Hocheffiziente Antwortflächenverfahren für die probabilistische Simulation und Optimierung unter Anwendung des Gauss-Prozesses

Dr.-Ing. The-Quan Pham
OptiY e.K.
Aschaffenburg

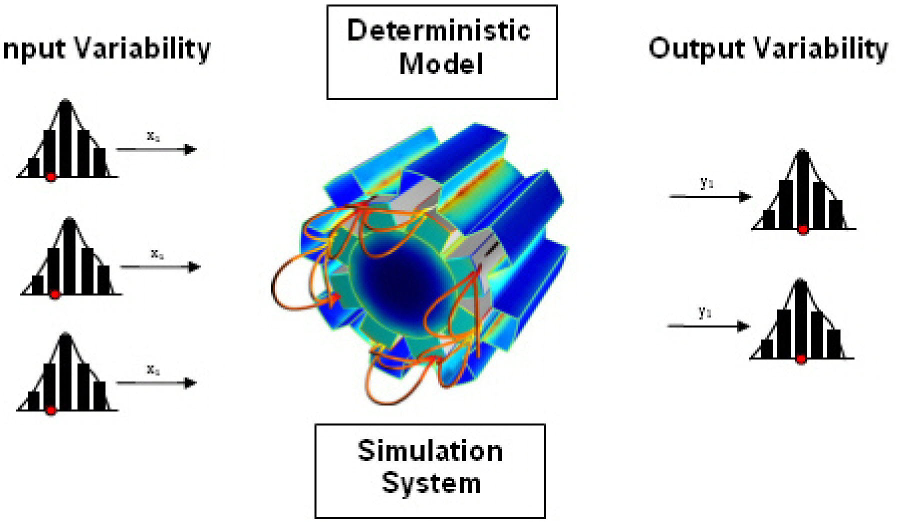
Dr.-Ing. Alfred Kamusella
Institut für Feinwerktechnik und Elektronik-Design
TU Dresden

2. Dresdner-Probabilistik-Workshop
8.-9. Oktober 2009 an der TU Dresden

Gliederung

1. Problemstellung
2. Der Gauss-Prozess
3. Visualisierungsbeispiel
4. Globale Sensitivitätsanalyse
5. Robust-Design-Optimierung
6. Toleranz-Kosten-Optimierung

Problemstellung

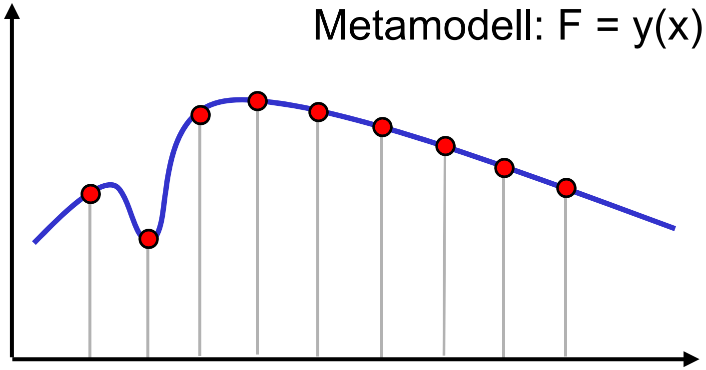


Probabilistik

- Probabilistische Simulation bewertet den virtuellen Entwurf unter realen Bedingungen
- Probabilistische Optimierung ist automatische Suche nach alternativen Entwürfe unter Einbeziehung von Streuungen und Unsicherheiten

Stand der Technik

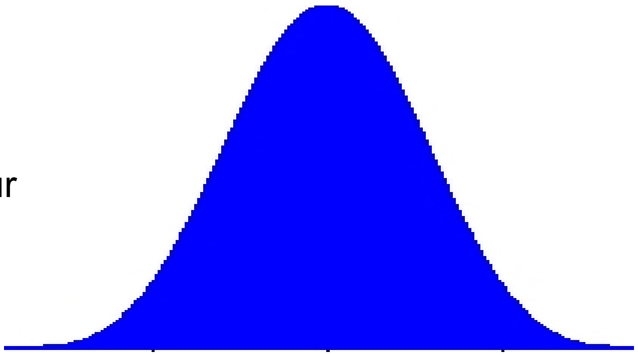
- Verwendung eines Metamodells als Ersatz für das originale Produktmodell, Interpolation zwischen berechneten Punkten
- Full Factorial Design (Raster): zu viele und unnötige Punkte im gesamten Entwurfsraum
- Andere Methoden der statistischen Versuchsplanung, zu wenig Punkte → verfälschte Ergebnisse



Probleme

- Vielzahl von Produktparameter (10 ..100)
- komplexe Produktmodelle mit Berechnungszeiten von mehreren Stunden
- Optimierung praktisch unmöglich !

Der Gauss-Prozess



Mathematischer Ansatz: Polynom f(**x**) mit *p*-ter Ordnung als globale Anpassung und der stochastische Prozess Z(**x**) als lokale Anpassung für einen *n*-dimensionalen Parametervektor **x**

$$Y(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{p} \beta_i \cdot f_i(\mathbf{x}) + Z(\mathbf{x})$$

Existierende *n*-Punktwolke $\mathbf{Y}^n$ gilt als eine multivariate Gauss-Verteilung mit der Korrelationsfunktion **R**(**x**). Y^0 ist der neu zu berechnende (*n*+1)-Punkt

$$\begin{pmatrix} Y_0 \\ \mathbf{Y}^n \end{pmatrix} \approx N_{n+1}\left[\begin{pmatrix} \mathbf{f}_0^T \\ \mathbf{F} \end{pmatrix}\boldsymbol{\beta},\ \sigma_z^2 \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{r}_0^T \\ \mathbf{r}_0 & \mathbf{R} \end{pmatrix}\right]$$

Die beste Vorhersage für den neu zu berechenden Punkt Y^0 ist der Erwartungswert dieser multivariaten Gauss-Verteilung. $\boldsymbol{\beta}$ sind die mit der Methode der kleinsten Quadrate zu ermittelnden Polynom-Koeffizienten

$$\hat{Y}(\mathbf{x}_0) = \mathbf{f}_0^T\boldsymbol{\beta} + \mathbf{r}_0^T\mathbf{R}^{-1}(\mathbf{Y}^n - \mathbf{F}\boldsymbol{\beta})$$

$$\boldsymbol{\beta} = (\mathbf{F}^T\mathbf{R}^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}^T\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Y}^n$$

Korrelationsfunktion des Gauss-Prozesses

- Die Korrelationsfunktion R(x) stellt die Interpolation zwischen den berechneten Punkten dar.
- Es muss eine stetige und stationäre Funktion zwischen [0..1] sein
- Der Funktionsverlauf ist eine Annahme und gilt als kritischer Faktor des Gauss-Prozesses.
- Deshalb werden verschiedene erprobte Funktionen zur Verfügung gestellt:

Exponential
$$R(x_1 - x_2) = \exp(-w^\gamma \cdot (x_1 - x_2)^\gamma)$$

Matern Class
$$R(x_1 - x_2) = (1 + w \cdot (x_1 - x_2)) \exp(-w \cdot (x_1 - x_2))$$

Rational Quadratic
$$R(x_1 - x_2) = \left(1 + \frac{w^2 \cdot (x_1 - x_2)^2}{\alpha}\right)^{-\alpha}$$

Unbekannte der Korrelationsfunktion sind die Hyperparameter w, γ, α. Ermittlung durch Maximierung der Likelihood-Funktion der multivariaten Gauss-Verteilung, d.h. Minimierung des folgenden negativen Ausdrucks der Likelihood-Funktion:

$$(n - p)\log \hat{\sigma}_z^2 + \log(\det(\mathbf{R}))$$

$$\hat{\sigma}_z^2 = \frac{1}{n - p}(\mathbf{Y}^n - \mathbf{F}\boldsymbol{\beta})^T \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{Y}^n - \mathbf{F}\boldsymbol{\beta})$$

Adaptiver Gauss Prozess

- Neben der Erwartung (Vorhersagewert) liefert der Gauss-Prozess auch Varianz/Streuung der Vorhersage
- Damit sind auch Vertrauensintervalle der Vorhersage über den gesamten Entwurfsraum verfügbar
- Wo die größte Unsicherheit ist, wird ein zusätzlicher Punkt mit dem originalem Modell berechnet
- Alleinstellungsmerkmal des Gauss-Prozesses, bei anderen Approximationsverfahren nicht möglich!

$$\sigma^2 = \sigma_z^2 \left\{ 1 - \mathbf{r}_0^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{r}_0 + (\mathbf{f}_0 - \mathbf{F}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{r}_0)^T (\mathbf{F}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F})^{-1} (\mathbf{f}_0 - \mathbf{F}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{r}_0) \right\}$$

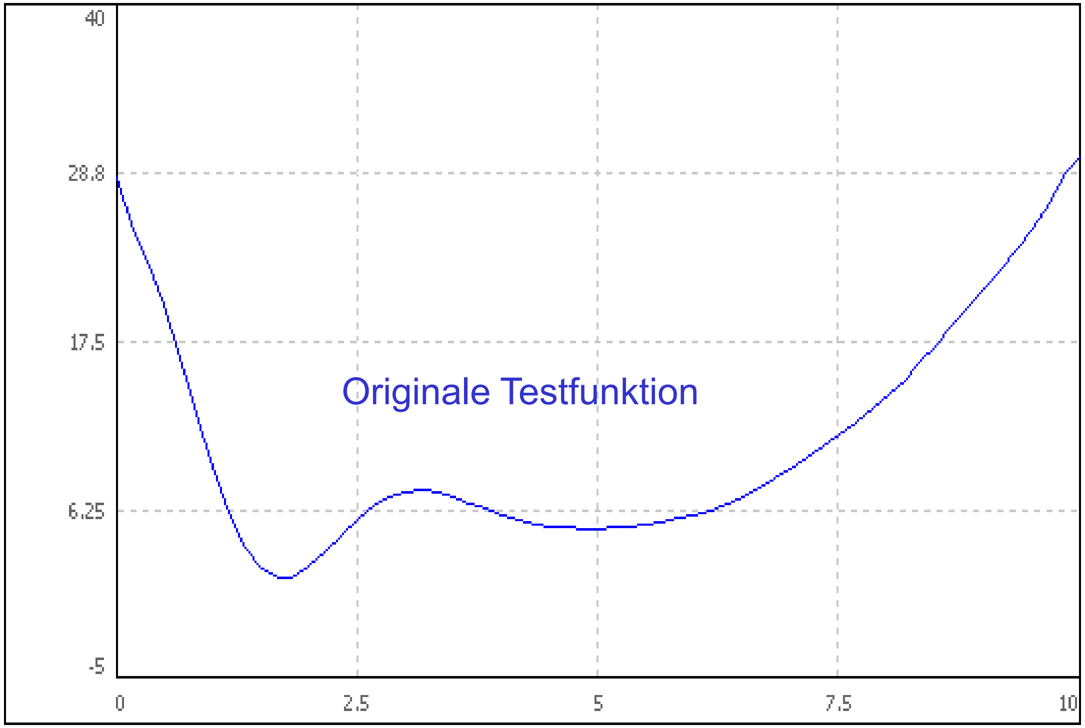
$$\sigma_z^2 = \frac{1}{n-p} \mathbf{Y}^{nT} \left\{ \mathbf{R}^{-1} - \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F} (\mathbf{F}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F})^{-1} \mathbf{F}^T \mathbf{R}^{-1} \right\} \mathbf{Y}^n$$

- Erwartete Verbesserung ***EI*** zur Validierung des lokalen Optimums und der Unsicherheit
- Ermittlung eines weiteren zu berechnenden Punktes im Entwurfsraum
- ***EI*** gilt als Approximationsgüte und Stop-Kriterium des adaptiven Gauss-Prozesses

$$EI = \sigma \left\{ \frac{y_{\min} - \hat{Y}}{\sigma} \Phi\left(\frac{y_{\min} - \hat{Y}}{\sigma} \right) + \Psi\left(\frac{y_{\min} - \hat{Y}}{\sigma} \right) \right\}$$

Visualisierungsbeispiel mit adaptivem Gauss-Prozess

$$Y = (X-5)^2 - 15 \cdot e^{-(X-1.5)^2} + 5$$

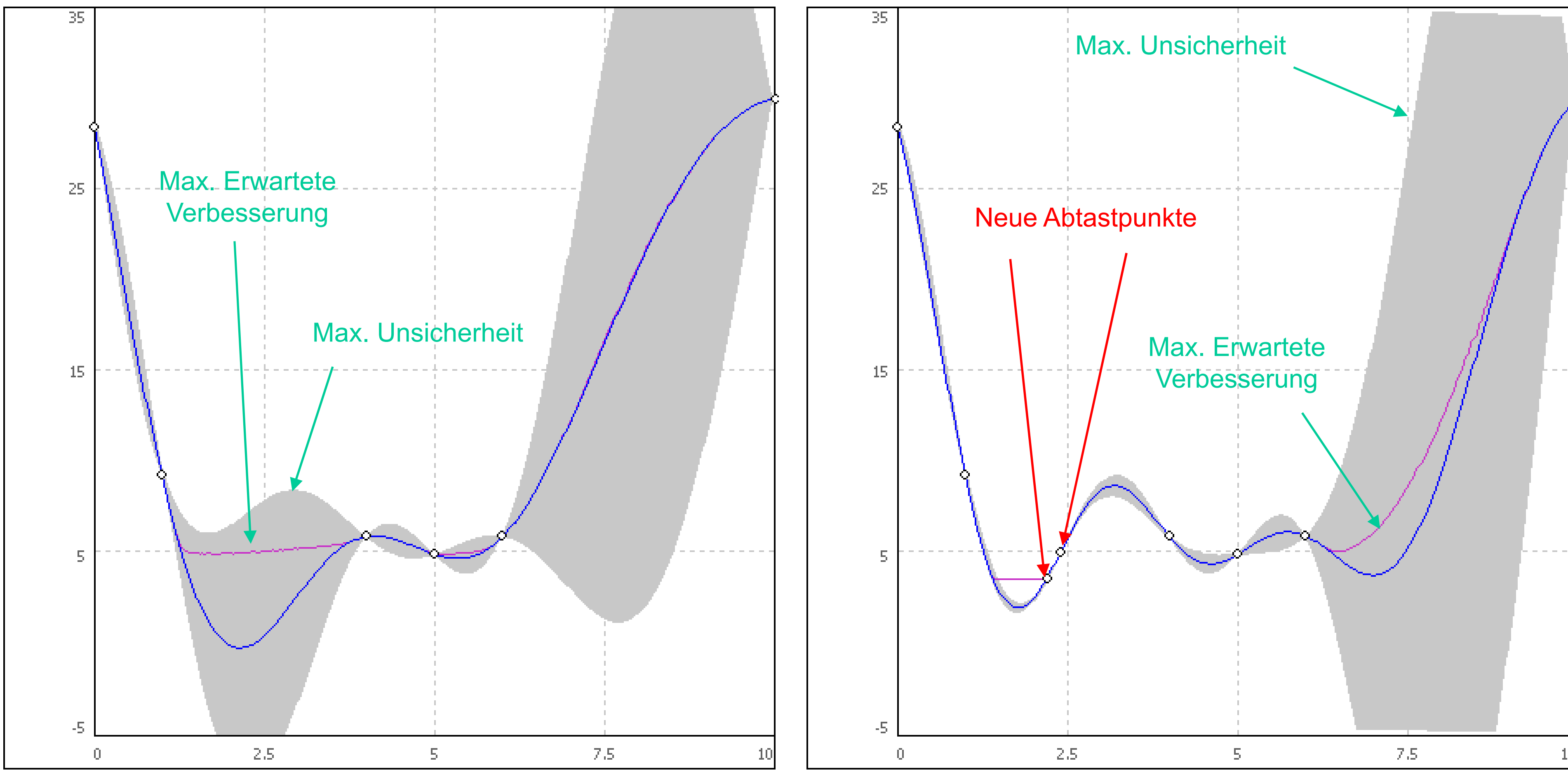


Approximationsschleifen

Antwortfläche
Erwartete Verbesserung EI
95% Vertrauensintervall

Start: 6 Abtastpunkte

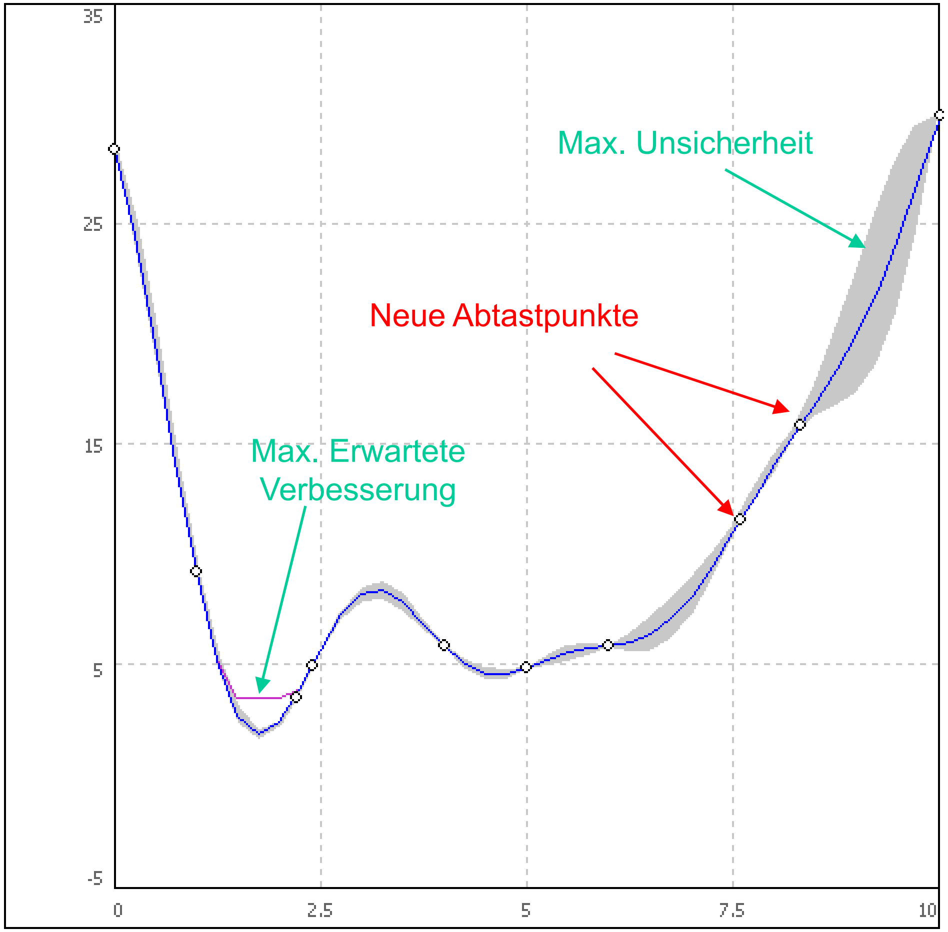
Schleife 1



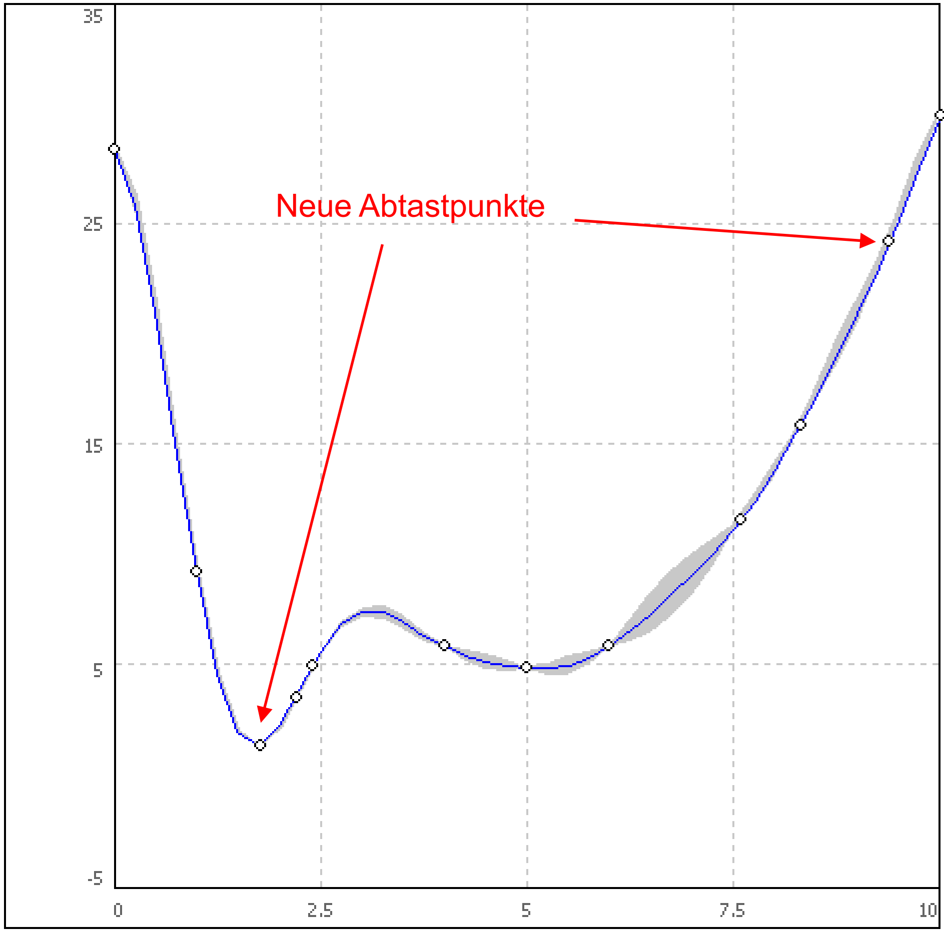
Approximationsschleifen

Stop-Kriterium:
Erwartete Verbesserung < (Y_{max}-Y_{min})/100

Schleife 2



Schleife 3: automatisch abgebrochen



Globale Sensitivitätsanalyse

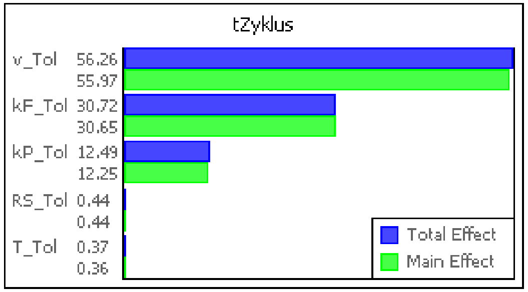
- **Nichtlineare** Zusammenhänge
- Reduzierung des komplexen Entwurfsproblems
- Aufzeigen von Ursache-Wirkungs-Beziehungen

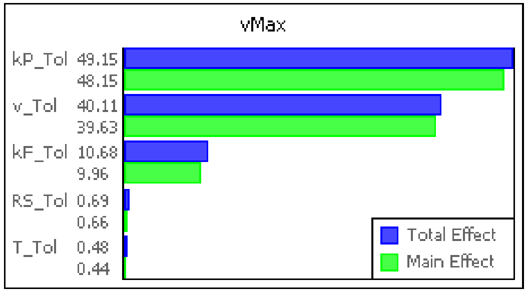
Haupteffekt / Sobol Index

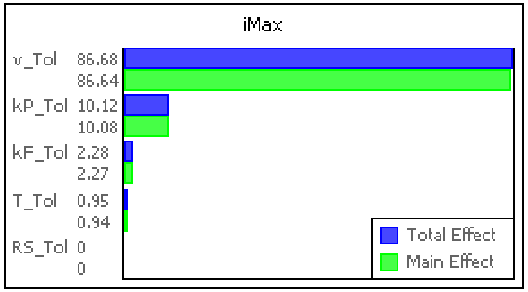
$$S_{H(x_i)} = \frac{Var(y\,|\,x_i)}{Var(y\,|\,\mathbf{x})} = \frac{\int \left[y(\mathbf{x}) - \int y(\mathbf{x}) \prod_{j \neq i} g(x_j)\,dx_j \right]^2 \prod_i [g(x_i)\,dx_i]}{\int \left[y(\mathbf{x}) - \int y(\mathbf{x})\, g(\mathbf{x})\,d\mathbf{x} \right]^2 g(\mathbf{x})\,d\mathbf{x}}$$

Totaleffekt $$S_{T(x_i)} = 1 - S_{H(x_{-i})}$$

Interaktion $$S_{I(x_{i,j})} = S_{T(x_i)} + S_{T(x_j)} - S_{T(x_{i,j})}$$

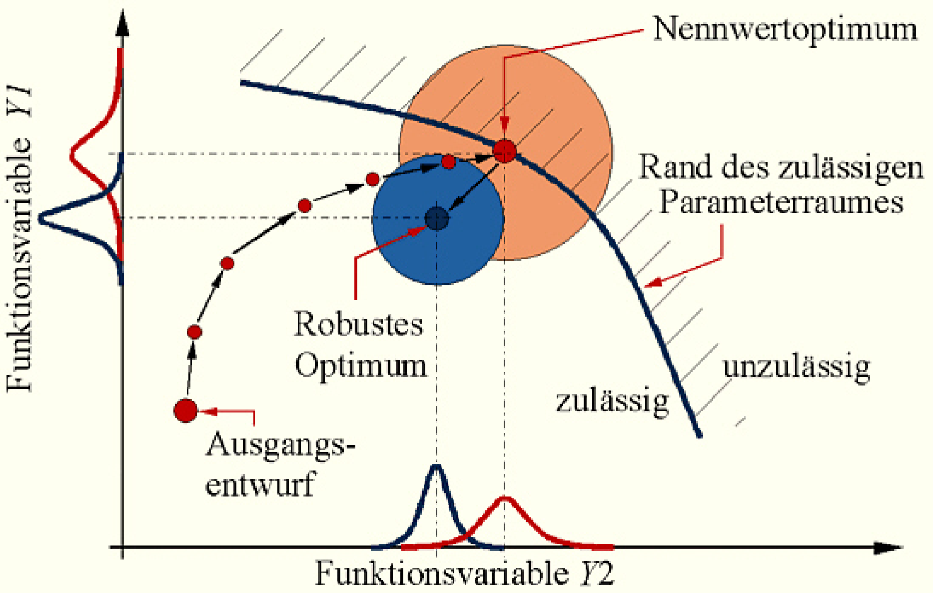






Robust-Design-Optimierung

- Unkontrollierbare bzw. unvermeidbare Streuungen und Unsicherheiten wie unvorhersagbare Umwelteinflüsse (Temperatur, Luftfeuchtigkeit, Tageslicht), Lastschwankungen (Kraft, Moment), menschliche Fehler usw. = unsichere Funktion des Produktes
- Verschiebung der Streuungen der Produkteigenschaften vom unzuverlässigem Gebiet zum zuverlässigen Gebiet: Zielfunktion = Mittelwert
- Minimierung der Streuungen der Produkteigenschaften, um robustes Verhalten zu erzielen: Zielfunktion = Varianz
- Diese Zielfunktionen sind im gesamten Entwurfsraum mittels Metamodell analytisch und schnell berechenbar.

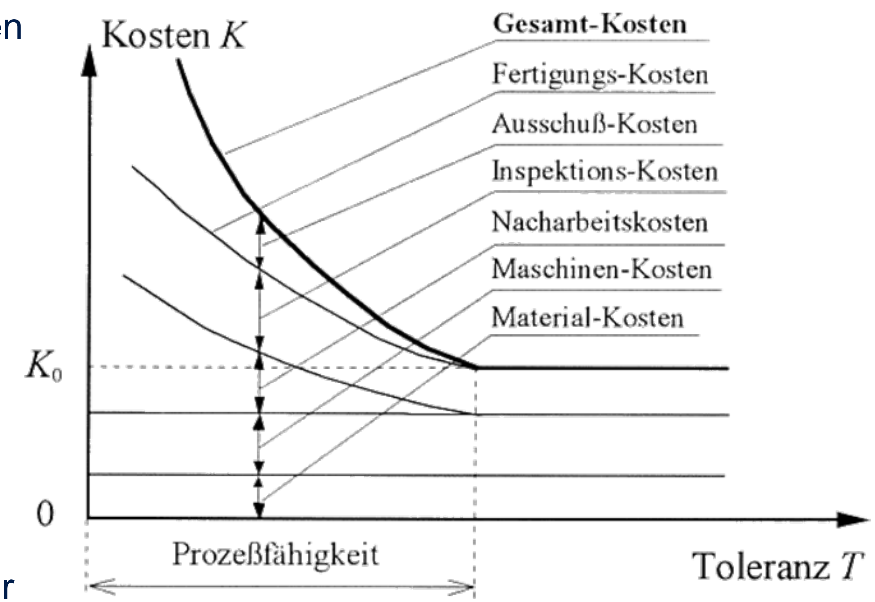


$$Mean = \int y(\mathbf{x})g(\mathbf{x})d\mathbf{x}$$

$$Var = \int \left[y(\mathbf{x}) - \int y(\mathbf{x})g(\mathbf{x})d\mathbf{x}\right]^2 g(\mathbf{x})d\mathbf{x}$$

Toleranz-Kosten-Optimierung

- Kontrollierbare Streuungen wie Prozessunsicherheiten (Planung, Vorbereitung und Realisierung sowie Nachbereitung des Fertigungsprozesses) = Realisierungskosten
- Auf der einen Seite: kleine Streuungen gewährleisten eine sichere Funktionserfüllung, sind aber kostenintensiv und aufwändig zu realisieren
- Auf der anderen Seite: große Streuungen sind kostengünstig zu realisieren, aber führen zu hohem Ausschuss während der Fertigung und häufigen Funktionsausfällen beim Kunden
- Toleranz-Kosten-Modell: Kostenminimierung unter der Einhaltung aller erforderlichen Funktionalitäten mit zulässiger Ausschussquote
- Kombination mit Robust-Design-Optimierung auch möglich.



$$Kosten = Fixkosten + \frac{Faktor}{Toleranz}$$

Zusammenfassung

- Streuungen, Unsicherheiten und Zufall führen zur Verschlechterung der Produktqualität und Zuverlässigkeit. Probabilistik kann diese Probleme bereits in der Entwurfsphase berücksichtigen und bildet die Grundlage für ihre Bewältigung.
- Mit den bisherigen Methoden der statistischen Versuchsplanung ist es praktisch nicht möglich, komplexe und rechenintensive deterministische Produktmodelle zu optimieren.
- Der neue Ansatz mit adaptivem Gauss-Prozess erlaubt eine genaue Approximation des gesamten Entwurfsraums mit wesentlich weniger Modellberechnungen. Basierend auf diesem Metamodell ist eine schnelle probabilistische Simulation und Optimierung durchführbar.
- Die Algorithmen wurden in der Software-Plattform **OptiY®** implementiert, welche eine nutzerfreundliche Oberfläche, einfache und schnelle Handhabung anbietet. Damit stehen diese neuen Möglichkeiten für jeden Ingenieur bereit, um in der virtuellen Produktentwicklung auch die Unsicherheiten zu beherrschen.