

# Отчет о проделанной работе с использованием оборудования ИВЦ НГУ

**Тема работы.** "Создание и исследование алгоритмов многоцелевой оптимизации с использованием суррогатных моделей"

**Состав коллектива.**

1. Филатова (Гарагулова) Анастасия Керимовна, Новосибирский государственный университет, аспирант, akgaragulova@gmail.com (программист)
2. Щербаков Павел Константинович, Институт вычислительных технологий СО РАН, аспирант, 1doffys@gmail.com (программист)
3. Чирков Денис Владимирович, Институт вычислительных технологий СО РАН, с.н.с., к.ф.-м.н, chirkov@ict.nsc.ru (руководитель)

**Научное содержание работы.**

**Постановка задачи.** В задачах оптимизации для экономии времени бывает необходимо заменить точную, но вычислительно сложную, физическую модель на быстро вычисляемую суррогатную модель. Суррогатная модель аппроксимирует зависимость, реализуемую рассматриваемой физической моделью с необходимой для последующего использования точностью, и строится по некоторым данным (конечному множеству пар «набор входных параметров» - «значения выходных характеристик физической модели для набора входных параметров»).

Целью данной работы является построение алгоритмов для решения задач многоцелевой оптимизации сложных технических систем, использующие суррогатные модели (метамодели) для ускорения поиска решений (фронта Парето); исследование и сравнение свойств различных суррогатных моделей; внедрение суррогатных моделей в комплекс оптимизации проточных частей турбомашин CADRUNopt[1].

**Современное состояние проблемы.** Применение суррогатных моделей для ускорения решения оптимизационных задач приобрело большую популярность в последние десятилетия [2]. Метамодели позволяют существенно (в несколько раз) сократить время и затраты вычислительных ресурсов при решении задачи многоцелевой оптимизации [2]. В настоящее время существует много подходов, основанных на использовании Artificial Neural Network, Support Vector Machines, Kriging и др. Обзор этих подходов, а также методология построения суррогатных моделей даны в [2, 3].

[1] Chirkov D. V., Ankudinova, A. S., Kryukov, A. E., Cherny S. G., Skorospelov V. A. Multi-objective shape optimization of a hydraulic turbine runner using efficiency, strength and weight criteria // Structural and Multidisciplinary Optimization 58 (2018) pp. 627–640. doi: 10.1007/s00158-018-1914-6

- [2] Toscano, T.G.; Barron-Zambrano, J.H.; Tello-Leal, E. A review of surrogate assisted multiobjective evolutionary algorithms. *Comput. Intell. Neurosci.* 2016, 2016.
- [3] Бурнаев Е.В., Приходько П.В. Методология построения суррогатных моделей для аппроксимации пространственно неоднородных функций. *Труды МФТИ.* 2013. Том 5, №4.

**Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы.** Решаемая задача оптимизации формы лопасти рабочего колеса гидротурбин связана с расчетом трехмерных полей течения в гидротурбине для множества вариантов геометрий. При решении задачи используется генетический алгоритм, который может быть эффективно распараллелен и также требует использования большого объема вычислительных ресурсов. Схематически процесс оптимизации состоит из следующих шагов:

1. берутся начальные значения параметров  $x_1, \dots, x_N$ , соответствующие начальной форме лопасти рабочего колеса;
2. по значениям  $x_1, \dots, x_n$  восстанавливается срединная поверхность лопасти, которая одеается фиксированным распределением толщины  $d(u, v)$ . После этого в межлопастном канале рабочего колеса строится регулярная конечно-разностная сетка;
3. полученная сетка подается на вход модуля расчета невязкого 3D течения в рабочем колесе;
4. по рассчитанному полю скорости и давления вычисляется значение целевого функционала  $F$ ;
5. оптимизационный алгоритм получает значение функционала  $F$  и вырабатывает новый набор параметров  $x_1, \dots, x_N$ . Далее повторяется шаг 2.

Варьирование формы лопасти осуществляется путем варьирования числовых значений конечного числа параметров  $x_1, \dots, x_N$ , задающих ее форму. Параметризация формы лопасти должна быть, с одной стороны, достаточно гибкой, чтобы обеспечить большое число допустимых форм лопасти, с другой - содержать по возможности меньшее число параметров. В данной работе форму лопасти определяют 24 геометрических параметра: 16 угловых и 8  $RZ$ - параметров. В ходе оптимизации для каждого перебираемого варианта геометрии лопасти проводится расчет трехмерного течения в турбине в рамках уравнений Навье — Стокса несжимаемой жидкости, осреднённых по Рейнольдсу и замкнутых стандартной  $k$ - $\epsilon$  моделью турбулентности. Уравнения решаются численно с использованием разработанного в ИВТ СО РАН программного комплекса CADRUN.

Одним из недостатков генетических алгоритмов является необходимость вычисления целевых функций для большого числа точек, что ограничивает их применимость, если расчет целевых функций занимает много вычислительных ресурсов.

Эффективным подходом к сокращению количества ресурсоемких вычислений целевой функции является аппроксимация значений этой функции с помощью метамоделей (суррогатных моделей), которая строится по некоторому неполному набору данных — обучающей выборке. Для каждого элемента обучающей выборки проводится вычисление целевых функционалов с использованием ресурсоемких моделей.

В данной работе представлен следующий способ интеграции метамоделей (регрессионной модели) в многоцелевой генетический алгоритм.

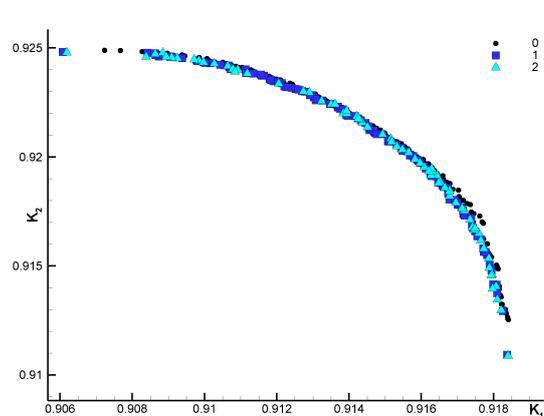
В качестве начальной обучающей выборки создается множество из случайных точек (под точкой подразумеваем набор параметров, определяющих форму рабочего колеса гидротурбины). Для каждой точки проводится гидродинамический расчет и расчет целевых функционалов. На основе полученной обучающей выборки строится метамоделей, с помощью которой алгоритм выполняет заданное количество “дешевых” итераций генетического алгоритма, в ходе которых значения целевых функционалов вычисляются только по метамоделей, без проведения гидродинамических расчетов течения. Из полученного множества решений отбирается

несколько точек, для которых проводится расчет целевых функционалов по ресурсоемкой гидродинамической модели, после чего выбранные точки добавляются в обучающую выборку для последующего построения новой метамодели. Алгоритм работает до выполнения заданного критерия остановки.

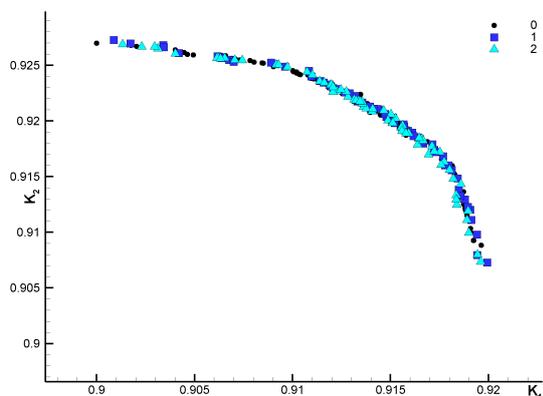
**Полученные результаты.** С использованием разработанного метода в оптимизационный комплекс CADDRUN-opt была внедрена метамодель, основанная на Гауссовых процессах (GP). Реализация метамодели GP взята из библиотеки sklearn на языке Python. Проведены тестовые расчеты, направленные на выбор подходящего ядра метамодели, размера обучающей выборки и количества «дешевых» поколений. Проведены тестовые расчеты задачи оптимизации формы рабочего колеса гидротурбины в постановках «аппарат-колесо (АК)» и «аппарат-колесо-отсасывающая труба (АКО)» с числом свободных параметров 8, 16 и 24. На указанных выше задачах показано существенное сокращение (в 3-5 раз) ресурсоемких вычислений.

В качестве примера рассмотрим задачу оптимизации формы рабочего колеса гидротурбины в постановках АК и АКО для 16 свободных параметров (см. Рис. 1). На рисунках представлены результаты двух оптимизаций: черные точки - оптимизация, где расчет значений целевых функционалов проводится по ресурсоемкой модели, синие квадраты - оптимизация с использованием суррогатных моделей. Чтобы проверить качество аппроксимации, из множества решений «синие квадраты» отбирается несколько точек. Для этих точек проводится гидродинамический расчет целевых функционалов. Полученные значения обозначаются голубыми треугольниками.

Для решения задачи оптимизации формы рабочего колеса гидротурбины ресурсоемкой моделью потребовалось 4320 гидродинамических расчетов, тогда как для задачи оптимизации с ускорением - 864 (850) в постановке АК (АКО). Можно заметить, что использование суррогатных моделей позволило сократить количество ресурсоемких вычислений в 5 раз.



(а) Постановка "аппарат-колесо".



(б) Постановка "аппарат-колесо-отсасывающая труба".

Рис. 1: Результаты задачи оптимизации формы рабочего колеса в постановке АК и АКО с 16 свободными параметрами.

В случае разрывной зависимости целевого функционала от свободных параметров качество GP-метамодели оказывается крайне неудовлетворительным и не улучшается при увеличении размера обучающей выборки. В таких задачах фронт Парето, полученный в ходе оптимизации с метамоделью, не сходится к «точному» фронту Парето, найденному при вычислении целевых функционалов по ресурсоемкой гидродинамической модели. В таком случае данные параметры фиксируются и далее никак не влияют на аппроксимацию.

В качестве примера рассмотрим оптимизацию рабочего колеса гидротурбины в постановке АК для 24 свободных параметров. Исследование показало, что в данной постановке имеется разрывная зависимость целевого функционала от одного параметра. На Рис.2 (а) видно, что увеличение обучающей выборки не улучшает качество аппроксимации. На Рис.2 (б) показано как фиксация параметра, соответствующего выявленной разрывной зависимости, влияет на

аппроксимацию. Для решения задачи оптимизации формы рабочего колеса гидротурбины ресурсоемкой моделью потребовалось 4320 гидродинамических расчетов, тогда как для задачи оптимизации с ускорением - 1100. Можно заметить, что использование суррогатных моделей позволило сократить количество ресурсоемких вычислений в 4 раза.

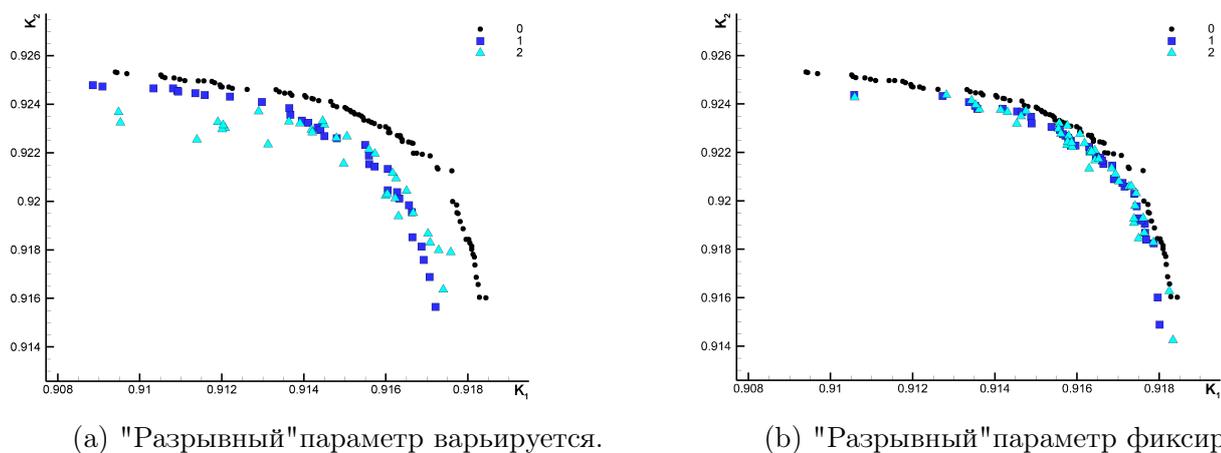


Рис. 2: Результаты задачи оптимизации формы рабочего колеса в постановке АК с 24 свободными параметрами.

**Эффект от использования кластера в достижении целей работы** Решение задачи оптимизации требует проведения трехмерных гидродинамических расчетов для большого числа вариантов геометрии. Поэтому успешное решение этой задачи за приемлемое время возможно лишь с использованием параллельного счета на многопроцессорном кластере.

#### Перечень публикаций, содержащих результаты работ.

1. Гарагулова А. К., Горбачева Д. О., Чирков Д. В. Сравнение генетических алгоритмов MOGA и NSGA-II на задаче оптимизации формы рабочего колеса гидротурбины // Вычислительные технологии. 2018. Т. 23, №5. С. 21-36. DOI: 10.25743/ICT.2018.23.5.003
2. Гарагулова А. К. Ускорение алгоритмов многоцелевой оптимизации путем использования суррогатных моделей. Тезисы XIX Всероссийской конференции молодых учёных по математическому моделированию и информационным технологиям. г. Кемерово, Россия, 29 октября – 2 ноября 2018 г. — Новосибирск: ИВТ СО РАН, 2018. — 94 стр. — ISBN: 978-5-905569-08-1.
3. Филатова А. К. Ускорение алгоритмов многоцелевой оптимизации путем использования регрессионных моделей. Материалы 58-й Международной научной студенческой конференции 10 – 13 апреля 2020 г., секция Математика, стр. 167
4. Готовится статья. D. Chirkov, A. Filatova, S. Polokhin. Multi-objective shape optimization of Francis runner using metamodel assisted genetic algorithm.