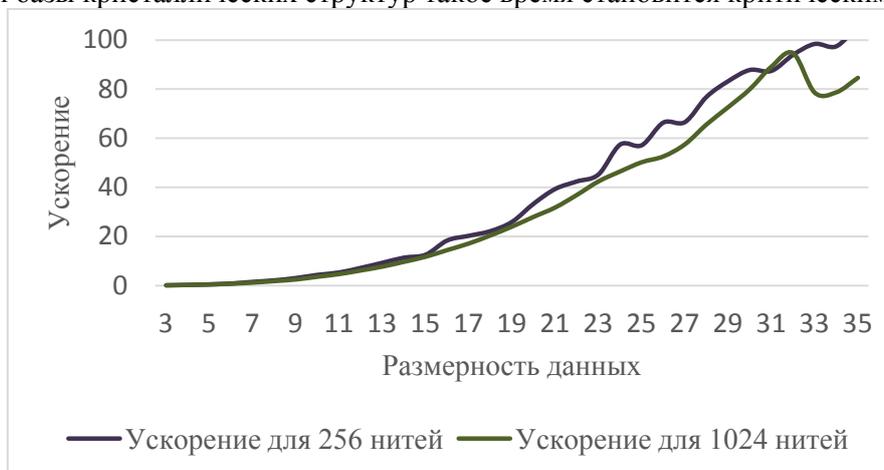
Параллельный алгоритм использует глобальную память для проведения операции редукции [18]. Критерий останова проверяется на CPU. То есть алгоритм предполагает многократный запуск функции ядра на видеокarte. Память для узлов решётки на видеокarte выделяется однократно. На определённой итерации между оперативной памятью и памятью видеокарты пересылается только оптимизируемый вектор.

### 4. Результаты анализа большой базы данных кристаллических решёток

Разработанная технология применялась для реконструкции большого объёма кристаллических решёток. На рисунке 2 представлены результаты ускорения предложенного высокопроизводительного алгоритма в зависимости от размерности кристаллической структуры. Под размерностью кристаллической решётки будем понимать количество узлов по одной из трёх осей. Общее количество задач в этом случае вычисляется как третья степень размерности решётки. Исследование проводилось на видеокarte GeForce NVidia GTX 1070 Ti и процессоре AMD Ryzen 2600.

Исследование показало, что высокопроизводительный алгоритм очень эффективен на размерностях структуры выше 30: на данных размерностях ускорение алгоритма превышает значение 70. Использовать алгоритм при размерности ниже 7 нецелесообразно. Достаточно много времени занимает работа с памятью на видеокarte, поэтому на малых размерностях высокопроизводительный алгоритм уступает последовательному. Достижение 100-кратного ускорения на размерности 35 вызывает особый интерес: при данной размерности количество

узлов кристаллической структуры составляет 42875, что, вообще говоря, не является чрезмерно высокой размерностью. Процессор обрабатывает одну такую структуру примерно 12 минут, для большой базы кристаллических структур такое время становится критическим.



**Рисунок 2.** Ускорение высокопроизводительного алгоритма при использовании на больших размерностях данных.

Так как количество заданных нитей 1024, то через каждые 1024 узла выделяется новый блок на видеокарте. Использование одного блока осуществляется в интервале размерностей 1 и 10. Второй и третий блоки используются до размерности 16. На последних размерностях используется 42 блока, что могло бы негативно отразиться на ускорении. Однако ускорение достаточно высокое. Вследствие особенностей работы кэш-памяти на видеокарте в определенных ситуациях демонстрируется ещё более низкие затраты по времени. Такой эффект наблюдается на размерности 31: ускорение получило резкий скачок. Процессор на некоторых размерностях также оптимизировал работу с кэш-памятью, вследствие чего на больших размерностях время могло падать.

В связи с указанными особенностями работы видеокарты было проанализировано ускорение векторного алгоритма при использовании 256 нитей. Для данной модификации выделяется больше блоков. Такая модификация позволяет добиться ещё большего ускорения. Таким образом, для предложенного алгоритма эффективнее использовать как можно больше блоков памяти на заданных размерностях данных. Оптимальная размерность – 32 (32768 узлов), поскольку оба варианта (256 нитей и 1024 нити) позволяют достичь высокого ускорения, а восстановление структуры для представленного количества узлов не обладает неприемлемо высокой вычислительной сложностью.

## 5. Заключение

В настоящей работе была предложена технология анализа большого объёма кристаллических наноструктур, основанная на высокопроизводительном алгоритме параметрической идентификации кристаллических решёток. Данная технология позволит проводить более качественный анализ кристаллических структур, чем существующие методики оценивания параметров кристаллических решёток.

Исследование показало, что разработанная технология наиболее эффективна при размерностях структуры выше 30. На размерностях менее 7 использовать данную технологию нецелесообразно. Оптимальным количеством узлов является 32768, поскольку именно при таком объёме структуры достигается достаточно высокое ускорение, а реконструкция не будет временно затратным. Исследование показало, что задание 256 нитей оказывается более эффективным, чем 1024 нити. Это связано с количеством используемых блоков на видеокарте. Данный алгоритм эффективнее работает на большем количестве блоков.

## 6. Литература

- [1] Фурсов, В.А. Информационная технология реконструкции цифровой модели местности по стереоизображениям / В.А. Фурсов, Е.В. Гошин // Компьютерная оптика. – 2014. – Т. 38, № 2. – С. 335-342.
- [2] Котов, А.П. Технология оперативной реконструкции трёхмерных сцен по разноракурсным изображениям / А.П. Котов, В.А. Фурсов, Е.В. Гошин // Компьютерная оптика. – 2015. – Т. 39, № 4. – С. 600-605. DOI: 10.18287/0134-2452-2015-39-4-600-605.
- [3] Кудинов, И.А. Реализация алгоритма определения пространственных координат и угловой ориентации объекта по реперным точкам, использующего информацию от одной камеры / И.А. Кудинов, О.В. Павлов, И.С. Холопов // Компьютерная оптика. – 2015. – Т. 39, № 3. – С. 413-415. DOI: 10.18287/0134-2452-2015-39-3-413-419.
- [4] Ильясова, Н.Ю. Оценивание геометрических признаков пространственной структуры кровеносных сосудов / Н.Ю. Ильясова // Компьютерная оптика. – 2014. – Т. 38, № 3. – С. 529-538.
- [5] Kessler, E. Precision Comparison of the Lattice Parameters of Silicon Monocrystals / E. Kessler, A. Henins, R. Deslattes, L. Nielsen, M. Arif // Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology. – 1994. – Vol. 99. – P. 1-18.
- [6] Smith, W. Foundations of Materials Science and Engineering. – McGraw-Hill, 2004. – P. 67-107.
- [7] Patera, J. Centered cubic lattice method comparison / J. Patera, V. Skala // 17th ALGORITHM Conference on Scientific Computing, 2005. – P. 309-319.
- [8] Shirokanev, A.S. Researching methods of reconstruction of three-dimensional crystal lattice from images of projections / A.S. Shirokanev, D.V. Kirsh, A.V. Kupriyanov // CEUR Workshop Proceedings. – 2015. – Vol. 1490. – P. 290-297.
- [9] Kupriyanov, A.V. Estimation of the Crystal Lattice Similarity Measure by Three-Dimensional Coordinates of Lattice Nodes / A.V. Kupriyanov, D.V. Kirsh // Optical Memory & Neural Networks (Information Optics). – 2015. – Vol. 24(2). – P. 145-151.
- [10] Куприянов, А.В. Оценка меры схожести кристаллических решёток по координатам их узлов в трёхмерном пространстве / А.В. Куприянов, Д.В. Кирш // Компьютерная оптика. – 2012. – Т. 36, № 4. – С. 590-595.
- [11] Kirsh, D.V. Crystal lattice identification by coordinates of their nodes in three dimensional space / D.V. Kirsh, A.V. Kupriyanov // Pattern recognition and image analysis. – 2015. – Т. 25, № 3. – С. 456-460.
- [12] Kirsh, D.V. Identification of Three-Dimensional Crystal Lattices by Estimation of Their Unit Cell Parameters / D.V. Kirsh, A.V. Kupriyanov // CEUR Workshop Proceedings. – 2015. – Vol. 1452. – P. 40-45.
- [13] Солдатова, О.П. Применение нечётких нейронных сетей для определения типа кристаллических решёток, наблюдаемых на наномасштабных изображениях / О.П. Солдатова, И.А. Лёзин, И.В. Лёзина, А.В. Куприянов, Д.В. Кирш // Компьютерная оптика. – 2015. – Т. 39, № 5. – С. 787-795. DOI: 10.18287/0134-2452-2015-39-5-787-794.
- [14] Kirsh, D.V. Modeling and Identification of Centered Crystal Lattices in Three-Dimensional Space / D.V. Kirsh, A.V. Kupriyanov // CEUR Workshop Proceedings. – 2015. – Vol. 1490. – P. 162-170.
- [15] Shirokanev, A.S. Application of gradient steepest descent method to the problem of crystal lattice parametric identification / A.S. Shirokanev, D.V. Kirsh, A.V. Kupriyanov // CEUR Workshop Proceedings. – 2016. – Vol. 1638. – P. 393-400.
- [16] Shirokanev, A.S. Development of the crystal lattice parameter identification method based on the gradient steepest descent method / A.S. Shirokanev, D.V. Kirsh, A.V. Kupriyanov // Computer Science Research Notes. – 2016. – Vol. 2603. – P. 65-68.
- [17] Шаскольская, М.П. Кристаллография. – Учеб. пособие. – М.: Высш. шк., 1984. – 376 с.
- [18] Широканев, А.С. Разработка векторного алгоритма параметрической идентификации трёхмерных кристаллических решёток на основе оценки расстояний между двумерными слоями / А.С. Широканев, Д.В. Кирша, А.В. Куприянова // Информационные технологии и нанотехнологии, 2017. – С. 1615-1619.

- [19] Shirokanev, A. Development of Crystal Lattice Comparison Method Invariant to Bravais Unit Cell Choice / A. Shirokanev, D. Kirsh, A. Kupriyanov // IEEE Xplore, 2017. – P. 125-129.
- [20] Боресков, А.В. Основы работы с технологией CUDA / А.В. Боресков, А.А. Харламов. – М.: ДМК Пресс, 2010. – 232 с.

### Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 16-41-630761, № 17-01-00972, № 18-37-00418), государственного задания 3.3025.2017/4.6 и Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, в рамках выполнения работ по государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН (соглашение №007-ГЗ/ЧЗ363/26).

## Effectiveness investigation of a high-performance crystal lattice parametric identification algorithm based on CUDA technology

A.S. Shirokanev<sup>1,2</sup>, D.V. Kirsh<sup>1,2</sup>, A.V. Kupriyanov<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Samara National Research University, Moskovskoe Shosse 34A, Samara, Russia, 443086

<sup>2</sup>Image Processing Systems Institute of RAS - Branch of the FSRC "Crystallography and Photonics" RAS, Molodogvardejskaya street 151, Samara, Russia, 443001

**Abstract.** The study of substances with a crystal structure is a complex multi-step process. The crucial step in the analysis of the crystalline substance is the unit cell parameter estimation. Estimation of the parameters of the unit cell of the crystal lattice is a particular problem. This problem consists in finding the parameters of the model of the crystal lattice according to the information that can be extracted from the substance. Recently, the most accurate structure substance information can be obtained using an. The electron microscope linear resolution is high enough to observe the atomic structure of a substance. The task of estimating the parameters in this case is reduced to the reconstruction of the three-dimensional structure of the crystal lattice by two-dimensional images obtained from an electron microscope, and the estimation of the parameters of the unit cell of the crystal lattice by the formed three-dimensional structure. In previous works, algorithms for the parametric identification of crystal lattices, based on solving a local optimization problem, were presented. However, the analysis of a large database of crystal lattices requires a lot of time. In this paper, a high-performance algorithm for the parametric identification of crystal lattices using the CUDA technology was proposed. Efficiency study was carry out using GeForce NVidia GTX 1070 Ti. If we process crystal structure with size more 32 the acceleration is higher than 70. We also concluded that the algorithm runs more efficiently by using a large number of CUDA blocks.