Краткое руководство пользователя программного комплекса в форме Web-приложения для подбора буровых растворов по результатам моделирования и оптимизации

1. Общая информация

Для запуска программного комплекса требуется:

- 1) При наличии установленных элементов программного пакета:
 - а) перейти в директорию с приложением;
 - б) открыть терминал (или командную строку);
 - в) запустить главный python-скрипт командой «python3 main.py».
- 2) При отсутствии установленных элементов программного пакета требуется провести установку согласно руководству системного администратора и выполнить шаги п. 1.

Главное окно программного комплекса представлено на рисунке 1.

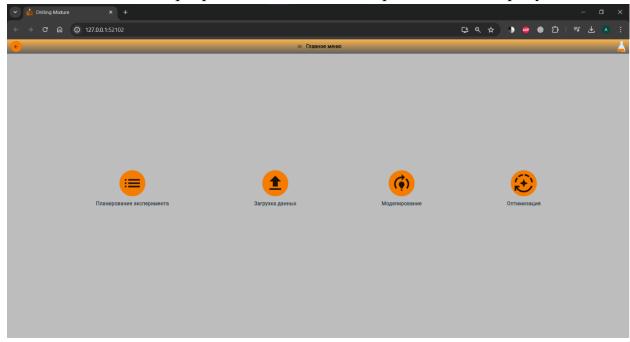


Рисунок 1 – Главное окно программного комплекса

- 1) По кнопке «Планирование эксперимента» имеется возможность:
 - а) задания параметров эксперимента;
 - б) выбора методов планирования;
 - в) отображения плана;
 - г) сохранения результатов;
- 2) По кнопке «Загрузка данных» имеется возможность:
 - а) загрузки данных из файла формата «.xlsx» и их визуализации в виде таблицы;

- б) добавления новых данных;
- в) расчета стоимости бурового раствора (БР);
- г) расчета и визуализации матрицы корреляций;
- д) сохранения файлов.
- 3) По кнопке «Моделирование» имеется возможность:
 - а) создания моделей машинного обучения (линейная регрессия, гребневая регрессия, ARD-регрессия, непараметрическая ядерная регрессия, искусственная нейронная сеть, дерево решений для регрессии);
 - б) построения гистограммы распределения;
 - в) настройки параметров обучение моделей;
 - г) сохранения моделей;
 - д) инференса моделей (предсказания по построенным моделям);
 - е) анализ моделей в части визуализации результатов и анализа чувствительности по входным факторам.
- 4) По кнопке «Оптимизация» имеется возможность:
 - а) настройки критериев оптимизации и ограничений задачи;
 - б) формирования взвешенного критерия оптимизации для перевода задачи в однокритериальную постановку;
 - в) выбора алгоритма оптимизации (эволюционный алгоритм NSGA-II, алгоритм TPE);
 - г) настройки параметров алгоритма оптимизации;
 - д) отображения и сохранения результатов;
 - е) визуализации Парето-оптимального фронта решений.
- 5) По кнопке «Назад» (в левом верхнем углу экрана) имеется возможность перехода на главное окно из модулей программного комплекса.

ВНИМАНИЕ! При указании значений в программном комплексе в качестве разделителей требуется использование точки «.».

2. Планирование эксперимента

Для перехода в модуль «Планирование эксперимента» (рисунок 2) требуется нажать на кнопку .

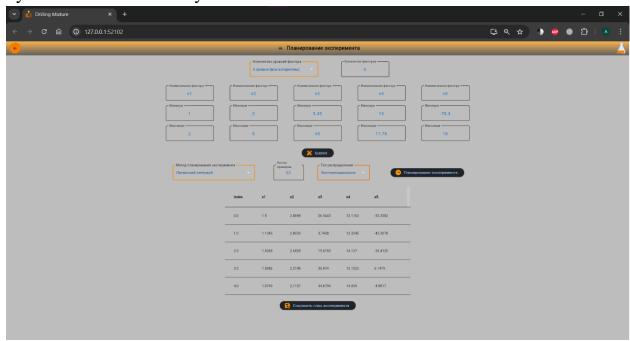


Рисунок 2 – Окно модуля «Планирование эксперимента»

- 1) Выбор количества уровней факторов;
- 2) Выбор количества факторов;
- 3) Ввод наименований факторов;
- 4) Ввод минимальных и максимальных значений для каждого фактора при 2 уровнях;
- 5) Ввод уровней факторов (при более чем 2 уровнях). **ВНИМАНИЕ!** *Уровни вводятся через запятую без пробелов*.
- 6) Выбор метода планирования эксперимента (**ВНИМАНИЕ!** Доступно после нажатия кнопки «Submit») и его параметров (при наличии).
- 7) Формирование и отображение построенного плана эксперимента (таблица в нижней части окна).
- 8) Сохранение плана эксперимента в файле «.xlsx» в отдельный каталог файловой системы (design_of_experiment).

3. Загрузка данных

Для перехода в модуль «Загрузка данных» (рисунок 3) требуется нажать на кнопку •



Рисунок 3 – Окно модуля «Загрузка данных»

- 1) Выбор файла для загрузки (формат «.xlsx») по кнопке «Загрузить файл» из любого каталога файловой системы;
- 2) Выбор файла с данными из предзагруженных данных по кнопке «Выбрать файл» из отдельного каталога файловой системы (uploads);
- 3) Удаление файла с данными из предзагруженных данных по кнопке «Удалить файл» из отдельного каталога файловой системы (uploads);
- 4) Расчет стоимостей буровых растворов по кнопке «Рассчитать стоимость БР»;
- 5) Добавление новых данных по кнопке
- 6) Сохранение файла с данными в область предзагруженных данных по кнопке «Сохранить файл» в отдельный каталог файловой системы (uploads);
- 7) Скачивание файла в выбранный пользователем каталог файловой системы только при классической клиент-серверной реализации;
- 8) Формирование и отображение матрицы корреляций (во всплывающем окне) рисунок 4.

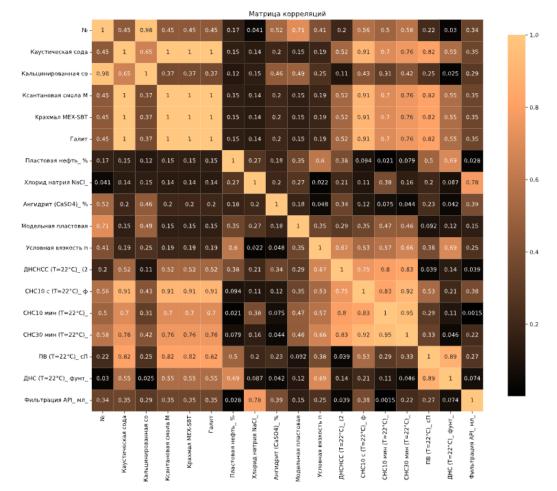


Рисунок 4 – Пример построенной матрицы корреляций

4. Моделирование

Для перехода в модуль «Моделирование» (рисунок 5) требуется нажать на кнопку .



Рисунок 5 – Окно модуля «Моделирование»

В левой части окна доступен функционал по визуализации данных и обучению моделей:

- 1) Диаграмма распределения данных и статистика по любому выбранному параметру (как входному, так и выходному);
- 2) Выбор типа модели из выпадающего списка;
- 3) Выбор входов (по кнопке «Выбрать входы») и выходов (по кнопке «Выбрать выходы») модели.
- 4) Удаление ранее построенных моделей из отдельного каталога файловой системы (models).

После успешного моделирование имеется функционал:

- 1) Сохранения модели в формате Pickle (по кнопке «Сохранить модели») в отдельный каталог файловой системы (models).
 - **ВНИМАНИЕ!** Сохранение производится для группы моделей, построенных для всех указанных выходов.
- 2) Экспорт моделей в формате PMML 4.4 в отдельный каталог файловой системы (pmml_models).

ВНИМАНИЕ! Требуется установленный пакет JRE (Java Runtime Environment).

ВНИМАНИЕ! В названиях входов и выходов должны отсутствовать специальные знаки (градусы, степени и т.п.).

3) Просмотр результатов моделирования (рисунок 6) по всем выходам с указанием коэффициента детерминации (R).

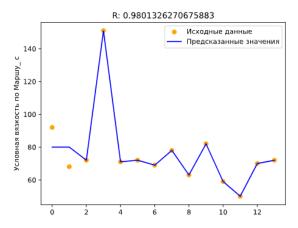


Рисунок 6 – Результаты моделирования

В правой части окна доступен функционал по расчету и анализу моделей:

- 1) Выбор моделей из списка построенных ранее;
- 2) Инференс моделей предсказание значений выходных параметров по заданным значениям входных по нажатию кнопки «Рассчитать»;
- 3) Визуализация диаграммы чувствительности для ТОП-10 входных факторов, 3D-графика модели и тепловой карты при выборе выхода в выпадающем списке (рисунок 7).

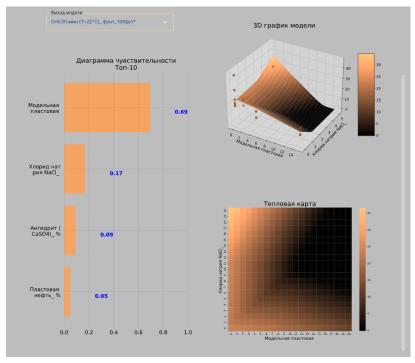


Рисунок 7 – Визуализации по результатам моделирования

4. Оптимизация

Для перехода в модуль «Оптимизация» (рисунок 8) требуется нажать на кнопку .



Рисунок 8 – Окно модуля «Оптимизация»

- 1) Выбор моделей, оптимизация которых должна быть проведена;
- 2) Ввод компонентного состава БР для тех компонентов, которые не принимали участие в моделировании в качестве входов.
 - **ВНИМАНИЕ!** Ввод значений необходим для корректного расчета стоимости БР в процессе оптимизации. Введенные значения влияют только на критерий стоимости.
- 3) Работа с параметрами оптимизации по раскрытию списка параметров при нажатии на кнопку «Показать параметры оптимизации»:
 - а) Указание границ варьирования и шага изменения входных параметров.
 - **ВНИМАНИЕ!** Для фиксации параметров на константном значении требуется указать одинаковое значение в поле «минимум» и «максимум». Шаг изменять не следует.
 - б) Выбор критериев оптимизации рядом с каждым выходным параметром необходимо проставить соответствующую отметку. Имеется возможно сброса выбора повторным кликом. Выбор ограничений рядом с каждым выходным параметром необходимо проставить минимальную «>=» и/или максимальную «<=» границу варьирования.

ВНИМАНИЕ! Если какой-либо выход не участвует ни в группе критериев, ни в группе ограничений, то он не учитывается при оптимизации.

ВНИМАНИЕ! Возможно указание одного и того же выхода как в качестве ограничения, так и в качестве критерия оптимизации.

в) Формирование свертки оптимизационных критериев для решения задачи однокритериальной оптимизации при наличии 2 и более критериев с указанием для каждого из них весовых коэффициентов.

ВНИМАНИЕ! Для корректной работы свертки критериев соответствующие выходы обязательно должны быть отмечены «мин» или «макс».

ВНИМАНИЕ! Свертка критериев будет работать в случае указания хотя бы 1 значения веса.

- 4) Выбор и настройка параметров алгоритма оптимизации;
- 5) Просмотр результатов оптимизации значения входных факторов (параметров БР), критериев и ограничений для найденных оптимальных значений (рисунок 9).

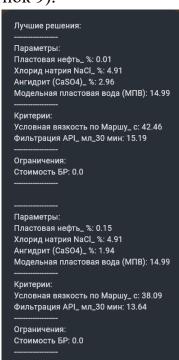


Рисунок 9 – Результаты оптимизации

ВНИМАНИЕ! Для многокритериальной постановки задачи оптимизации будет сформировано более 1 решения — аппроксимация Парето-оптимального фронта.

- 6) Сохранение результатов оптимизации (по кнопке «Сохранить результаты оптимизации») в отдельный каталог файловой системы (opt_results).
- 7) Вывод аппроксимации Парето-оптимального фронта требуется выбрать различные критерии для осей *х* и *у* (рисунок 10).

Pareto-front Plot

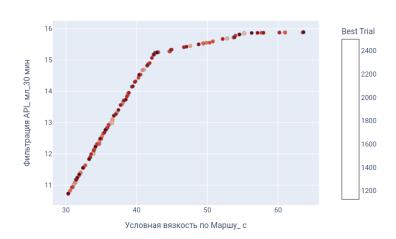


Рисунок 10 – Фронт Парето