

Многодисциплинарная оптимизация, анализ данных и автоматизация инженерных расчетов с помощью программного комплекса *pSeven*

Евгений Бурнаев, Федор Губарев, Сергей Морозов, Александр Прохоров, Дмитрий Хоминич (компания DATADVANCE)

В настоящее время одним из основных средств уменьшения сроков проектирования и снижения затрат на разработку различных образцов как гражданской, так и военной техники является использование систем автоматизированного проектирования: трехмерного проектирования (CAD), моделирования и инженерного анализа (CAE), управления данными об изделии (PDM) и др. Как известно, CAD-системы дают возможность создать 3D-образ объекта, но в большинстве случаев не позволяют определить совокупности физических свойств проектируемого изделия. Эта задача решается с помощью CAE-систем, которые по имеющейся модели изделия позволяют рассчитать его технические и эксплуатационные характеристики. Однако большинство CAE-систем не приближает облик изделия и его характеристики к оговоренному в техническом задании – конструктор совместно с инженером-расчетчиком на основе анализа результатов, полученных в CAE-системе, должны самостоятельно определить новый облик изделия.

Таким образом, для эффективного решения задач по созданию новых образцов техники необходимо автоматизировать сам процесс поиска оптимального облика и внутренних свойств изделия. Для этого нужно связать CAD- и CAE-системы, создав единую среду, а также применить формализованные методики научного поиска, используя методы оптимизации и анализа данных.

Программный комплекс *pSeven* позволяет решить эти задачи. В частности, с его помощью можно интегрировать различные САПР и использовать их совместно с современным математическим аппаратом – алгоритмами анализа данных и оптимизации, автоматизируя тем самым процессы инженерного анализа и оптимизации параметров изделия. Лежащая в основе *pSeven* алгоритмическая библиотека **MACROS** включает в себя развитый инструментарий для проведения оптимизации и анализа данных:

- передовые математические методы интеллектуального анализа данных, снижения размерности, анализа чувствительности;
- современные высокоэффективные алгоритмы оптимизации, которые позволяют решать сложнейшие оптимизационные задачи за минимальное время и число итераций;

- инструменты для построения метамоделей по данным как натуральных, так и вычислительных экспериментов, а также для анализа построенных моделей. Использование программного комплекса *pSeven* влечет за собой улучшение технических характеристик проектируемых изделий и уменьшение числа дорогостоящих натуральных и ресурсоемких вычислительных экспериментов.

Пользовательский интерфейс пакета *pSeven* представлен как графической средой (*pSeven GUI*), так и командной оболочкой (*pSeven Shell*). Оба интерфейса полностью эквивалентны функционально и дают пользователю доступ ко всем возможностям комплекса. В дальнейшем речь будет идти только о графической среде *pSeven GUI*.

Общие сведения

Процесс решения типичной задачи инженерной оптимизации без применения *pSeven* выглядит следующим образом:

- проектирование изделия в среде CAD-системы, где задается его геометрия, состав и основные внутренние характеристики;
- расчет характеристик изделия с помощью пакетов инженерного анализа, проходящий в несколько этапов (запуск сеткопостроителя, препроцессора, запуск модуля расчета и постпроцессора);
- анализ и интерпретация результатов;
- перестроение модели и проведение инженерного анализа заново – до тех пор, пока не будут найдены оптимальные параметры.

Комплекс *pSeven* позволяет автоматизировать эти операции, предоставляя при этом алгоритмы для автоматического поиска оптимальных параметров. Процесс работы в программном комплексе *pSeven* выглядит следующим образом:

- Этап 1 – создание проекта и подготовка необходимых файлов.
- Этап 2 – составление схемы решения задачи в среде визуального программирования. Именно в схеме (далее – расчетной цепочке) определяется, какие именно CAD/CAE-пакеты используются, как между ними передаются данные и файлы, как параметризуется физическая модель, а также формируется оптимизационная задача и т.д.
- Этап 3 – исполнение (запуск) схемы как на локальных, так и на удаленных вычислительных ресурсах – решение задачи.
- Этап 4 – анализ полученных результатов с помощью встроенных средств визуализации.

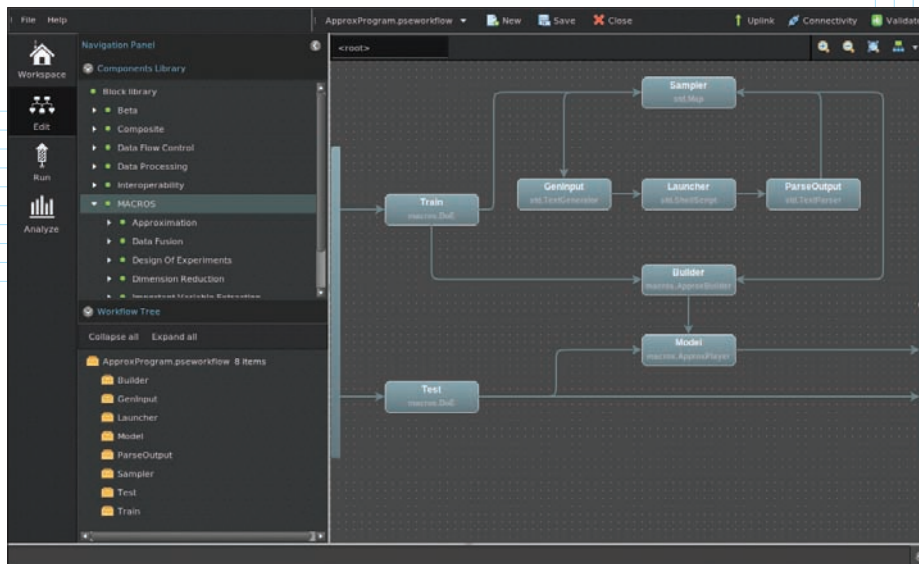


Рис. 1. Расчетная цепочка в пакете pSeven

Рассмотрим данные этапы подробнее.

Центральным понятием в работе с пакетом *pSeven* является **расчетная цепочка (РЦ)** – представление процесса расчета и инженерного анализа в виде ориентированного графа потока данных, аналогично тому, как это делается при моделировании бизнес-процессов (рис. 1). Основными компонентами расчетной цепочки являются **блоки** – компоненты встроенной библиотеки, реализующие различные функции комплекса, и **связи**, передающие данные между портами ввода-вывода блоков.

Каждый блок выполняет конкретную функцию, которая может рассматриваться как подзадача, а создание РЦ – как декомпозиция задачи и её структурированное представление. Представление задачи в виде расчетных цепочек – это возможность формализации и сохранения знаний и опыта, практик и методик проектирования за счет автоматизации и повторного использования имеющихся данных натуральных и вычислительных экспериментов.

Комплекс *pSeven* предоставляет пользователю развитую встроенную библиотеку блоков, через которые реализуются все основные функции *pSeven*. В частности, для взаимодействия с различными *CAD*-системами и другими внешними программами предусмотрены блоки, которые осуществляют передачу данных из расчетной цепочки внешнему процессу и обратно; при этом имеются как блоки общего назначения, так и специфичные блоки для интеграции с конкретными *CAD*-системами (например,

представление решаемой задачи, аналогичное дереву построения в *CAD*-системе. К счастью, в большинстве *CAE*-систем решаемая задача и результаты расчетов представляются в виде структурированных текстовых файлов, а иногда – в виде последовательности команд на том или ином языке программирования. Это позволяет организовать эффективное взаимодействие с большинством современных *CAE*-систем. Задача *pSeven* – формировать входные файлы для *CAE*-системы по определенному шаблону, затем запускать *CAE*-систему, а после завершения – анализировать выведенные в файлы или на консоль результаты, чтобы извлечь из них необходимые значения откликов. Как правило, требуется запускать несколько программ – например, сеткопостроитель, препроцессор, модуль расчета и постпроцессор. Следовательно, необходимо наладить взаимодействие между этими программами – к примеру, путем передачи файлов между ними, что особенно актуально, если программы запускаются на разных ОС или удаленно на разных машинах. Эти задачи решаются с помощью ряда специальных блоков *pSeven*, которые позволяют интегрировать в расчетную схему любую программу, имеющую интерфейс командной строки или пакетный режим. Для загрузки и выгрузки данных могут применяться блоки, поддерживающие текстовые файлы произвольных форматов.

Отдельный блок предназначен для автоматического формирования и запуска задачи на высокопроизводительных кластерах

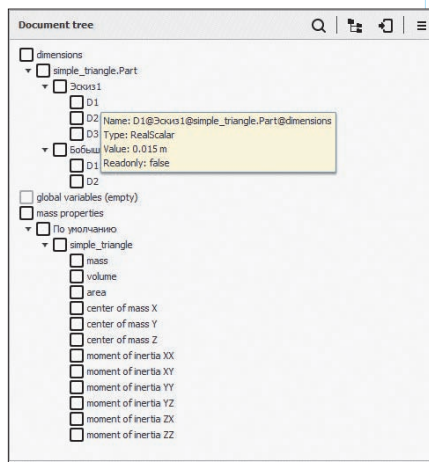


Рис. 2. Полное дерево параметров для простой детали (одна конфигурация)

(поддерживаются кластеры под управлением *SLURM*, *TORQUE* и *LSF*). Все алгоритмические модули *MACROS* (см. ниже) также доступны через библиотеку блоков – например, блок оптимизации, блок планирования экспериментов и т.д.

Важно, что реализация всех необходимых взаимодействий с внешними процессами достигается путем соответствующей настройки блоков в РЦ с помощью графического интерфейса, то есть не требует написания программного кода (однако при желании та же настройка может производиться в командной оболочке или путем запуска подготовленного файла-сценария). При этом сохраняется полная совместимость блоков друг с другом благодаря единому интерфейсу передачи данных. Использование унифицированного интерфейса передачи данных и широкий набор функций, реализуемый библиотекой блоков, позволяют полностью исключить необходимость ручной передачи данных между приложениями и снизить вероятность сопутствующих ошибок.

Характерной особенностью *pSeven* является возможность совмещать управление потоками данных и управление исполнением РЦ путем встраивания в нее различных алгоритмических конструкций – таких, как циклы, итераторы и условия (также представлены в виде блоков). Блоки управления потоком исполнения легко позволяют использовать представление потока данных для параметризации расчетов или проведения расчетных операций простым перебором параметров. В свою очередь, интеграция с алгоритмами *MACROS* дает возможность, например, организовать цикл многократного вызова газодинамических или конечно-элементных моделей с целью оптимизации изделия без привлечения дополнительных управляющих структур.

Помимо этого, поддерживается иерархическое конструирование РЦ – к примеру, объединение ранее подготовленной РЦ в один сложный блок, который затем может быть встроен как готовый компонент в другую РЦ, и вынесение выбранных параметров процесса в глобальную конфигурацию РЦ, а также сохранение различных предварительно настроенных конфигураций (наборов входных данных и параметров) для одной РЦ. Это облегчает взаимодействие участников процесса разработки.

Для отладки РЦ среда *pSeven* предоставляет встроенный механизм отслеживания процесса исполнения, называемый **Journaling**. Механизм основан на записи активности указанных пользователем

входных и выходных портов блоков. Собранная информация сохраняется в единой базе данных пользовательского проекта, что дает возможность работать с ней с помощью встроенной в среду *pSeven* системы обработки результатов. База данных проекта также является основой для постпроцессинга в *pSeven*. Из нее формируются отчеты о результатах выполнения расчетной цепочки. В обоих случаях доступна визуализация данных на 2D- и 3D-графиках (рис. 3), формирование таблиц и т.п. Итоговый отчет может быть сохранен в собственном формате *pSeven* и экспортирован в общепринятые форматы для табличных и графических данных.

Разнообразие компонентов в библиотеке блоков позволяет применять комплекс *pSeven* для решения задач любой сложности – от простейших расчетов до комплексных интеграционных задач. При этом развитый пользовательский интерфейс делает работу с *pSeven* удобной для пользователей различной квалификации – от приверженцев графического режима до активно применяющих в работе командные интерфейсы. Таким образом, становится возможным решение сложных задач предсказательного моделирования и оптимизации непосредственно в конструкторских бюро, без привлечения экспертов-математиков.

Платформа *pSeven* поддерживает несколько подходов к организации параллельных и распределенных вычислений:

- автоматический параллельный запуск независимых блоков на одной многоядерной или многопроцессорной вычислительной системе, не требующий настройки пользователем;
- автоматический параллельный запуск независимых блоков на различных компьютерах в пределах локальной сети, в том числе гетерогенной (имеющей в составе машины под управлением как *Windows*, так и *Linux*), при помощи менеджера *IceGrid* – в этом случае также возможна гибкая настройка правил распределения задач по сети;

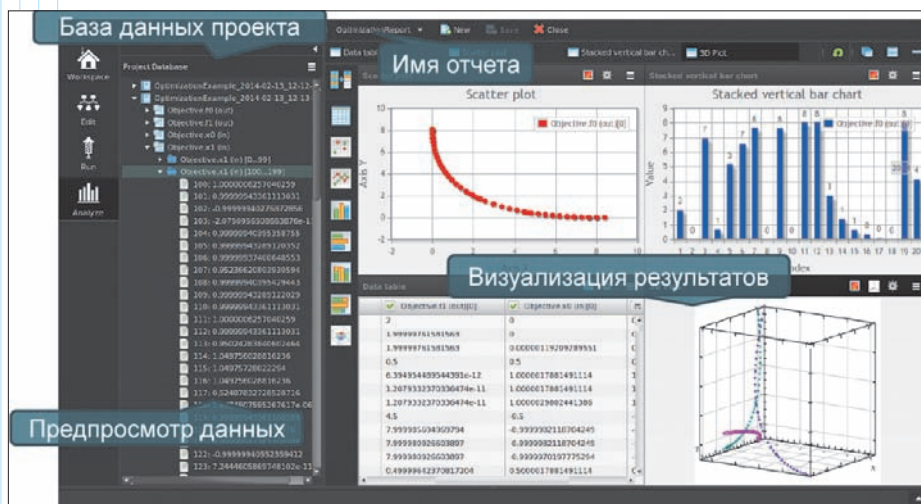


Рис. 3. Различные типы графиков во встроенной системе обработки результатов

- ручная настройка распределенного исполнения за счет удаленного запуска через *SSH* (*Secure Shell* – сетевой протокол прикладного уровня, позволяющий удаленно управлять операционной системой и туннелировать *TCP*-соединения);

- запуск задач на существующем высокопроизводительном кластере, при этом настройка задачи производится в среде *pSeven*.

В итоге использование *pSeven* как вычислительной платформы позволяет существенно ускорить проведение междисциплинарных расчетов и упрощает организацию параллельных и распределенных вычислений.

Состав библиотеки *MACROS*

Библиотека *MACROS*, лежащая в основе пакета *pSeven*, предоставляет доступ к большому числу современных эффективных алгоритмов, позволяющих:

- проводить междисциплинарную оптимизацию параметров изделий, включая одно- и многокритериальную оптимизацию, а также оптимизацию в условиях неопределенности;

- выделять наиболее значимые проектные параметры, используя методы анализа чувствительности и снижения размерности;

- строить метамоделли функций отклика по имеющимся результатам натурных или численных экспериментов;

- проводить планирование эксперимента.

Библиотека состоит из нескольких программных модулей общего назначения (*Generic Tools*).

1. Модуль оптимизации *Generic Tool for Optimization (GTOpt)*

В пакете *pSeven* содержится обширная библиотека методов оптимизации (в том числе междисциплинарной и многокритериальной). Математические методы, входящие в библиотеку *MACROS* (алгоритмическое ядро *pSeven*), уникальны, так как разрабатываются компанией *DATADVANCE* совместно с ведущими академическими институтами – в частности, с такими, как Институт проблем передачи информации Российской Академии Наук (ИППИ РАН) – и постоянно совершенствуются. Общей целью при разработке алгоритмов *GTOpt* является минимизация количества вызовов пользовательских функций (вычисления значений целевых функций и ограничений) при сохранении качества результатов, то есть решение сложнейших оптимизационных задач в сжатые сроки. В зависимости от задачи и заданных пользователем условий, программа сама подбирает тот алгоритм оптимизации, который наиболее подходит для решения (интеллектуальные эвристики выбора наиболее подходящего для данной задачи алгоритма). Все методы адаптированы для корректного учета особенностей инженерных задач (зашумленность, неявные ограничения, наличие областей невычислимости).

Ниже приведен список основных методов оптимизации, которые входят в модуль *GTOpt*, и решаемых с их помощью классов задач.

- ✓ Методы одно- и многокритериальной оптимизации с целевыми функциями и ограничениями как общего, так и специального вида:

- решение нелинейных оптимизационных задач без ограничений (симплекс-метод, метод нелинейных сопряженных градиентов, семейство квази-ньютонских методов второго порядка с различными стратегиями построения приближенного Гесса и линейного поиска);

- нелинейные оптимизационные задачи с ограничениями общего вида (методы последовательного квадратичного программирования с адаптивной фильтрацией, метод последовательного квадратичного программирования с квадратичными ограничениями и адаптивной фильтрацией (не имеет аналогов в мире));

- задачи удовлетворения ограничениям (поиск допустимых решений);

- многокритериальная оптимизация (уникальный метод градиентной многокритериальной оптимизации, позволяющий фактически полностью избежать вычислений вдали от оптимального множества).

- ✓ Оптимизация в условиях неопределенности:

- Оригинальный метод оптимизации в условиях неопределенности, основанный на использовании методов стохастического программирования и поддерживающий все виды возможных ограничений.

- ✓ Методы оптимизации на основе метамоделей (аппроксимационных моделей) для вычислительно затратных целевых функций:

- однокритериальная оптимизация с использованием аппроксимационных моделей;

- многокритериальная оптимизация на основе аппроксимационных моделей.

Начиная с версии *pSeven 2.1* в продукте, помимо алгоритмов собственной разработки, реализована интеграция оптимизационного инструментария математического ядра *IOSO*, разработанного командой профессора И.Н. Егорова. Технология оптимизации *IOSO* хорошо зарекомендовала себя в России в различных секторах машиностроения, особенно в авиадвигателестроении. В результате интеграции предприятия получили знакомые им и привычные в работе инструменты оптимизации в новой удобной программной среде.

2. Модуль метамоделирования *Generic Tool for Approximation (GTApprox)*

Позволяет строить модели функций отклика по данным натурных или численных экспериментов. Характеристики модуля *GTApprox*:

- набор разнообразных, как оригинальных, так и стандартных современных алгоритмов

построения метамоделей для разных типов данных и функций отклика (на основе гауссовских процессов, нейронных сетей, сплайнов, полиномиальных моделей и т.д.);

- встроенная логика выбора оптимального для данной задачи алгоритма;
- уникальные специальные режимы (анизотропная тензорная аппроксимация, предсказание неопределенности метамоделей, сглаживание и дифференцирование метамоделей и т.д.).

Метамоделей *GTApprox* обладают высокой точностью, при этом вычислительная сложность метамоделей, как правило, на порядок ниже сложности вычисления исходной функции. В результате использование метамоделей позволяет добиться существенного ускорения решения задач оптимизации, анализа чувствительности исследуемых зависимостей к отдельным параметрам и других.

3. Модуль планирования экспериментов *Generic Tool for Design of Experiments (GTDoE)*

Модуль *GTIVE* предлагает:

- классические экспериментальные планы (полнофакторный, латинские гиперкубы, последовательности Соболя, Гальтона, Фауре);
- адаптивное планирование эксперимента для создания метамоделей;
- оптимальные планы (*I*-оптимальный, *D*-оптимальный) для создания метамоделей.

4. Модуль поиска наиболее значимых параметров модели *Generic Tool for Important Variable Extraction (GTIVE)*

Функциональность модуля *GTIVE*:

- сортировка параметров по влиянию на целевую функцию по нескольким методам (линейная регрессия, взаимная информация, метод элементарных эффектов, метод *FAST*);
- собственная версия метода *FAST* с использованием метамоделей.

Модуль *GTIVE* позволяет, например, обнаружить несущественные или слабо влияющие на характеристики параметры изделия, чтобы в дальнейшем исключить их из рассмотрения. Таким образом можно понизить размерность в задачах оптимизации и метамоделирования для ускорения расчетов.

5. Инструмент снижения размерности модели *Generic Tool for Dimension Reduction (GTDR)*

Осуществляет преобразование большого числа исходных параметров модели к малому числу новых синтетических параметров. Делает возможным снижение размерности за счет сжатия с

частичной потерей информации, позволяет контролировать степень сжатия (размерность сжатого пространства) и величину потерь (ошибку восстановления).

6. Модуль консолидации данных *Generic Tool for Data Fusion (GTDF)*

Позволяет строить метамоделей на основе нескольких источников данных, имеющих разную точность (например, используя данные небольшого числа натуральных экспериментов и дополнительную выборку данных, полученных в результате вычислительных экспериментов) для уточнения поведения модели.

Пример применения программного комплекса *pSeven*

Для нахождения оптимальной конфигурации изделия, как правило, требуется выполнить следующее:

- выбрать параметры изделия, которые могут меняться в процессе исследования;
- выбрать математическую модель, адекватно описывающую поведение изделия во всём диапазоне параметров;
- описать математически поставленную задачу оптимизации;
- запустить задачу на решение.

Задачи многодисциплинарной оптимизации характеризуются привлечением для описания изделия нескольких моделей, взятых из разных дисциплин (экономическая модель, физическая и т.д.).

В качестве примера рассмотрим задачу оптимизации боковых несущих панелей конструкции пресса (рис. 4), где требовалось найти ряд конфигураций, оптимальных по критериям массы (объема) и цены конструкции. Переменными данной задачи являются следующие варьируемые параметры:

- геометрические размеры (семь параметров);
- марка стали и толщина листа (два дискретных параметра, набор из каталога).

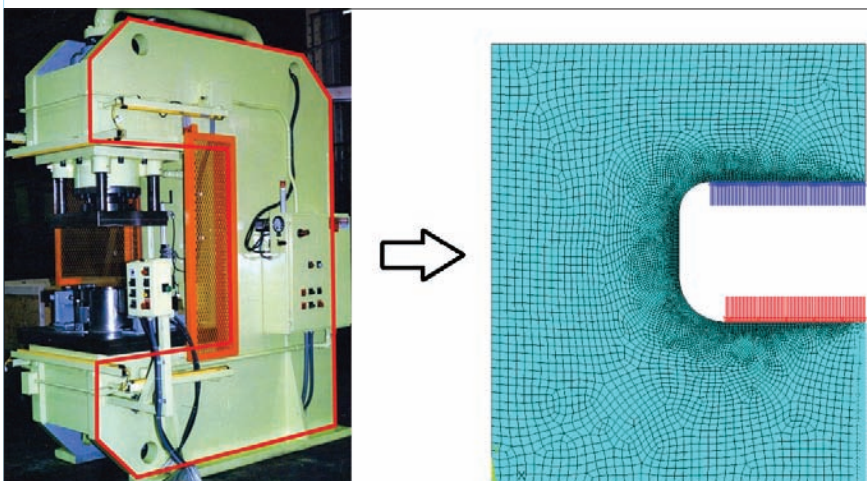


Рис. 4. Внешний вид изделия и прочностная расчетная модель

Ограничения:

- прочностные (ограничение по максимальным эквивалентным ограничениям);
 - жесткостные (ограничение на максимальное перемещение);
 - габаритные (габариты конструкции ограничены размерами металлических листов из каталога);
 - объем рабочего пространства (не менее заданного значения).
- Целевые функции:**
- объем конструкции в целом;
 - масса конструкции;
 - цена.

Таким образом, математически данная задача представляет собой задачу многокритериальной оптимизации с ограничениями и большим числом параметров; дополнительная сложность возникает из-за дискретной природы некоторых переменных.

Собственно поиск решения оптимизационной задачи производится модулем *GTOpt*, входящим в состав комплекса *pSeven*. Задача использует две модели: механическую модель, прогнозирующую прочность конструкции, и простую экономическую модель, прогнозирующую стоимость панели.

Для создания параметрической геометрической модели применялся CAD-пакет *SolidWorks*, а для расчета прочностных и жесткостных ограничений – система конечно-элементного анализа *ANSYS*. Экономическая модель была реализована непосредственно в среде *pSeven*. Основной частью работы по созданию РЦ была автоматизация передачи данных между модулем оптимизации и связкой *SolidWorks-ANSYS*, вычисляющей значения некоторых целевых функций и ограничений задачи.

В конфигурации блока *GTOpt* задается общее описание задачи (количество переменных, целевых функций, ограничений, их особенности и т.п.); в выходные порты этого блока поступают значения переменных, во входные принимаются рассчитанные значения функций. Этот блок управляет оптимизационным циклом, то есть при запуске начинает итеративный процесс, в ходе которого автоматически производится многократное вычисление функций для поиска оптимальных наборов параметров.

Для интеграции с *SolidWorks* в *pSeven* предусмотрен блок, принимающий на вход параметры модели (значения переменных, полученные от блока *GTOpt*) и вызывающий процесс *SolidWorks* для перерасчета геометрической модели. Для интеграции с *ANSYS* использовались блоки общего назначения, реализующие: формирование нового файла сценария *ANSYS* на каждой итерации оптимизатора; запуск *ANSYS* с передачей

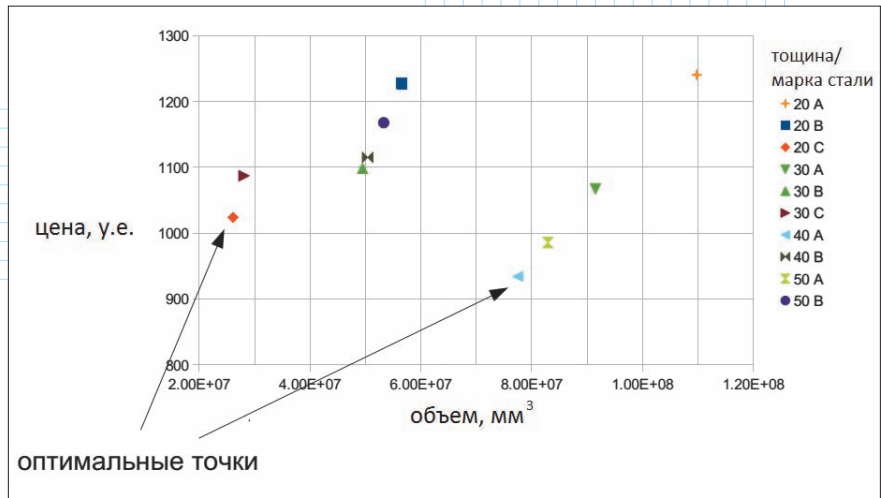


Рис. 5. Результаты оптимизации боковой панели прессы

системе текущих параметров сценария и механической модели; разбор файла отчета *ANSYS*, то есть считывание значений указанных полей и передача этих значений блоку *GTOpt* в качестве значений функций.

Таким образом, вся реализация данной задачи в *pSeven* представляет собой единую РЦ с автоматическим циклом оптимизации, которая легко может быть сконструирована пользователем, знакомым с работой в *SolidWorks* и *ANSYS*.

Конечным результатом работы блока оптимизации в случае многокритериальной задачи является множество оптимальных по Парето решений задачи оптимизации (Парето-фронт). С точки зрения конструктора, это множество состоит из различных предложенных оптимизатором наборов варьируемых параметров, приводящих к созданию различных конфигураций изделия (то есть значений целевых функций для каждого из наборов параметров). Как видно из рис. 5, всё множество оптимальных по сочетанию критериев конфигураций может быть представлено в удобном виде на графике, позволяющем конструктору принять окончательное решение о выборе материалов, объема и стоимости изделия.

Основываясь на мировом опыте практического применения (см. пресс-релиз компании *Airbus* о возможности уменьшения на 10% времени разработки семейства самолетов с помощью технологии *MACROS* – www.airbus.com/presscentre/pressreleases/press-release-detail/detail/airbus-to-reduce-lead-times-in-numerical-analysis-activities-for-aircraft-design), можно сказать, что использование программного комплекса *pSeven* позволяет автоматизировать процесс поиска оптимального облика и внутренних свойств изделия, и, как следствие, существенно сократить сроки проектирования, снизить затраты на разработку и эффективно решать задачи оптимизации непосредственно в конструкторских бюро предприятия. 🙄