

Шадура О.В.

Національний технічний університет України

«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»

ОПТИМІЗАЦІЯ ПАКЕТУ ФІЗИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ GEANTV ЗА ДОПОМОГОЮ ГЕНЕТИЧНИХ АЛГОРИТМІВ

У статті за допомогою генетичних алгоритмів та еволюційних стратегій досліджуються методи оптимізації продуктивності програмного пакету GeantV, який є прототипом програмного забезпечення наступного покоління для моделювання транспорту частинок у фізиці високих енергій. Основним підходом для оптимізації є використання модифікації генетичного алгоритму NSGA-II шляхом включення в нього додаткового генетичного оператора (НГК-оператора), що побудований на основі методу нецентрованих головних компонент. Показано, що включення такого оператора надає змогу прискорити збіжність генетичного алгоритму до оптимального фронту Парето для задач багатокритеріальної оптимізації. На прикладі оптимізації продуктивності симуляцій GeantV для транспорту частинок через простий калориметр та через детектор експерименту CMS (LHC, CERN) отримано, що за допомогою застосування НГК-оператора в генетичному алгоритмі вдалося збільшити ефективність використання обчислювальних ресурсів для аналізу даних.

Ключові слова: задача оптимізації «чорної скриньки», оптимізація складних систем, симуляція транспорту частинок, генетичний алгоритм, генетичний оператор.

Постановка завдання. Дослідження в області фізики високих енергій (ФВЕ) та ядерної фізики неможливі без використання великих обчислювальних потужностей і спеціального програмного забезпечення для обробки, моделювання та аналізу даних. Така ситуація зумовлена як великою кількістю даних, що генерується в експериментах на сучасних прискорювачах, так і статистичною природою аналізу даних і складністю алгоритмів обробки даних, які використовуються. Крім того, під час комп'ютерної обробки даних необхідно моделювати умови роботи прискорювача, детекторів та фізичних процесів у детекторі одночасно з генерацією наборів даних та їх обробкою.

Експлуатація детекторів в експериментах ATLAS, CMS, ALICE на Великому адронному колайдері (ВАК) у ЦЕРНі (м. Женева, Швейцарія) показала, що статистика, набрана за час роботи ВАК в 2010–2017 рр., становить понад 60 Пбайт «сирих» (необроблених) даних. Такий великий обсяг інформації, що надходить вже зараз, і очікуване зростання обсягу даних на наступних етапах роботи колайдера потребують розробки нових комп'ютерних моделей, методик та методів управління роботи з даними, створення нових підходів для оптимізації роботи програмних систем для обробки даних.

У статті ми фокусуємося на дослідженні оптимізації продуктивності програмного пакету GeantV, який є прототипом програмного забезпечення наступного покоління для моделювання

транспорту частинок через різні типи матеріалів. Він має увібрати в себе та розвинути всі позитивні сторони пакету Geant4, який є стандартом для оброблення даних у ФВЕ, і є одним із головних програмних пакетів, що використовують для аналізу даних експериментів на ВАК.

З метою оптимізації продуктивності пакету GeantV ми використовуємо модифікацію генетичного алгоритму NSGA-II [9, с. 182] шляхом включення в нього, розробленого нами в статті [11, с. 126], додаткового генетичного оператора (НГК-оператора), що побудований на основі методу нецентрованих головних компонент і який надає змогу прискорити збіжність генетичного алгоритму до оптимального фронту Парето для задач багатокритеріальної оптимізації. Для технічної реалізації цього підходу було розроблено комплекс програмних модулів на основі НГК-оператора та виконано його інтеграцію в бібліотеку генетичних алгоритмів у пакеті симуляцій транспорту частинок GeantV. В результаті оптимізації продуктивності симуляцій транспорту частинок через простий калориметр та детектор експерименту CMS отримано, що за допомогою застосування НГК-оператора в генетичному алгоритмі вдалося збільшити ефективність використання обчислювальних ресурсів для аналізу даних.

Програмні пакети Geant4 та GeantV. Geant4 – це програмний пакет для моделювання проходження частинок через речовину. Сфери його застосування включають фізику та астро-

фізику високих енергій, фізику прискорювачів елементарних частинок та ядерну фізику, а також дослідження в медичній та космічній науці. Основні довідкові документи для Geant4 були опубліковані в [1, с. 250].

Симуляції на основі Geant4 є дуже складними і одними з найбільш ємних обчислювальних завдань в експериментальній фізиці високих енергій. Протягом всього першого етапу роботи ВАК (Run-I), більше половини WLCG (Всесвітня обчислювальна мережа ВАК – Worldwide LHC Computing Grid) було задіяно в моделюванні 10^{10} високоенергетичних подій, що еквівалентно 10^{12} сек CPU часу.

Введення в 2013 р. в Geant4 можливостей багатопотоковості для обробки подій принесло значну економію пам'яті для експерименту CMS. Незважаючи на те, що продуктивність роботи пакету Geant4 не поліпшилася в значній мірі з введенням багатопотоковості (відхилення від ідеального масштабування було приблизно на 10% при виконанні на 30 ядрах), використання пам'яті для програм CMS-моделювання було значно зменшено, так було використано 170 Мб для першої події і лише 30 Мб на подію для кожного додаткового потоку.

Через оптимізацію коду та вдосконалення програмної платформи Geant4 і алгоритмів обробки подій, середнє підвищення продуктивності Geant4 протягом проведення експериментів на ВАК (2010–2015) було порядку 35%. Завдяки зусиллям команди Geant4 цей програмний пакет вже має високий рівень оптимізації, що ускладнює отримання додаткового підвищення продуктивності в майбутньому.

Проект GeantV вважається програмним забезпеченням наступного покоління для симуляцій транспорту частинок для обробки експериментів із фізики високих енергій в експериментах на Великому адронному колайдері. GeantV, у порівнянні з Geant4, має більш гнучку структуру, що призводить до кращих можливостей широкої підтримки ним різних обчислювальних архітектур і кращої масштабованості для складних обчислень. Тоді як Geant4 є програмним додатком, що використовує найбільше процесорного часу для розрахунків у ФВЕ і був розроблений переважно понад 10 років тому та не демонструє жодної гнучкості для оптимізації часу обчислення для стандартних задач моделювання.

Визначення багатокритеріальної задачі для симуляцій з використанням GeantV. Дослідження в статті сфокусовано на застосуванні

алгоритмів стохастичної оптимізації та методів машинного навчання без учителя, включаючи багатовимірний статистичний аналіз, використовуваний для оптимізації налаштування симуляцій Монте-Карло у ФВЕ в програмному пакеті GeantV.

Як базовий метод оптимізації симуляцій у GeantV використовувалися генетичні алгоритми. Основною конструкцією в цих алгоритмах є спеціальні генетичні оператори [8, с. 57] – селекція, кросовер та мутація, що діють у лінійному просторі: $\Lambda = (p_1, p_2, \dots, p_m)^t$ – векторів популяції, де компоненти p_α є ймовірністю знайти α -ту особину в генетичній популяції, яка складається з N різних особин. Генетичний оператор $G_\alpha(\vec{p})$ визначається ймовірністю появи особини α в наступній генерації нащадків, якщо попередня популяція була \vec{p} . Тоді повний генетичний оператор задається відображенням $G: \Lambda \rightarrow \Lambda$ і є композицією трьох відображень: селекції F , мутації U та кросоверу C :

$$G: \Lambda \rightarrow \Lambda, G(\vec{p}) = C \cdot U \cdot F(\vec{p}).$$

Додавання спеціальних операторів до генетичного алгоритму може привести до зменшення шуму та більш швидкого наближення до істинного фронту Парето для задач багатокритеріальної оптимізації. Цей фронт визначає набір оптимальних розв'язків, що не домінують щодо один одного, та при переміщенні від однієї точки фронту Парето до іншої досягається певний програв в одній фітнес-функції та виграв – в іншій. Парето фронт складається з ідеальних осіб популяції в генетичному алгоритмі (ГА), вибраних на основі відповідного набору параметрів оптимізації, і при його знаходженні зручно застосувати ортогональні перетворення та розглядати властивості варіації даних, щоб виявити специфічні структури в даних. Збіжність генетичних алгоритмів досліджувалась у роботах [7, с. 126]. Для процедури оптимізації GeantV запропоновано набір параметрів, які вважають найважливішими для налаштування продуктивності програмних додатків. Це – явний час роботи додатку, споживання пам'яті та інші специфічні модельно залежні регулятори для налаштування проведення обчислень при роботі GeantV.

Однією з головних особливостей GeantV є застосування методу векторизації для обробки даних експериментів. Ідея використання векторизації стає дуже популярною в фізиці високих енергій. Невекторизований код використовує близько 25% потужності сьогоденного обладнання. Він виконує інструкції за кожним набором даних для вхідних даних, замість виконання інструкції на

векторі набору даних для вхідних даних, але у тій самій кількості циклів. Оскільки векторизований код загалом більш компактний (через операції над векторами), він зазвичай також покращує продуктивність кешу.

Векторизація підвищує ефективність (і, зокрема, пропускну спроможність) програмного забезпечення ФВЕ, використовуючи векторну частину центрального процесору. Покращення продуктивності можливо легко помітити, коли всі дані зберігаються в кешах. Якщо дані потрібно часто переміщати з пам'яті в кеш-пам'ять, то підвищення продуктивності стає непомітним, як це можна побачити у випадках обробки великого розміру масиву даних. Тут витрати пов'язані з переміщенням даних, домінують настільки, що ефект векторизації практично не спостерігається, або векторизація має несприятливий ефект для обчислень.

Симуляції за допомогою GeantV являють собою складну систему взаємодії різних програмних модулів, необхідних для забезпечення симуляції транспорту частинок, яка включає транспортування через евристично керований механізм із використанням різного набору навігаторів, політику планування, фізичні моделі з таблицями поперечних перерізів взаємодій частинок у різних реакціях, а також модельні бібліотеки з геометричними алгоритмами [4, с. 012023].

Для ефективної роботи великих програмних додатків, таких як GeantV, що налаштовані на використання обчислювальних стратегій SIMD/MIMD (single instruction, multiple data – одиночний потік команд, множинний потік даних та multiple instruction, multiple data – множинний потік команд, множинний потік даних), та паралельного моделювання також необхідно враховувати складність процесорів та архітектур, що використовуються для моделювання.

Ці завдання класифікуються як задача оптимізації «чорної скриньки» за допомогою пошуку екстремального набору точок та локальних оцінок для визначення функцій. Завданням оптимізації для «чорного ящика» є мінімізувати векторну функцію $f(x): \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, для якої аналітична форма невідома [7, с. 126]. Оптимізацію «чорної скриньки» можна провести на двох рівнях, отримавши:

1) оцінку значень функції без похідних і градієнтів, коли градієнтні методи є недоступними;

2) за допомогою приблизних значень градієнтів функції, що взагалі потребує великої кількості оцінок.



Рис. 1. Проблема оптимізації «чорної скриньки»

У статті ми розглядаємо оптимізацію симуляції за допомогою GeantV як оптимізацію задачі «чорної скриньки» з набором фітнес-функцій. Для оптимізації симуляції GeantV нам треба узагальнити набір цілей, які ми хотіли б досягти за допомогою цієї процедури, та врахувати їхню залежність від великої кількості векторних параметрів. Із цією метою ми використовуємо такі процедури:

1) оптимізація загального часу виконання прикладів симуляції та середнього часу для створення однієї популяції;

2) зменшення використання пам'яті додатків;

3) оптимізація кількості викликів інструкцій для всього моделювання, специфічного для поточної архітектури;

4) зниження спорідненості пам'яті (оптимізація NUMA і т. д.), споживаної мікропроцесором, що використовується для моделювання;

5) підвищення ефективності та завантаження, специфічного для поточної архітектури;

6) максимізування операційної інтенсивності моделювання.

Паралельне моделювання за допомогою GeantV. Протягом останнього десятиліття розвиток Geant4 [3, с. 667] був спрямований на його застосування для повного моделювання детекторів в експериментах на БАК. Основними його недоліками є складний дизайн, що містить глибокі ієрархії різних структур даних, та складна система функціональних викликів, які важко експлуатувати на найкращих сучасних архітектурах, через низькі значення показників ефективності інструкцій та неефективне використання цим додатком кеш-пам'яті.

Проект GeantV [2, с. 012019] розпочався в 2013 р. В рамках проекту було здійснене ретельне R&D в кількох напрямках, включаючи паралелізм, і збільшення пропускну спроможності, включивши SIMD у код та вдосконаливши код, щоб уникнути непотрібних навантажень та інструкцій. Це дало змогу ефективно виконувати програми GeantV на багатоядерних векторних архітектурах, таких як Xeon Phi 7120X (Knights Landing), і оптимізувати використання кеш-пам'яті системи. Очікується, що покращена пропускну спроможність для подій, компенсує зростаючу потребу в моделюванні даних для режиму роботи з HL-LHC,

який буде генерувати величезну кількість подій. Зазначимо, що GeantV має значні переваги через використання оптимізованих компонентів, таких як нова бібліотека моделювання геометрії VecGeom, яка забезпечує кілька нових функцій, включаючи векторизацію та прозорий доступ до новітніх комп'ютерних архітектур. Бібліотека VecGeom [4, с. 012023] здатна обробляти вектори треків частинок, що чудово адаптуються до багатопоточних завдань. Однією з переваг VecGeom порівняно з подібними бібліотеками є висока портативність для використання на прискорювачах (графічних процесорах та для Xeon Phi 7120X (Knights Landing) та ін.).

Обговорюючи оптимізацію моделі GeantV, ми можемо виділити вісім рівнів паралелізму роботи GeantV, причому тонкодисперсний паралелізм є єдиним засобом, який дає змогу отримувати додаткові ефекти як у пропускій здатності, так і у часі для отримання рішення задачі оптимізації. Інші методи мають свої сильні та слабкі сторони: паралелізм на рівні апаратної системи дає дуже мало користі, тоді як багатоядерний паралелізм дає змогу зменшити об'єм використаної пам'яті та час для рішення, але не вирішує проблему скорочення пропускну спроможності. З іншого боку, високопродуктивні обчислення дають змогу запускати багато паралельні обчислювальні завдання з високою пропускою спроможністю. Ці різні параметри паралелізму можуть бути включені в GeantV і збільшують розмірність простору оптимізованих параметрів. Наша ідея полягає в тому, щоб спробувати оптимізувати моделювання, використовуючи спеціальний набір інструментів для машинного навчання, намагаючись збільшувати обсяг завдань для обробки даних.

Основними характеристиками функціональності ядра GeantV додатку є надання оптимізованих структур даних та паралельних служб для керування паралельними робочими потоками, забезпечення когерентності роботи шляхом «пакування» частинок у вектори та використання цих векторів в алгоритмах геометрії та фізики. Менеджер запуску – це програмний модуль, що дає змогу застосувати задану конфігурацію при моделюванні та використовувати відповідні параметри моделювання. Диспетчер керування також контролює цикл події, керування системи подій та такі параметри паралельності, як завершення роботи.

Як передумова для запуску симуляції GeantV [3, с. 072006], користувачеві потрібно буде створити об'єкт конфігурації, який може бути налаштований за допомогою різних наборів параметрів,

таких як розмір буфера подій, розмір вектора або кілька варіантів налаштування паралельної роботи GeantV. Наші інструменти для налаштування симуляції GeantV [6, с. 042026] – це конфігурації набору параметрів, що працюють на вузлах та входять у матрицю параметрів, що сформована на результатах спостереження за планувальником та характеристиками вузлів, і які можна оцінити за допомогою матриці функцій фітнесу [6, с. 042026].

Подальше вдосконалення ефективного управління симуляціями можна було б запровадити з точки зору управління подіями, виходячи з параметричної настройки еволюційного алгоритму для багато завантажених моделювань та введення в дію сервера диспетчеризації подій. Важливим для використання є застосування нової політики балансування подій у середовищі, що складається з кількох вузлів та може бути вирішена за допомогою стратегії, яка допомагає зменшити час під час виконання завдань на менш ефективних вузлах обробки.

Налаштування параметрів настройки для багатокритеріальної задачі (MOP). Як вхідний вектор або генетичний індивідуум для генетичного алгоритму ми використовуємо набір параметрів, що використовується у GeantV:

- 1) параметри обробки подій: загальна кількість подій, кількість подій у буфері, поріг для визначення пріоритету подій;
- 2) параметри паралельності: кількість потоків паралельності процесора, політика планування для оптимізації локальності;
- 3) розмір вектору: вихідний розмір вектора, максимальний дозволений розмір вектора;
- 4) специфічні параметри настройки: кількість кроків для алгоритму визначення важливих фігур у геометрії детектору, порогове значення між перемиканням між скалярним та векторним режимами додатку, спеціальний поріг під час активації диспетчеру завдань, поріг для пам'яті, поріг для знищення подій.

У дослідженнях GeantV [3, с. 072006]] виконувалися тести для перевірки парадигм паралельного програмування – MPI в гетерогенному кластері з загальним числом подій, розділених між всіма процесами. Попередні результати показали хороше масштабування, еквівалентне масштабуванню для одиночного вузла, що підтверджує можливість ефективної обробки завдань у багато-серверному середовищі.

Багатосмні паралельні обчислення і очікувані результати продуктивності. Концепція

грід для ВАК, що дала змогу запустити мільйони завдань реконструкції подій у детекторах паралельно, базується на ідеї про те, що фізичні події загалом не корелюються. Попередні оцінки в процесі нашого дослідження вказують, що ми можемо сподіватися на прискорення до 5% при використанні сучасних процесорів для моделювання методом Монте-Карло для експериментів у ФВЕ. Це дасть змогу звільнити ресурси, що використовуються для задач із високопродуктивними обчисленнями, та забезпечити більш ефективні обчислення.

Загальна ідея оптимізації полягає в тому, що наш алгоритм може працювати в режимі налаштування, лише використовуючи отримані в процесі оптимізації значення параметрів для аналізу Парето фронту. Це дає змогу отримати максимальну користь від оптимізації процесу симуляцій.

Стохастична оптимізація базується на налаштуванні параметрів генетичного алгоритму, щоб мати змогу оптимізувати параметри у середовищі для «ідеальних» високопродуктивних обчислень, де всі обчислювальні процеси є «ідеальними» та мають однакову конфігурацію апаратного забезпечення. У генетичному алгоритмі ми використовуємо ідею попередньої обробки даних (параметрів), використовуючи метод головних компонент для очищення зашумленого набору даних, за допомогою введеного нами нового генетичного оператора, що допомагає підвищити конвергенцію генетичного алгоритму.

Основні підходи, що використані в дослідженні оптимізації програмного пакету GeantV:

1) з точки зору генетичного алгоритму генерація нашого генетичного алгоритму становить N завдань;

2) генетичний індивідуум є вектором вхідних параметрів (у випадку першого покоління це випадково згенеровані обмежені значення);

3) функція оцінки функції фітнесу – це вектор значень заданих функцій.

Повторне надсилання нових N завдань із попередньо визначеними генетичними індивідуумами (векторами параметрів), які були отримані за допомогою генетичних еволюційних операторів, продовжується доти, поки ми не згенеруємо нове покоління. Процес буде знову повторений, поки не буде знайдено «ідеального» налаштування параметрів або ідеальну Парето точку на фронті Парето. Переваги цієї схеми полягають в тому, що вихідні дані для фізики насправді не змінюється при зміні налаштувань, але ми можемо збирати дані про продуктивність системи та спробувати

налаштувати її під час роботи величезної кількості завдань при аналізі даних.

Недолік полягає в тому, що насправді обчислювальні ресурси не настільки ідеальні та при появі нових архітектур, процесорів, графічних процесорів тощо нам потрібно застосовувати наш метод також для негетерогенних ресурсів. Ми можемо намагатися бути «експертами» і розподілити ресурси вручну (кажучи, що ми очікуємо, що у нас є « N -груп» та організуємо для кожної групи окрему процедуру налаштування через « N » генетичних алгоритмів). Це може бути легко виконано в сучасних кластерах, де організовано різні черги, спираючись на «експертні» знання. Або ми можемо спробувати організувати таку складну систему разом, намагаючись зібрати та реорганізувати процес збору та аналізу даних. Цю задачу можна визначити як задачу балансування системи завантаження з урахуванням продуктивності для високопродуктивних обчислень за допомогою зв'язкових наборів даних.

Тестові налаштування GeantV. Важливою частиною визначення правильної процедури для оптимізації є наявність тестового набору, що охоплює різні випадки використання GeantV, забезпечуючи належне охоплення функціональності та взаємодії між ядром GeantV та іншими його підмодулями: фізику, геометрію тощо.

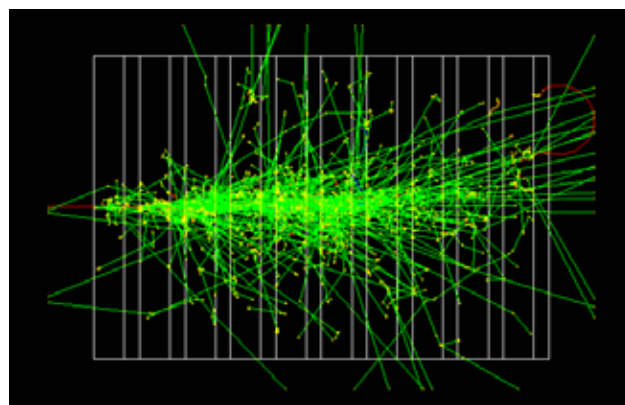


Рис. 2. Моделювання ExN03 – розробка електромагнітного душу частинок в «сандвіч»-калориметру

Для тестових налаштувань алгоритму оптимізації ми використовували код Run.C, який ще називається прикладом ExN03 і є прикладом на основі вибірки калориметра з шарами поглиначів Pb та розчинів рідини Ag. Всі електромагнітні процеси та розпади моделюються окремими процесами для генерації γ -випромінювання, e^+ , e^- частинок (використовується для вивчення лівня частинок). Як результат симуляції ми збираємо дані,

зв'язані з відповіддю детектора: зіткнення включають у себе дані про депозит енергії, довжину траєкторії в поглиначі та депозит енергії. Перші результати для прикладу ExampleN03 показують

дуже оптимістичний ефект використання нашого підходу для оптимізації з точки зору поліпшення обчислювальної продуктивності моделювання GeantV.

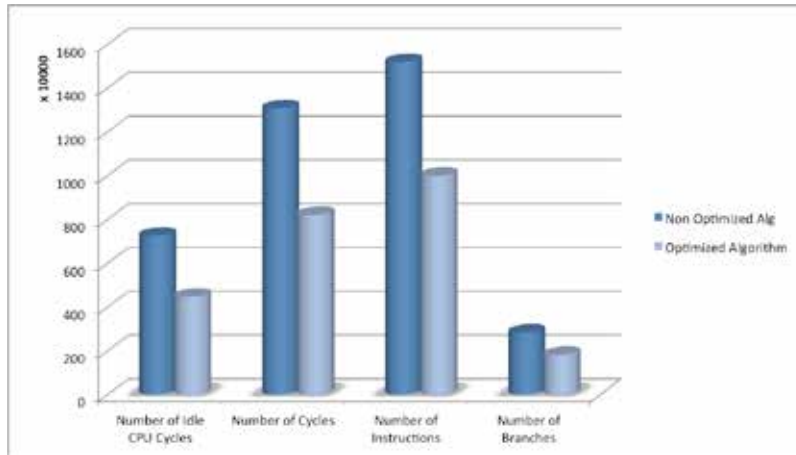


Рис. 3. Моделювання ExN03 – перші результати оптимізації

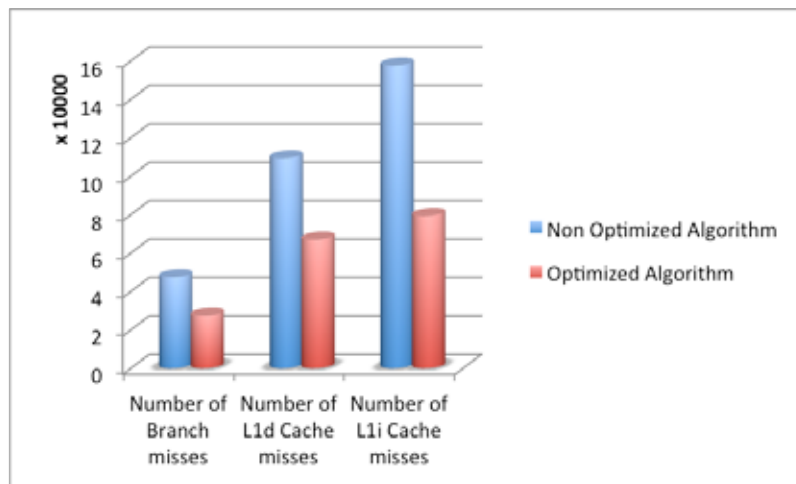


Рис. 4. Моделювання ExN03 – перші результати оптимізації

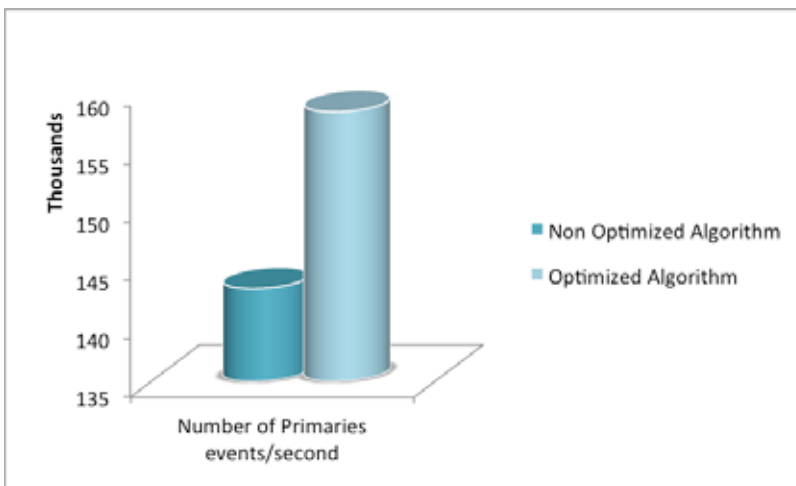


Рис. 5. Моделювання ExN03 – перші результати оптимізації

Попередні результати показують, що стохастично налаштовані параметри для паралельних додатків GeantV на обчислювальних процесорах Intel® Core™ i7-8700K змогли отримати перевагу від 18% прискорення роботи порівняно з початковим набором. Тим часом результати, отримані для процесора Intel (R) Xeon (R) CPU E5-2695, показують, що, налаштувавши ці параметри, ми змогли досягти зниження частки використання ЦП до 34%, що забезпечує стабільне використання пам'яті та зменшення пробігу час роботи пакетної роботи до 27%.

Висновки. У статті представлені результати застосування модифікованого генетичного алгоритму NSGA-II для оптимізації продуктивності програмного пакету GeantV. В генетичний алгоритм був включений запропонований у роботі [8, с. 57] новий генетичний оператор (НГК-оператор), який побудовано на основі методу нецентрованих головних компонент, і показано, що його застосування в тестових багатоцільових задачах оптимізації забезпечує прискорення збіжності генетичного алгоритму до оптималь-

ного Парето фронту. Результати впровадження генетичного оператора дають змогу прискорити конвергенцію у два рази, що дозволяє швидше отримати доступ до раннього Парето фронту.

Виконана в статті інтеграція НГК-оператора в типовий генетичний алгоритм була використана задля оптимізації програмного пакету GeantV, і було проведено дослідження його продуктивності порівняно з застосуванням не модифікованого генетичного алгоритму [8, с. 57].

Результати, отримані в процесі цього дослідження, показують ефективність концепції оптимізації продуктивності GeantV з використанням еволюційних налаштувань для обчислень. Цей метод може бути застосований для встановлення оптимально GeantV додатків на суперкомп'ютерах і кластерах для високопродуктивних обчислень, одночасно з можливістю налаштування масово паралельних наборів задач, оброблених у неоднорідному середовищі, і задля досягнення масштабованості в середовищах для високопродуктивних обчислень.

Список літератури:

1. Agostinelli S., Allison J., Amako K., Apostolakis J., Araujo H., Arce P., Asai M., Axen D., Banerjee S., and others. GEANT4 – a simulation toolkit. *Nuclear instruments and methods in physics research section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*. 2003. V. 506. № 3. P. 250–303.
2. Amadio G., Ananya A., Apostolakis J., Arora A., Bandieramonte M., Bhattacharyya A., Bianchini C., Brun R., Canal P., Carminati F., Duhem L., Elvira D., Gheata A., Goulas I., Jun S., Lima G., Mohanty A., Nikitina T., Novak M., Pokorski W., Ribon A., Sehgal R., Shadura O., and others. GeantV: from CPU to accelerators. *Journal of Physics: Conf. Ser. “Computing Technology for Physics Research”*. 2016. V. 762, № 1. P. 012019.
3. Amadio G., Apostolakis J., Bandieramonte M., Bhattacharyya A., Bianchini C., Brun R., Carminati F., Duhem L., Gheata A., Gheata A., Goulas I., Jun S., Lima G., Mohanty A., Novak M., Pokorski W., Ribon A., Sehgal R., Shadura O., and others. The GeantV project: preparing the future of simulation. *Journal of Physics: Conf. Ser. “Offline software”*. 2015. V. 664. № 7. P. 072006.
4. Apostolakis J., Bandieramonte M., Bitzes G., Brun R., Carminati F., Cosmo G., De Fine Licht J., Duhem L., Gheata A., Goulas I., Jun S., Lima G., Nikitina T., Novak M., Pokorski W., Sehgal R., Shadura O., Wenzel S.. Towards a high performance geometry library for particle-detector simulations. *Journal of Physics: Conf. Ser. “Computing Technology for Physics Research”*. 2015. V. 608. № 1. P. 012023.
5. Deb K., Pratap A., Agarwal S., Meyarivan T. A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: NSGA-II. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*. 2002. V. 6. P. 182–197.
6. Amadio G., Apostolakis J., Bandieramonte M., Bhattacharyya A., Behera A., Brun R., Canal P., Carminati F., Cosmo G., Duhem L., Folger G., Elvira D., Gheata A., Gheata A., Goulas I., Jun S., Hariri F., Konstantinov D., Kumawat H., Ivantchenko V., Lima G., Nikitina T., Novak M., Pokorski W., Ribon A., Sehgal R., Shadura O., and others. Stochastic optimization of GeantV code by use of genetic algorithms. *Journal of Physics: Conf. Ser. “Offline Computing”*. 2017. V. 898. № 4. P. 042026.
7. Shadura O., Petrenko A., Svistunov S. Multivariate convergence-targeted operator for the genetic algorithm. *Системні дослідження та інформаційні технології*. 2017. № 1. С. 126–140.
8. Shadura O., Carminati F., Petrenko A. Performance Optimization of Physics Simulations Through Genetic Algorithms. *Journal of Computer Science*. V. 15. № 1. P. 57–66.

ОПТИМИЗАЦИЯ ПАКЕТА ДЛЯ ФИЗИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ GEANTV С ПОМОЩЬЮ ГЕНЕТИЧЕСКИХ АЛГОРИТМОВ

В статье с помощью генетических алгоритмов и эволюционных стратегий исследуются методы оптимизации производительности программного пакета GeantV, который является прототипом программного обеспечения следующего поколения для моделирования транспорта частиц в физике высоких энергий. Основным подходом к оптимизации является использование модификации генетического алгоритма NSGA-II за счет включения в него дополнительного генетического оператора (НГК-оператора), построенного на основе метода нецентрированных главных компонент. Показано, что включение такого оператора дает возможность ускорить сходимость генетического алгоритма к оптимальному фронту Парето для задач многокритериальной оптимизации. На примере оптимизации производительности симуляций GeantV для транспорта частиц через простой калориметр и через детектор эксперимента CMS (LHC, CERN) выяснено, что с помощью применения НГК-оператора в генетическом алгоритме удалось повысить эффективность использования вычислительных ресурсов для анализа данных.

Ключевые слова: задача оптимизации «черного ящика», оптимизация сложных систем, симуляция транспорта частиц, генетический алгоритм, генетический оператор.

PERFORMANCE OPTIMIZATION OF THE PHYSICS SIMULATION PACKAGE GEANTV BY THE USE OF THE GENETIC ALGORITHMS

This article describes an investigation of genetic algorithms and evolutionary strategies methods used for the optimization of the performance of the GeantV software package, the next generation software for modeling transport particle in high-energy physics (HEP). The primary approach for optimization is a modification of the NSGA-II genetic algorithm with the additional genetic operator (UPCA operator), based on the method of non-centered principal components. It is shown this operator accelerates the convergence of the genetic algorithm to the optimal Pareto front for multi-objective optimization tasks. Optimizing, as an example, the performance of GeantV particle transport simulations through a simplified calorimeter and the CMS experiment detector (LHC, CERN), it was found that using the UPCA operator for a genetic algorithm improved the efficiency of utilization of computational resources for data analysis.

Key words: “black box” optimization, complex systems optimization, transport particles simulation, genetic algorithm, genetic operator.