

МЕТА-ОПТИМІЗАЦІЯ ПРОЦЕСУ ТОПОЛОГІЧНОГО ПРОЄКТУВАННЯ ТЕПЛОТЕХНІЧНИХ СТРУКТУР

О. Є. Жидков^{1,а}, А. В. Гільчук¹

¹ Навчально-науковий Фізико-технічний інститут

Анотація

Вдосконалення методології топологічної оптимізації є критичним чинником підвищення ефективності проектування сучасних теплотехнічних систем. У цій роботі на прикладі класичної 2D-тестової задачі (бенчмарка) теплопровідності (задача тепловідведення від об'єму до локального стоку) досліджено фундаментальну проблему методу SIMP (Solid Isotropic Material with Penalization) — високу чутливість до вибору гіперпараметрів штрафування та фільтрації, що неминуче призводить до передчасної збіжності алгоритму в локальних мінімумах.

Для подолання цього недоліку запропоновано дворівневу архітектуру мета-оптимізації, де зовнішній баєсівський алгоритм TPE (Tree-structured Parzen Estimator) автономно керує нелінійною динамікою нарощування штрафів у внутрішньому обчислювальному модулі COMSOL Multiphysics. Результати чисельного моделювання доводять, що мета-оптимізатор здатний знаходити неочевидні траєкторії гіперпараметрів, які формують глибоко розгалужені фрактальні мікроструктури. Запропонований підхід перевершив традиційні ручні стратегії налаштування (статичне штрафування, статичну проєкцію та лінійне продовження), забезпечивши зниження цільової функції (середньої температури) на 9.5–26.2% залежно від обраного базового методу.

Як додаткова перевага, алгоритм мінімізує необхідність інтуїтивного ручного налаштування обчислювального модуля, роблячи процес об'єктивним. Також у роботі ідентифіковано феномен розриву між математичною моделлю та фізичною реальністю при екстремальних значеннях радіуса фільтра, що визначає напрямок подальших досліджень у бік інтеграції процедури автоматичної валідації геометрії.

Ключові слова: топологічна оптимізація, мета-оптимізація, баєсівський пошук, теплопровідність, SIMP, Optuna, COMSOL Multiphysics.

Вступ

Топологічна оптимізація (ТО) на сьогодні є одним із найбільш прогресивних методів генеративного дизайну, що дозволяє синтезувати оптимальний розподіл матеріалу в межах заданого розрахункового домену. Серед різноманіття підходів найбільш розповсюдженим став метод SIMP (Solid Isotropic Material with Penalization). Його популярність зумовлена відносною простотою реалізації та можливістю використання градієнтних методів оптимізації. Основна ідея SIMP полягає в інтерполяції властивостей матеріалу (наприклад, теплопровідності k) через проєкту змінну θ з використанням степеневого закону штрафування:

$$k(\theta) = \theta^p k_0, \quad (1)$$

де $\theta \in [0, 1]$, а p — штрафний коефіцієнт, що зазвичай приймає значення $p \geq 3$ для отримання чітких бінарних («матеріал — порожнеча») структур.

Для отримання технологічних (чітких чорнобілих) дизайнів без числових артефактів, базовий

метод SIMP доповнюють процедурами просторової фільтрації та математичної проєкції (наприклад, проєкцією Гевісайда) [1].

На практиці пряме використання високих значень штрафних коефіцієнтів та жорстких проєкцій на початкових ітераціях призводить до сильної нелінійності цільової функції. Це створює так званий оманливий ландшафт — багатоекстремальне поле значень, де алгоритм градієнтного спуску застрягає в локальних мінімумах, видаючи фізично неефективні або надто складні топології.

Для нівелювання цієї проблеми застосовують метод продовження. Він передбачає поступове ітераційне нарощування ключових гіперпараметрів:

- Штрафування (p): від 1 (лінійна задача) до цільового значення (наприклад, 3 або 5).
- Проєкції (β): параметра крутизни функції Гевісайда. Він регулює чіткість меж між матеріалом та порожнечою, а також впливає на мінімальний розмір елементів.

Головна проблема полягає в тому, що вибір траєкторії зміни цих параметрів (крок нарощування, кількість ітерацій на кожному етапі) традиційно здійснюється вручну.

^аaezhdydkov@mail.com

снюється евристично. Тобто інженер підбирає параметри емпірично, базуючись на власному досвіді або загальних рекомендаціях, що не враховують специфіку конкретної фізичної задачі. Такий суб'єктивний підхід не гарантує досягнення глобального оптимуму та робить процес розробки надто залежним від кваліфікації фахівця.

Метою даного дослідження є впровадження мета-оптимізації для автоматизованого пошуку ідеальних траєкторій параметрів продовження. Замість ручного підбору пропонується використовувати зовнішній інтелектуальний алгоритм, який розглядатиме параметри p та β як змінні вищого порядку. Це дозволить мінімізувати ризик застрягання в локальних мінімумах та забезпечити стабільне отримання високоефективних топологій незалежно від початкових наближень.

1. Постановка задачі та математична модель

Для дослідження ефективності запропонованого алгоритму мета-оптимізації було обрано класичну 2D-тестову задачу (бенчмарк) топологічної оптимізації (Рис. 1) — задачу відведення тепла від об'єму до локального стоку [2].

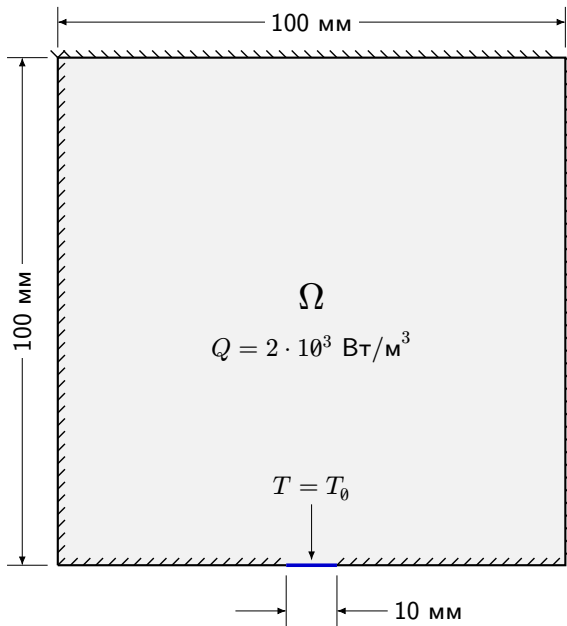


Рис. 1. Граничні умови 2D-бенчмарка.

Розрахункова область Ω являє собою квадрат розміром 100×100 мм. У всьому об'ємі області діє рівномірно розподілене внутрішнє джерело тепла з об'ємною густиною тепловиділення $Q = 2 \cdot 10^3$ Вт/м³. Усі межі області є теплоізолюваними (адіабатичними), за винятком невеликої ділянки (стоку) на нижній грані, де підтримується постійна температура $T_0 = 293.15$ К.

Стаціонарний процес теплопровідності в ізотропному середовищі описується диференціальним рівнянням у частинних похідних:

$$-\nabla \cdot (k(\mathbf{x}) \nabla T(\mathbf{x})) = Q(\mathbf{x}) \quad \text{в } \Omega, \quad (2)$$

де $T(\mathbf{x})$ — поле температур, $k(\mathbf{x})$ — коефіцієнт теплопровідності матеріалу в точці $\mathbf{x}$.

Для параметризації матеріалу використовується метод SIMP [3]. Кожній точці розрахункової області присвоюється проектна змінна $\theta(\mathbf{x}) \in [0, 1]$, де $\theta = 1$ відповідає суцільному матеріалу, а $\theta = 0$ — порожнечі. Залежність теплопровідності від проектної змінної задається інтерполяційною функцією:

$$k(\theta) = k_{\text{порожнеча}} + (k_{\text{матеріал}} - k_{\text{порожнеча}}) \cdot \theta^p, \quad (3)$$

де $k_{\text{матеріал}} = 1$ Вт/(м·К) — нормалізована теплопровідність матеріалу, $k_{\text{порожнеча}} = 10^{-3}$ Вт/(м·К) — теплопровідність порожнечі (задається малим числом для уникнення сингулярності матриці жорсткості), p — штрафний коефіцієнт, який робить проміжні «сірі» значення ($0 < \theta < 1$) термодинамічно не вигідними (Рис. 2).

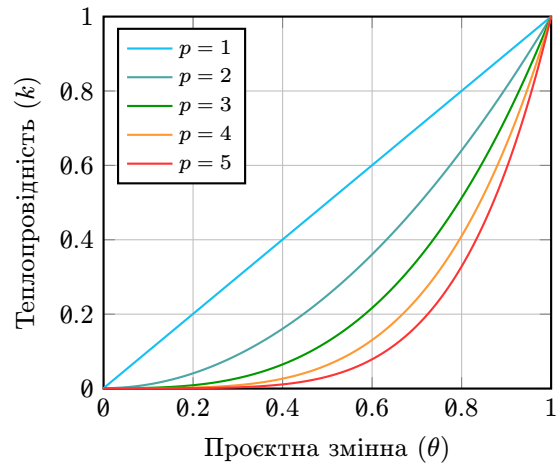


Рис. 2. Залежність між теплопровідністю матеріалу та його проектною змінною.

Для забезпечення технологічності дизайну та уникнення ефекту «шахової дошки» застосовується фільтр Гельмгольца з радіусом $R_{\text{мін}}$, після якого використовується проекція Гевісайда [1] для отримання чітких чорно-білих меж:

$$\bar{\theta} = \frac{\tanh(\beta\eta) + \tanh(\beta(\tilde{\theta} - \eta))}{\tanh(\beta\eta) + \tanh(\beta(1 - \eta))}, \quad (4)$$

де $\tilde{\theta}$ — відфільтроване поле проектної змінної, $\bar{\theta}$ — спроектоване фізичне поле, β — параметр крутизни проекції, $\eta = 0.5$ — поріг проекції.

Метою топологічної оптимізації є мінімізація середньої температури в розрахунковій області при заданому обмеженні на максимальну об'ємну частку матеріалу $V_f = 0.3$ (30%). Математична постановка задачі оптимізації має такий вигляд:

$$\begin{aligned} \min_{\theta} \quad & J(\theta) = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} T(\mathbf{x}) d\Omega \\ \text{за умов} \quad & \begin{cases} -\nabla \cdot (k(\theta) \nabla T) = Q & \text{в } \Omega, \\ T = T_0 & \text{на } \Gamma_{\text{стік}}, \\ -k(\theta) \nabla T \cdot \mathbf{n} = 0 & \text{на } \Gamma_{\text{адіаб}}, \\ \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \bar{\theta}(\mathbf{x}) d\Omega \leq V_f, \\ 0 \leq \theta(\mathbf{x}) \leq 1 & \forall \mathbf{x} \in \Omega. \end{cases} \end{aligned} \quad (5)$$

У класичному підході гіперпараметри p , β та $R_{\min}$ задаються інженером евристично або змінюються за наперед визначеним законом (метод продовження). У даній роботі ці параметри, а також динаміка їх зміни в процесі оптимізації, виступають об'єктами зовнішнього контуру мета-оптимізації для автоматичного пошуку глобального мінімуму функції $J(\theta)$.

2. Методологія мета-оптимізації

Для подолання проблеми чутливості топологічної оптимізації до гіперпараметрів у даній роботі запропоновано дворівневу архітектуру обчислювального комплексу. Внутрішній рівень (обчислювальний модуль COMSOL Multiphysics) відповідає за розв'язання диференціальних рівнянь та оновлення поля проектної змінної θ за допомогою алгоритму MMA (Method of Moving Asymptotes). Зовнішній рівень (середовище Python з бібліотекою Optuna [4]) керує процесом мета-оптимізації, автономно підбираючи оптимальні стратегії для внутрішнього рівня. Зв'язок між середовищами реалізовано через Java API за допомогою бібліотеки `mrh`.

2.1. Алгоритм баєсівської оптимізації

Пошук оптимальних гіперпараметрів здійснюється за допомогою алгоритму баєсівської оптимізації TPE (Tree-structured Parzen Estimator) [5]. На відміну від випадкового пошуку або пошуку по сітці, алгоритм TPE будує ймовірнісну модель цільової функції на основі історії попередніх запусків. На кожній ітерації алгоритм розділяє простір гіперпараметрів на дві групи («хороші» та «погані» результати) і генерує нові набори параметрів у тих зонах, які з найбільшою ймовірністю призведуть до покращення цільової функції (мінімізації середньої температури $T_{\text{сер}}$).

2.2. Параметризація методу продовження

Класичний метод продовження передбачає поступове нарощування штрафних коефіцієнтів для уникнення передчасної збіжності в локальних мінімумах. Процес оптимізації розбивається на N дискретних кроків, які описуються нормалізованою змінною $S \in [0, 1]$.

У запропонованій методології закон зміни будь-якого гіперпараметра $P(S)$ на кроці S формалізовано у вигляді степеневої функції:

$$P(S) = P_{\text{початкове}} + (P_{\text{кінцеве}} - P_{\text{початкове}}) \cdot S^{\gamma}, \quad (6)$$

де $P_{\text{початкове}}$ та $P_{\text{кінцеве}}$ — початкове та кінцеве значення параметра відповідно, γ — коефіцієнт нелінійності (форма траєкторії). При $\gamma = 1$ зміна параметра є лінійною, при $\gamma < 1$ — опуклою вгору (раннє вмикання штрафів), при $\gamma > 1$ — опуклою вниз (пізнє вмикання штрафів).

Для забезпечення балансу між гнучкістю алгоритму та обчислювальною складністю, простір пошуку для баєсівського оптимізатора було обмежено 6-ма ключовими вимірами:

- $\gamma_p \in [0.5, 5.0]$ — форма траєкторії для коефіцієнта штрафування SIMP;
- $p_{\text{кінцеве}} \in [3.0, 6.0]$ — кінцеве значення коефіцієнта штрафування SIMP (при фіксованому $p_{\text{початкове}} = 1.0$);
- $\gamma_{\beta} \in [0.5, 5.0]$ — форма траєкторії для параметра крутизни проєкції Гевісайда;
- $\beta_{\text{кінцеве}} \in [8.0, 16.0]$ — кінцеве значення крутизни проєкції (при фіксованому $\beta_{\text{початкове}} = 1.0$);
- $R_{\min} \in [2.0, 6.0]$ мм — радіус фільтра Гельмгольца (залишається константою протягом одного обчислювального експеримента);
- $N_{\text{ітерацій}} \in [20, 100]$ — максимальна кількість ітерацій алгоритму MMA на кожному кроці S .

2.3. Процедура оцінювання

Кожен обчислювальний експеримент мета-оптимізатора складається з наступних етапів:

1. Алгоритм TPE генерує унікальний набір з 6 гіперпараметрів.
2. Програмний код мовою Python розраховує розклад значень p та β для 6 кроків ($S = 0.0, 0.2, \dots, 1.0$) згідно з рівнянням (5).
3. Згенерований розклад, разом із константами $R_{\min}$ та $N_{\text{ітерацій}}$, передається у COMSOL.
4. Обчислювальний модуль послідовно виконує топологічну оптимізацію. Після завершення останнього кроку розраховується середня температура домену $T_{\text{сер}}$, яка повертається в Optuna як значення цільової функції для оновлення ймовірнісної моделі TPE.

Такий підхід дозволяє алгоритму автономно знаходити неочевидні комбінації параметрів, які забезпечують формування технологічних (чорно-білих) структур з максимальною тепловою ефективністю.

3. Результати та обговорення

Для перевірки ефективності запропонованої методології було проведено 300 ітерацій (обчислювальних експериментів) мета-оптимізації. Перші 60 ітерацій виконувалися за алгоритмом випадкового пошуку для первинного дослідження простору гіперпараметрів, після чого керування передавалося баєсівському алгоритму TPE.

3.1. Аналіз збіжності мета-оптимізатора

На Рис.3 наведено графік історії оптимізації цільової функції (середньої температури розрахункової області).

Як видно з графіка, етап випадкового пошуку (ітерації 0–60) характеризується надзвичайно високою дисперсією результатів: значення цільової функції коливаються в діапазоні від 70 до понад 230 °C. Це наочно демонструє високу чутливість топологічної оптимізації до вибору гіперпараметрів: «сліпе» або інтуїтивне налаштування обчислювального модуля з високою ймовірністю призводить до розбіжності алгоритму або його застрягання в глибоких локальних мінімумах.

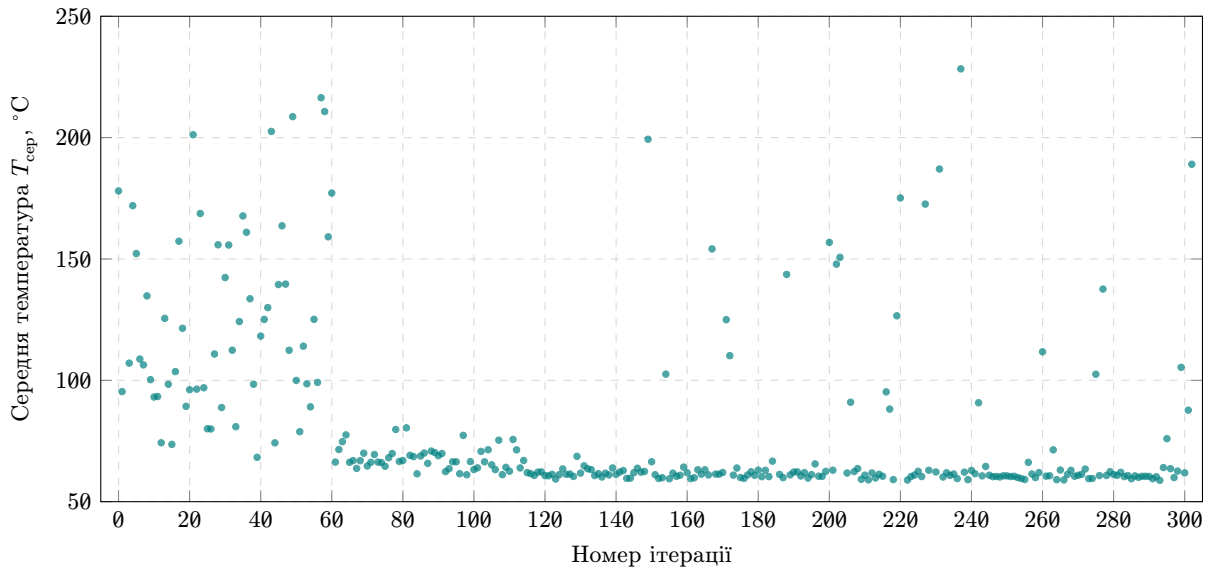


Рис. 3. Історія мінімізації цільової функції в процесі мета-оптимізації.

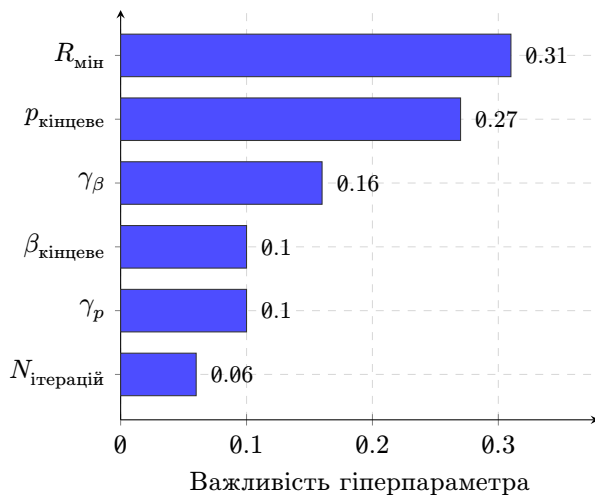


Рис. 4. Оцінка впливу гіперпараметрів на фінальне значення цільової функції.

Після активації алгоритму TPE (починаючи з 61-ї ітерації) спостерігається різке падіння дисперсії та стабільна збіжність до глобального оптимуму. Алгоритм успішно локалізував оптимальну зону гіперпараметрів, знизивши цільову функцію до значення $T_{\text{сер}} = 57.73$ °C. Періодичні сплески на графіку (наприклад, ітерації 150, 260) свідчать про коректну роботу механізму дослідження алгоритму TPE, який перевіряє нові зони простору для уникнення стагнації.

3.2. Вплив гіперпараметрів на цільову функцію

Аналіз важливості гіперпараметрів (Рис. 4), проведений на основі побудованої ймовірнісної моделі, дозволив виявити ключові фактори, що керують морфологією структури.

Найбільший вплив на результат має радіус філь-

тра Гельмгольца $R_{\min}$ (31%). З фізичної точки зору це пояснюється тим, що менший радіус фільтра дозволяє алгоритму генерувати більш деталізовані, високорозгалужені фрактальні структури. Збільшення площі поверхні таких мікроструктур експоненціально покращує тепловідведення.

Другим за важливістю параметром є кінцеве значення коефіцієнта штрафування $p_{\text{кінцеве}}$ (27%), яке відповідає за жорсткість виштовхування «сірих» елементів. Цікаво відзначити, що форма траєкторії проєкції γ_{β} (16%) виявилася важливішою за її кінцеве значення $\beta_{\text{кінцеве}}$ (10%). Це підтверджує фундаментальну гіпотезу даного дослідження: *динаміка* нарощування штрафів у процесі оптимізації є більш критичною для уникнення локальних мінімумів, ніж їхні фінальні статичні значення.

Найменший вплив продемонстрував параметр максимальної кількості ітерацій $N_{\text{ітерацій}}$ (6%). Це свідчить про те, що за умови досягнення певного мінімально необхідного порогу ітерацій, подальше їх збільшення не змінює топологію, а лише збільшує час розрахунку.

3.3. Морфологічний аналіз та порівняння підходів

Для комплексної оцінки запропонованого методу було проведено порівняння знайденого мета-оптимізованого дизайну з трьома традиційними підходами (Рис. 5 та Табл. 1).

Метод 1 (базовий SIMP без проєкції) згенерував суцільну, але морфологічно нерозвинену структуру. Через відсутність механізму чіткого розділення фаз, алгоритм сформував товсті первинні гілки з широкими зонами «сірого» (напівпрозорого) матеріалу. Оптимізатор зупинився в локальному мінімумі, оскільки розмиті межі штучно задовольняють умови теплопровідності, блокуючи подальше розгалуження.

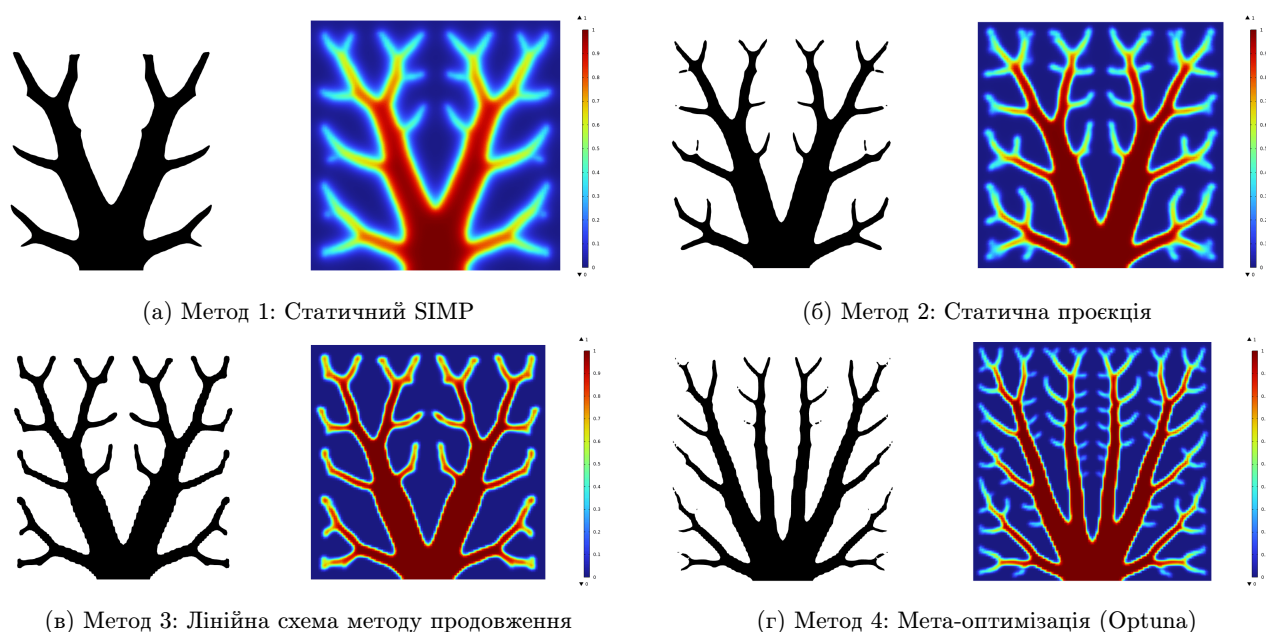


Рис. 5. Морфологічне порівняння отриманих топологій для різних стратегій налаштування гіперпараметрів.

Застосування жорсткої статичної проєкції з першої ітерації (Метод 2) змусило алгоритм формувати більш тонку та розгалужену структуру. Однак різкий градієнт щільності призвів до топологічної нестабільності: намагаючись виростити вторинні гілки, алгоритм сформував розриви та ізолювані «острови» матеріалу, що робить таку топологію непридатною для виготовлення (нетехнологічною).

Лінійна схема методу продовження (Метод 3) дозволила подолати ці недоліки, сформувавши класичну, гладку фрактальну структуру без розривів. Однак, як видно з Табл. 1, застосування баєсівської мета-оптимізації (Метод 4) забезпечило найкращий кількісний результат. Запропонований алгоритм дозволив знизити середню температуру розрахункової області на 26.2% порівняно з базовим методом SIMP (Метод 1), на 9.5% порівняно зі статичною проєкцією (Метод 2) та на 18.4% відносно лінійної схеми методу продовження (Метод 3). Візуальний аналіз на Рис. 5 підтверджує, що таке суттєве покращення цільової функції досягається за рахунок формування алгоритмом екстремально розгалуженої мікроструктури, яку неможливо отримати при використанні статичних штрафів (Рис. 5а, б).

Варто зазначити важливий феномен, виявлений під час аналізу Випадку 4. Задля досягнення матема-

тичного мінімуму температури, баєсівський оптимізатор підібрав мінімально можливий радіус фільтра, що призвело до появи мікро-гілок товщиною в один скінченний елемент та підвищення фактора сірості до 0.11. Це ілюструє відому проблему розриву між математичною моделлю та фізичною реальністю. Алгоритм ідеально виконав поставлену математичну задачу, експлуатуючи ефекти напівпрозорих перехідних зон. Це свідчить про те, що для отримання гарантовано технологічних конструкцій у майбутніх дослідженнях доцільно інтегрувати етап процедури валідації безпосередньо в цільову функцію мета-оптимізатора.

Висновки

У даній роботі успішно реалізовано та досліджено методологію дворівневої мета-оптимізації процесу топологічного проектування теплотехнічних структур. На основі отриманих результатів чисельного моделювання можна зробити такі висновки:

- **Подолання проблеми неефективних локальних мінімумів:** Доведено, що застосування баєсівського алгоритму TPE дозволяє ефективно вирішити фундаментальну проблему чутливості топологічної оптимізації до вибору гіперпараметрів. Мета-оптимізатор забезпечує

Таблиця 1. Кількісне порівняння ефективності методів налаштування гіперпараметрів

№	Метод (Стратегія налаштування)	Середня температура $T_{\text{сеп}}$, °C
1	Статичний SIMP ($p = 3, \beta = 1$)	78.18
2	Статична проєкція ($p = 3, \beta = 8$)	63.82
3	Лінійна схема методу продовження	70.77
4	Мета-оптимізація (Optuna)	57.73

стабільний пошук високоефективних топологій, дозволяючи алгоритму уникати потрапляння в неефективні локальні мінімуми та передчасної стагнації, характерних для традиційних методів.

- **Критична роль динаміки штрафування:** Встановлено, що ключовим фактором формування високоефективних фрактальних структур є не статичні кінцеві значення штрафних коефіцієнтів, а саме нелінійна динаміка їх нарощування від ітерації до ітерації. Алгоритм автономно знайшов неочевидні траєкторії, які забезпечують оптимальний баланс між вільним формуванням розгалуженої топології на початкових етапах та поступовим посиленням коефіцієнта штрафування на фінальних кроках оптимізації.
- **Кількісна перевага:** Запропонований підхід продемонстрував беззаперечну перевагу над традиційними стратегіями налаштування. Мета-оптимізація дозволила знизити цільову функцію (середню температуру) на 26.2% порівняно з базовим статичним методом SIMP, на 9.5% порівняно зі статичною проекцією та на 18.4% відносно лінійної схеми методу продовження.
- **Мінімізація ручного втручання:** Як додаткова перевага, автоматизація пошуку гіперпараметрів суттєво знижує залежність якості фінального дизайну від інтуїтивного підбору кроків інженером, роблячи процес проектування більш об'єктивним та відтворюваним.
- **Ідентифікація проблеми розриву між мате-**

матичною моделлю і фізичною реальністю та подальші кроки: Виявлено схильність суто математичної оптимізації до експлуатації «сірих» напівпрозорих зон та генерації мікро-гілок товщиною в один скінченний елемент. Для отримання гарантовано технологічних конструкцій подальші дослідження будуть спрямовані на інтегровану процедуру валідації (автоматичної побудови сітки по ізоповерхні) безпосередньо в цільову функцію мета-оптимізатора.

Перелік використаних джерел

1. *Guest J., Prevost J., Belytschko T.* Achieving minimum length scale in topology optimization using nodal design variable and projection functions // *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. — 2004. — Вип. — Т. 61. — С. 238—254. — DOI: [10.1002/nme.1064](https://doi.org/10.1002/nme.1064).
2. *Alexandersen J.* Topology Optimization for Convection Problems : дис. ... док. / Alexandersen Joe. — 01.2011. — DOI: [10.13140/RG.2.2.24635.72485](https://doi.org/10.13140/RG.2.2.24635.72485).
3. *Bendsøe M., Sigmund O.* Topology Optimization: Theory, Method and Applications. — 01.2003.
4. Optuna: A Next-generation Hyperparameter Optimization Framework / T. Akiba, S. Sano, T. Yanase, T. Ohta, M. Koyama //. — 07.2019. — С. 2623—2631. — ISBN 978-1-4503-6201-6. — DOI: [10.1145/3292500.3330701](https://doi.org/10.1145/3292500.3330701).
5. *Bergstra J., Bardenet R., Kégl B.* Algorithms for Hyper-Parameter Optimization //. — 12.2011.