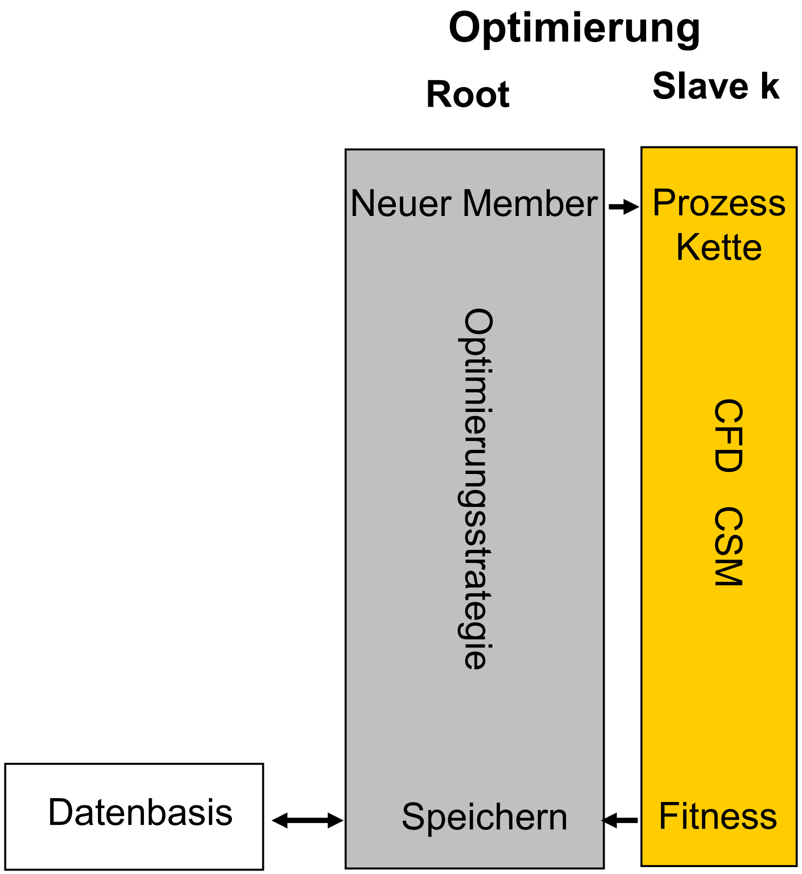
Behandlung von Unsicherheiten in der Ersatzmodell gestützten Optimierung

Christian Voß

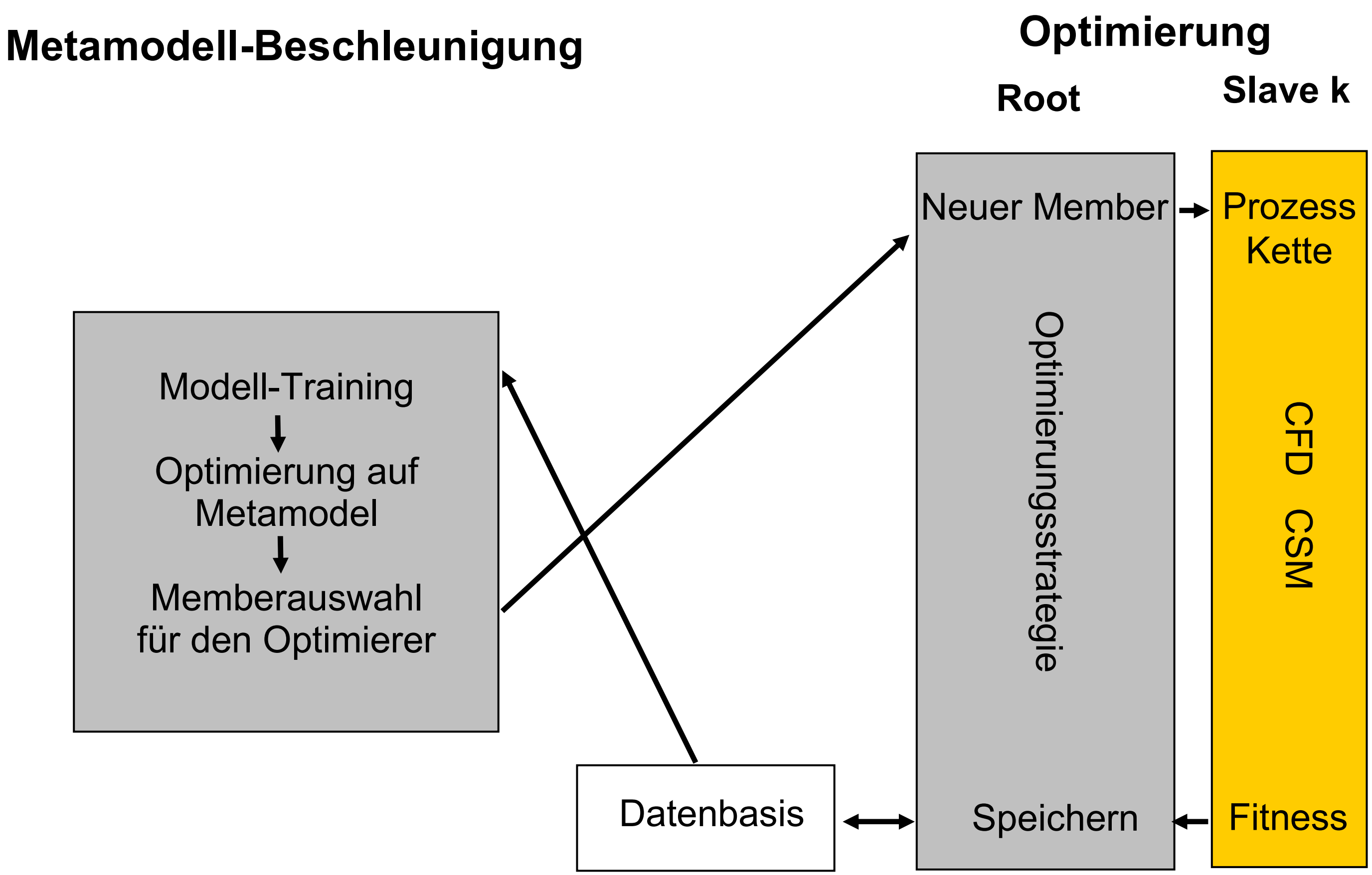
Übersicht

- Ersatzmodell gestützte Optimierung
- Unsicherheiten in Vorhersagen von Ersatzmodellen
- Expected Improvement
- Expected Volume Gain
- Analytisches Beispiel
- Turbomaschinen Beispiel

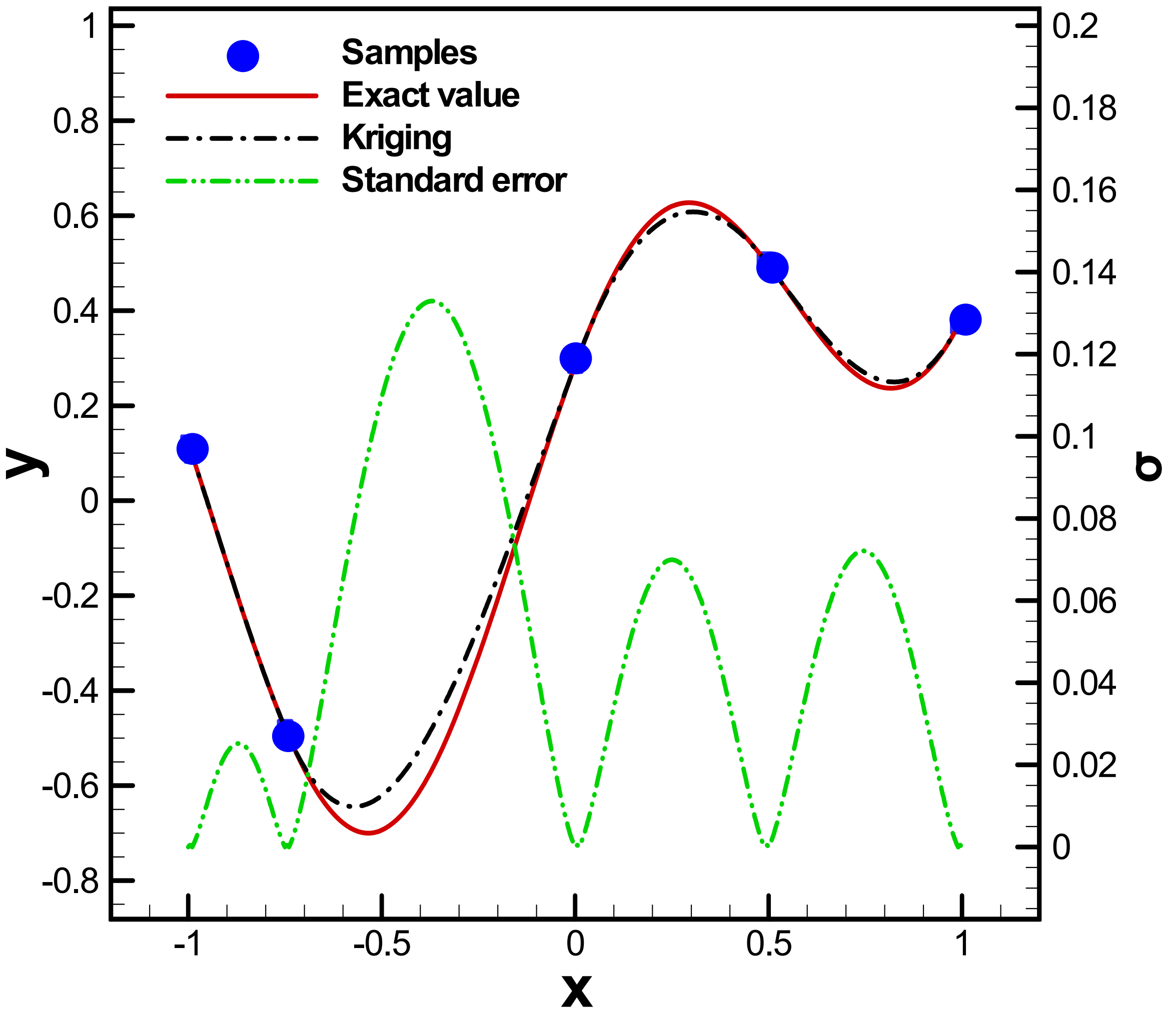
Ersatzmodell gestützte Optimierung



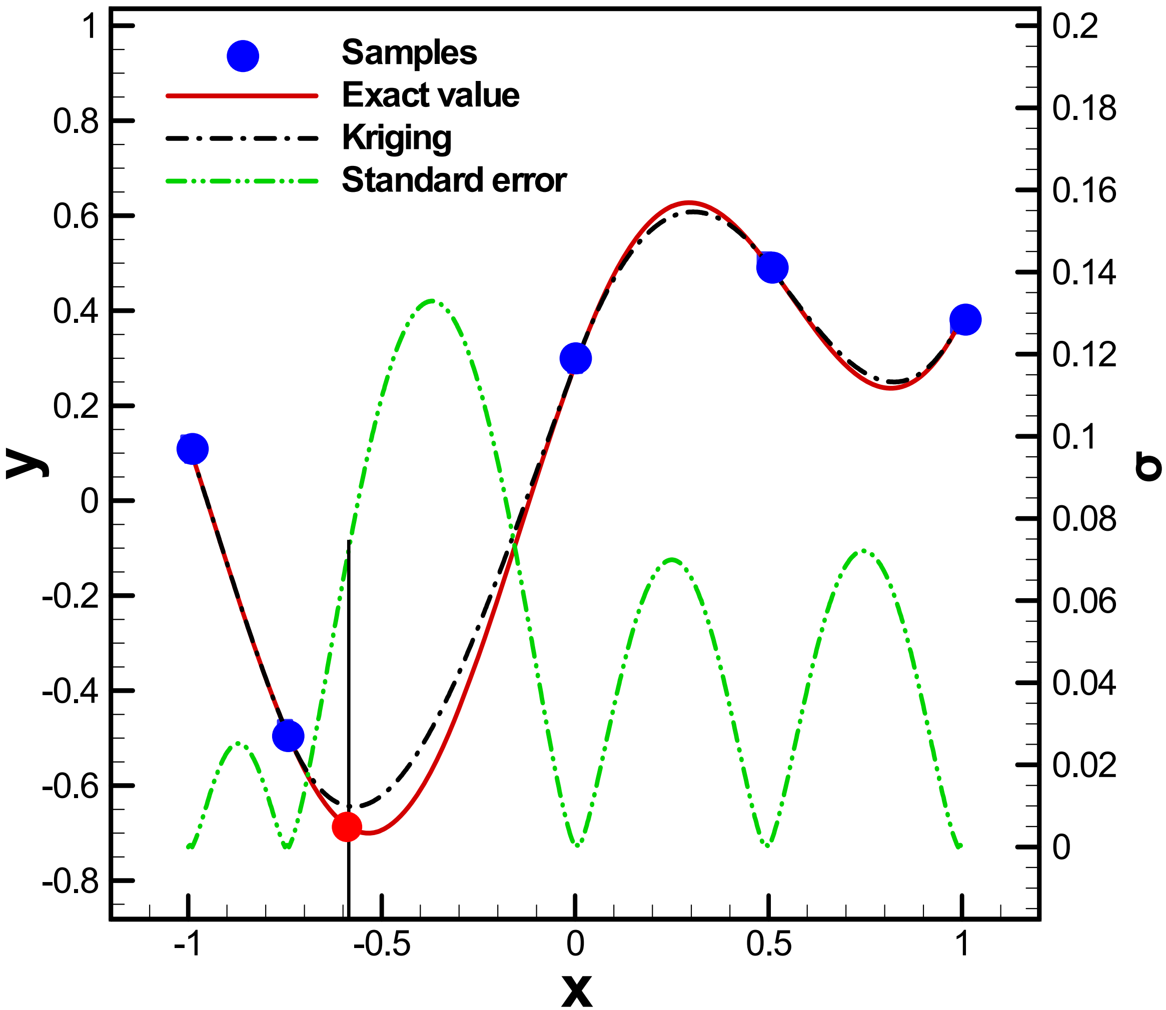
Ersatzmodell gestützte Optimierung



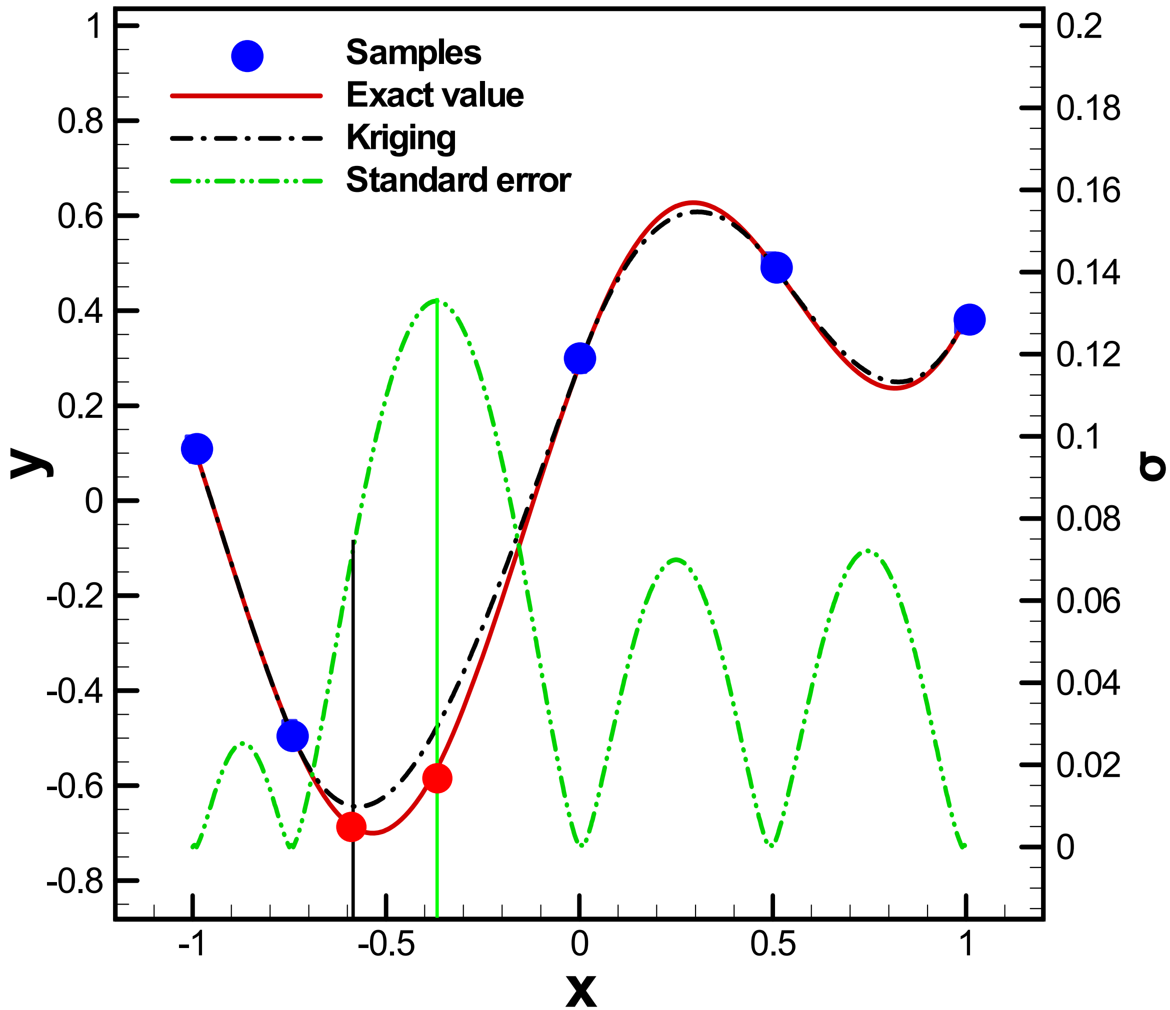
Unsicherheiten in Vorhersagen von Ersatzmodellen



Unsicherheiten in Vorhersagen von Ersatzmodellen



Unsicherheiten in Vorhersagen von Ersatzmodellen



Unsicherheiten in Vorhersagen von Ersatzmodellen; Möglichkeiten der Nutzung

Mögliche Vorgehensweisen:

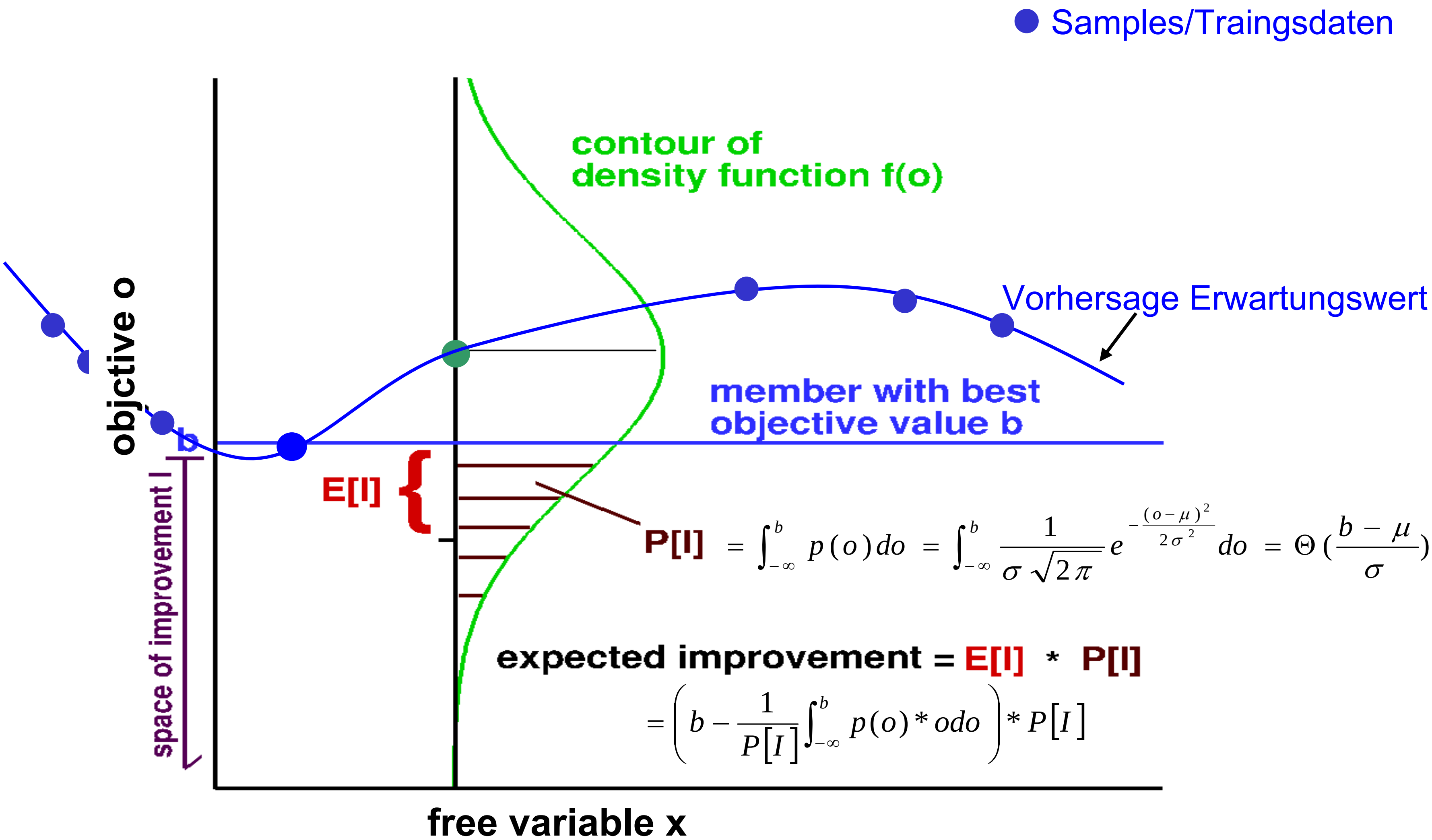
- Optimierung der Zielfunktionen unter Vernachlässigung der Unsicherheiten
- Optimierung auf Bereiche mit großer Modell Unsicherheit
  → Modellverbesserung, globale Optimierung
- Optimierung der Zielfunktionen mit Restriktion auf Unsicherheiten
  → Relativ sichere Verbesserung, lokale CFD/CSM Optimierung

Kompromiss: Exploitation/Exploration

Suche konkrete Maßzahlen:
- Single objective: Expected Improvement

- Multy objective: Expected Volume Gain

Expected Improvement (Single objective)



Expected Improvement

$$\text{ExpImpr(x)} = (b-\mu)*\Theta(\frac{b-\mu}{\sigma}) + \sigma*\varphi(\frac{b-\mu}{\sigma})$$

Herleitung:

$$\text{ExpImpr(x)} = \left(b - \frac{1}{P[I]}\int_{-\infty}^{b} p(o)*odo\right)*P[I] = \left(b - \frac{1}{P[I]}\int_{-\infty}^{b} p(o)*odo\right)*P[I]$$

$$= b*\int_{-\infty}^{b} p(o)do - \int_{-\infty}^{b} p(o)*odo = \int_{-\infty}^{b}(b-o)*p(o)*do$$

$$= \int_{-\infty}^{b}(b-o)*\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{(o-\mu)^2}{2\sigma^2}}do \quad (subst.\;\; u = \frac{o-\mu}{\sigma} \Rightarrow do = \sigma du)$$

$$= \frac{\sigma}{\sigma\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\frac{b-\mu}{\sigma}}(b-(u\sigma+\mu)*e^{-\frac{u^2}{2}}du$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\frac{b-\mu}{\sigma}}(b-\mu)*e^{-\frac{u^2}{2}}du + \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\frac{b-\mu}{\sigma}}ue^{-\frac{u^2}{2}}du$$

$$= (b-\mu)*\Theta(\frac{b-\mu}{\sigma}) + \sigma*\varphi(\frac{b-\mu}{\sigma})$$

Expected Improvement

$$\text{ExpImpr(x)} = (b-\mu) * \Theta\left(\frac{b-\mu}{\sigma}\right) + \sigma * \varphi\left(\frac{b-\mu}{\sigma}\right)$$

$$\mu = \text{Vorhergesagter Erwartungswert}$$

$$\sigma = \text{Vorhergesagte Standardabweichung}$$

$$\varphi = \text{Standardnormalverteilung Dichtefunktion}$$

$$\Theta = \text{Standardnormalverteilung}$$

Vorteile von ExpImpr :

-Aus den Vorhersagen Erwartungswert und Varianz lässt sich bei einer Zielfunktion und einem zu bewertenden Member das ExpImpr-Kriterium leicht ermitteln (mit Näherung für Θ).

-Der 2. Summand von ExpImpr bevorzugt Regionen mit größerer Unsicherheit in den Vorhersagen →guter Kompromiss Exploration/Exploitation

-Konkrete Maßzahl für Optimierung

-Im Mittel ist für plausible Ersatzmodelle der so erzielte Optimierungsfortschritt optimal.

Nachteil von ExpImpr :

-Analytische Erweiterung auf mehrere Zielfunktionen/Nebenbedingungen und mehrere Member sehr komplex.

Expected Volume Gain

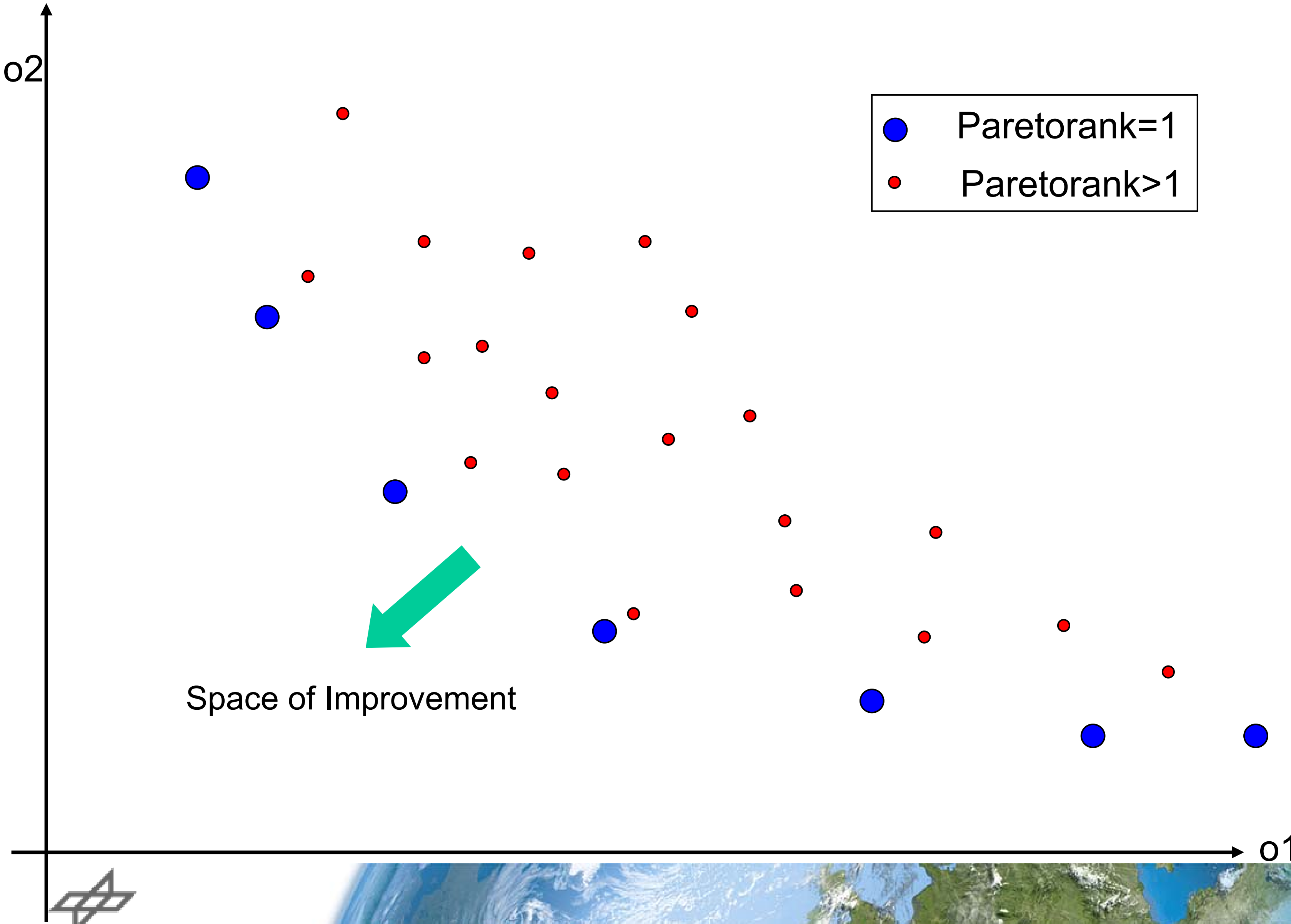
Ziele:

-Konkretes Maß und Erweiterung von ExpImpr für Mehrzieloptimierung unter Nebenbedingungen auf Ersatzmodellen mit Varianz-Vorhersagen.

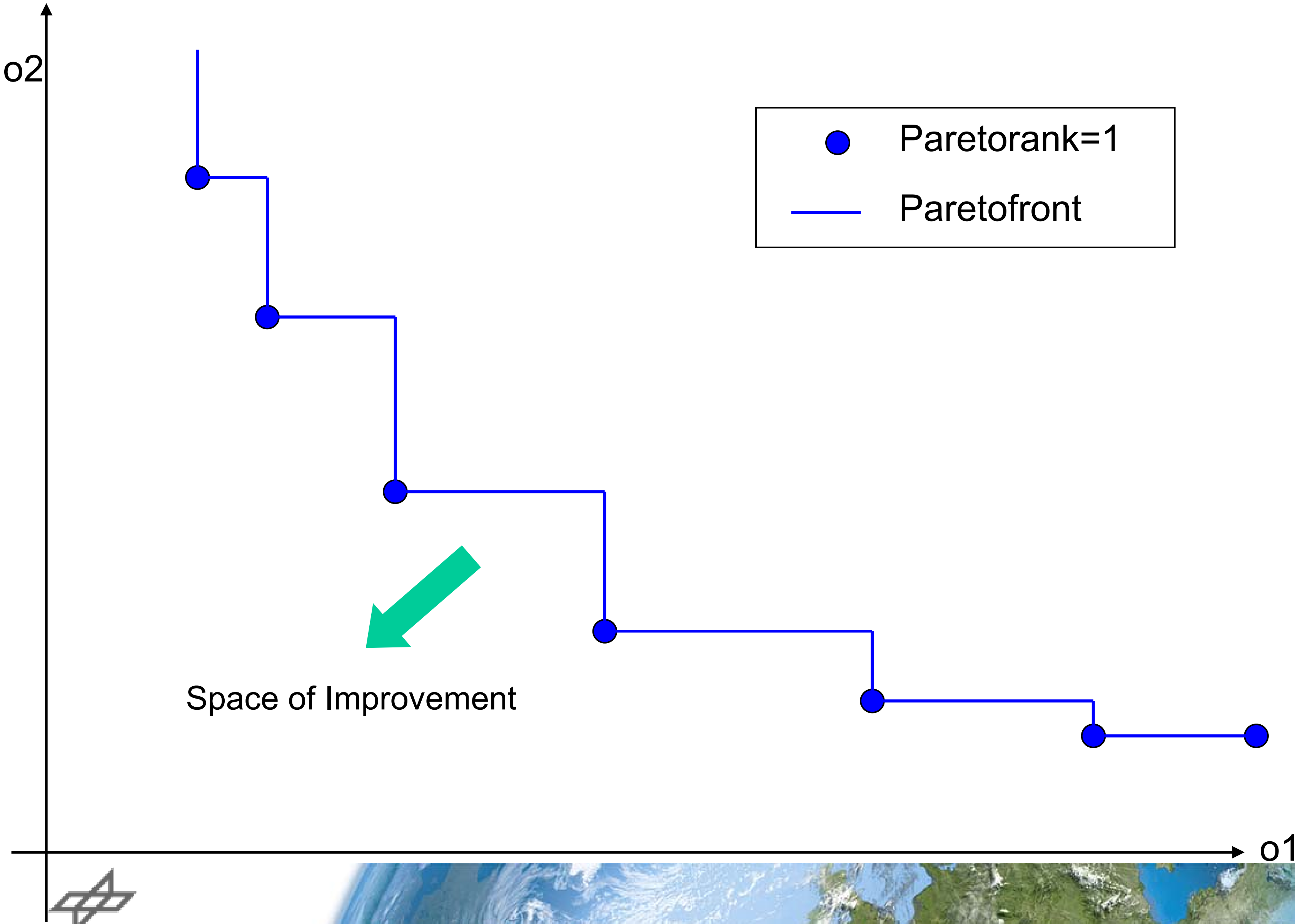
-Erweiterung von ExpImpr auf die erwartete Verbesserung mehrerer Member

-Schnelle algorithmische Auswertung der Maßzahl

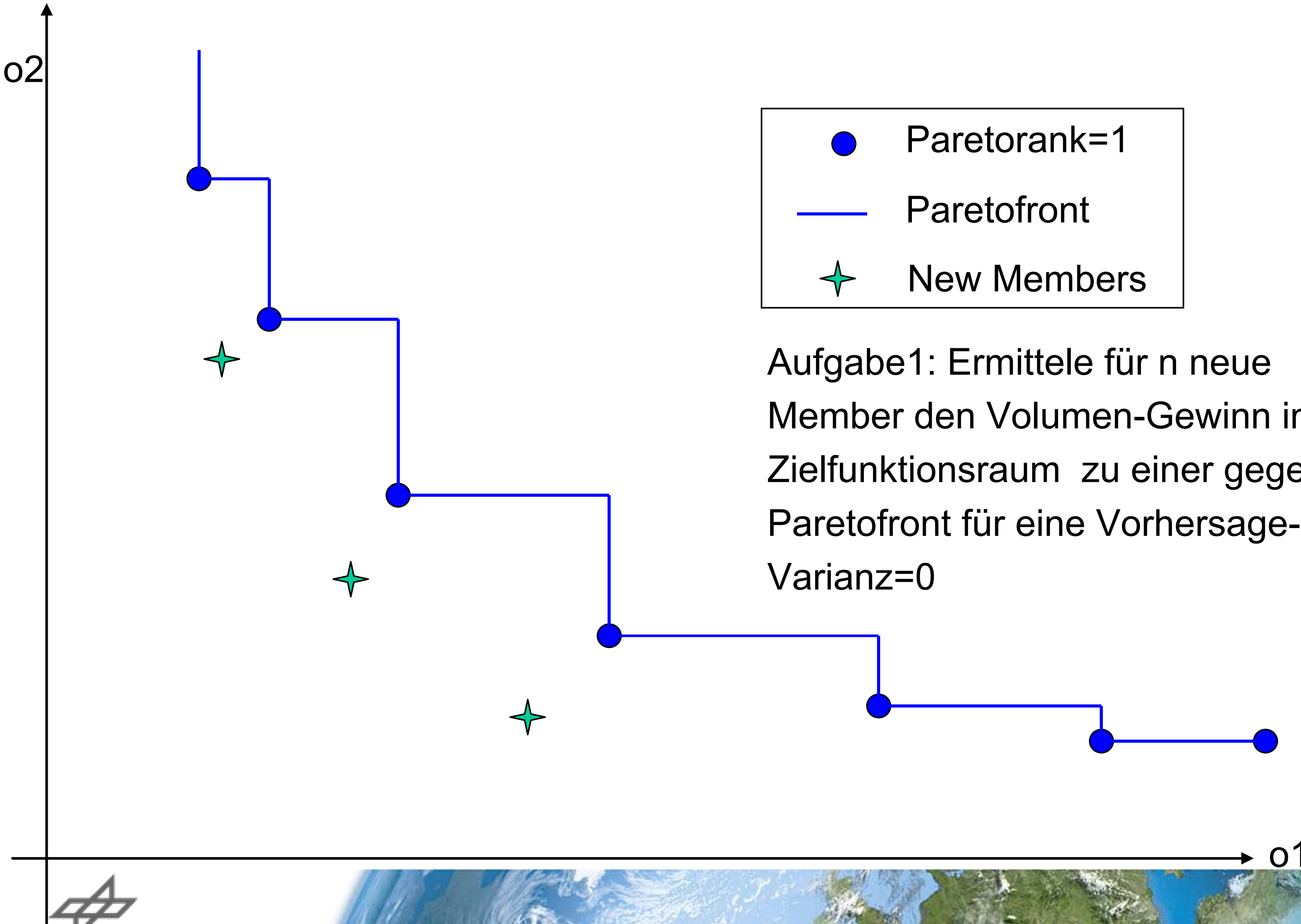
Expected Volume Gain: Bsp. 2 Zielfunktionen



Expected Volume Gain

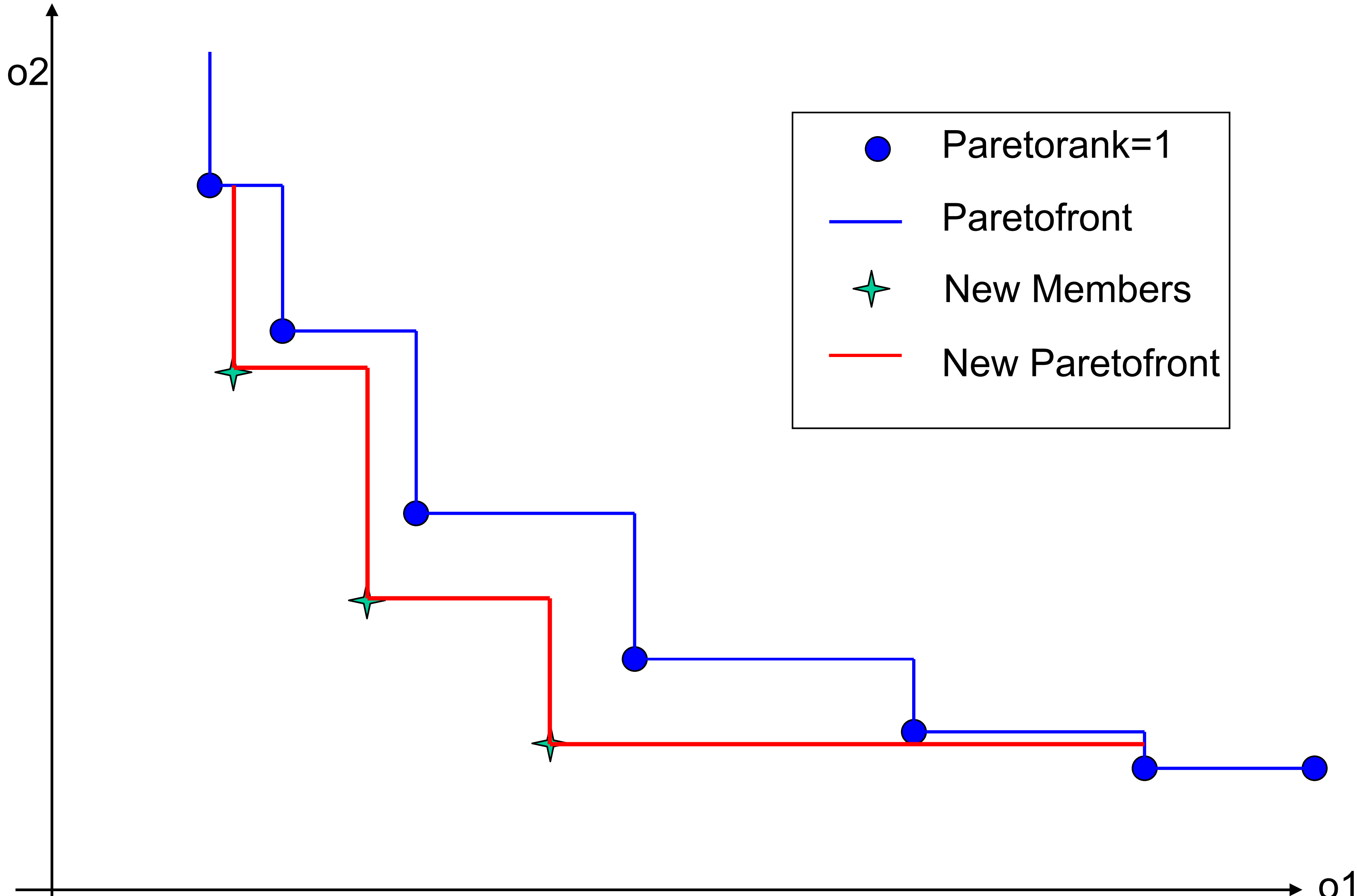


(Expected) Volume Gain

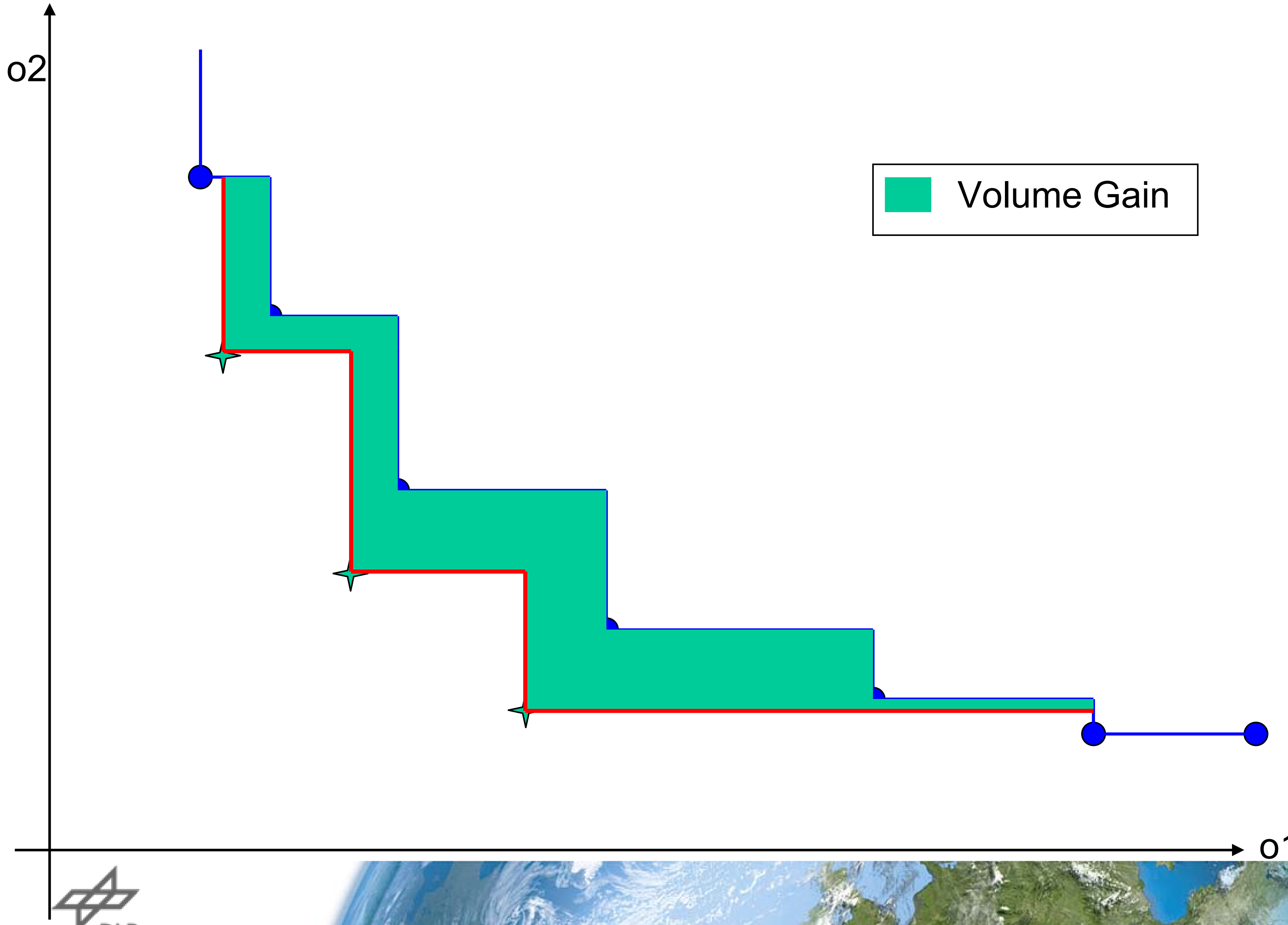


Aufgabe1: Ermittele für n neue Member den Volumen-Gewinn im Zielfunktionsraum zu einer gegebenen Paretofront für eine Vorhersage-Varianz=0

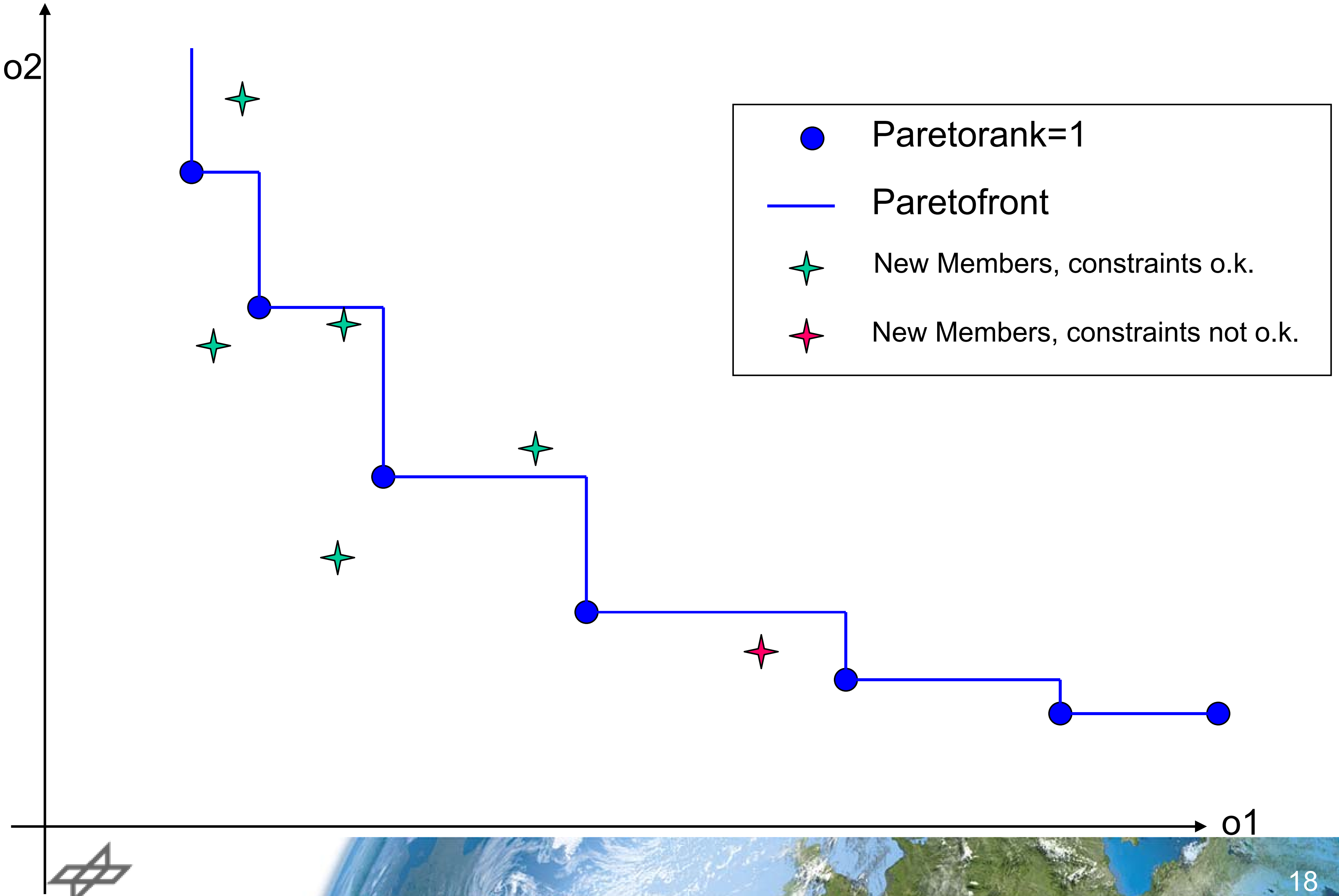
(Expected) Volume Gain



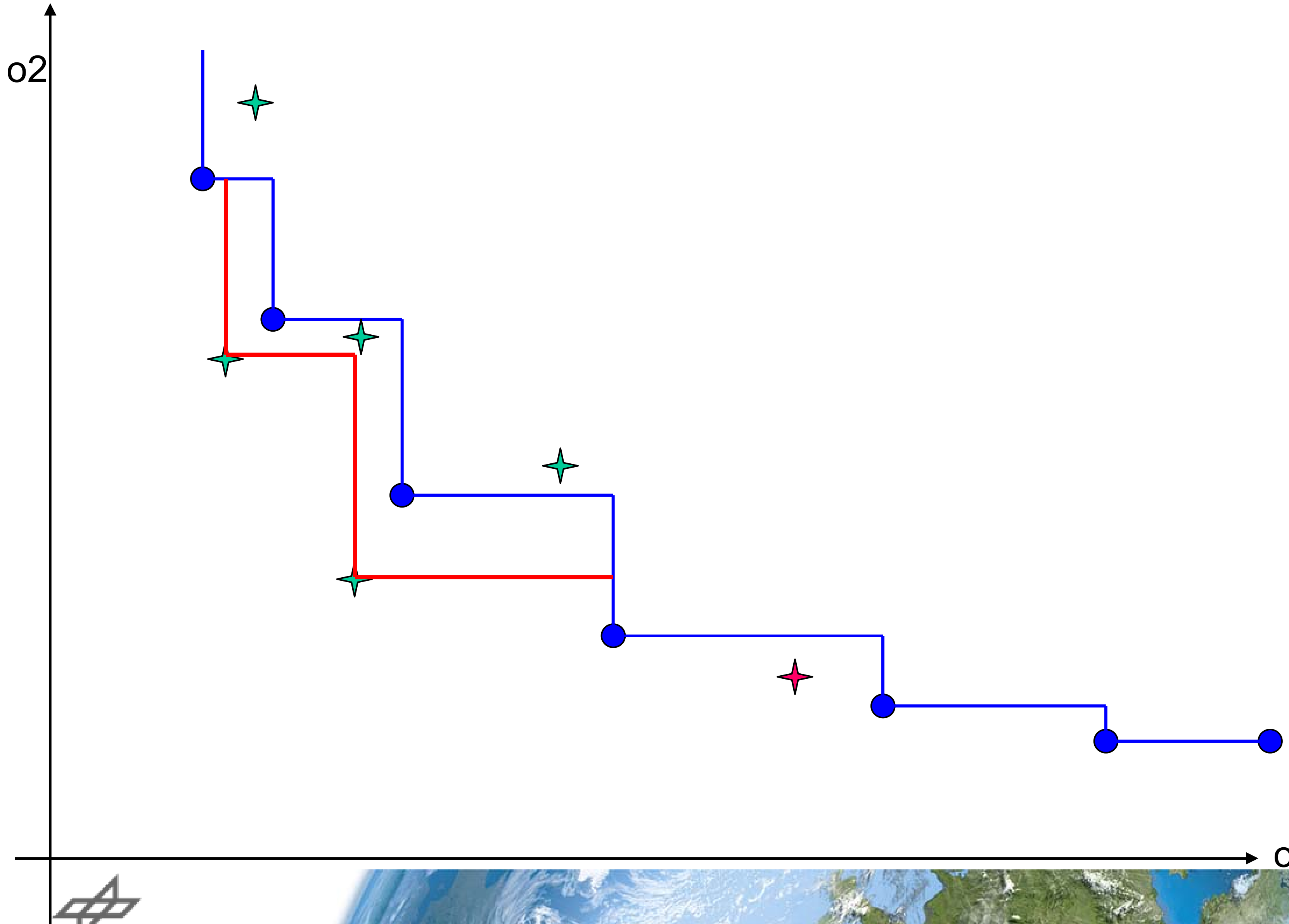
(Expected) Volume Gain



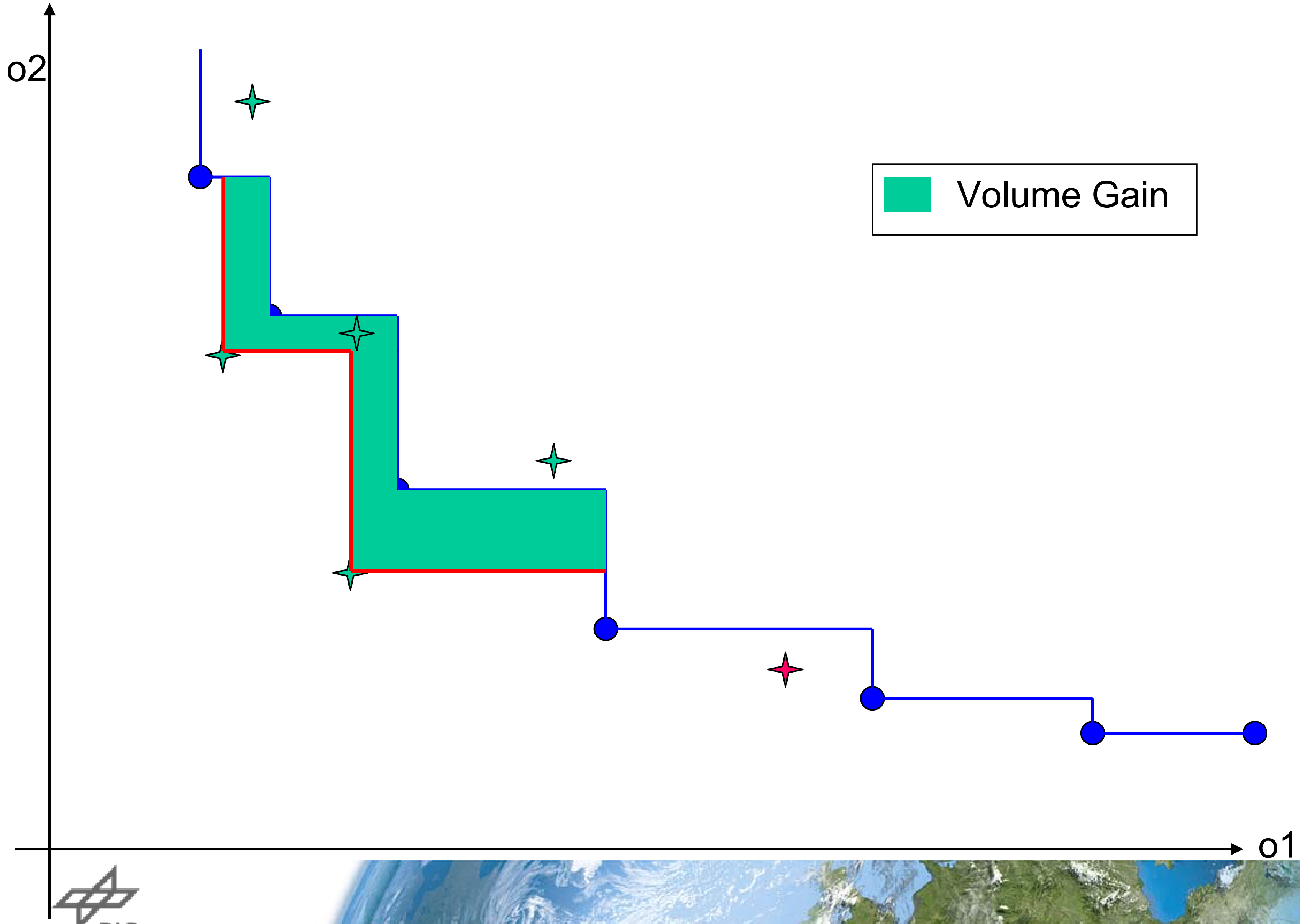
(Expected) Volume Gain, Nebenbedingungen



(Expected) Volume Gain, Nebenbedingungen



(Expected) Volume Gain , Nebenbedingungen



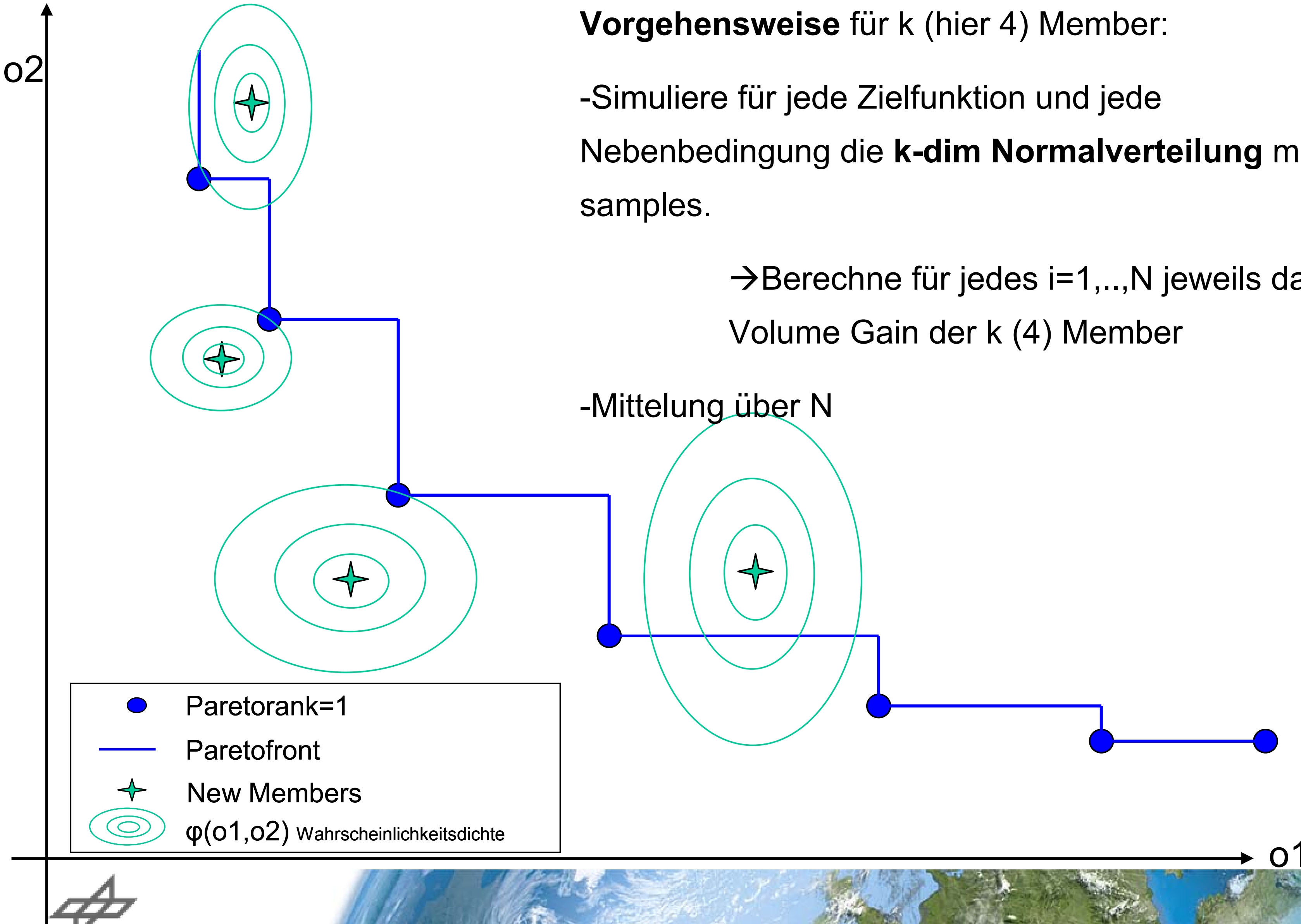
Expected Volume Gain

Vorgehensweise für k (hier 4) Member:

-Simuliere für jede Zielfunktion und jede Nebenbedingung die **k-dim Normalverteilung** mit N samples.

→Berechne für jedes i=1,..,N jeweils das Volume Gain der k (4) Member

-Mittelung über N



Expected Volume Gain

Vorgehensweise für das Aufstellen der k-dim Normalverteilung

$$f(y) = \frac{1}{(2\pi)^k \, |\Sigma|^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{1}{2}(y-\mu)^T \Sigma (y-\mu)}$$

$$\Sigma = Cov\,(y_i, y_j)$$

Das **Kovarianzmodell** ergibt sich aus den trainierten Ersatzmodellen.

Frage: Warum werden die k Simulationen nicht unabhängig aus ihren ein-dimensionalen Verteilungen erzeugt?

Grund: ExpVolGain({Memb1, Memb2})< ExpVolGain({Memb1, Memb2, Memb2})

Analytisches Beispiel

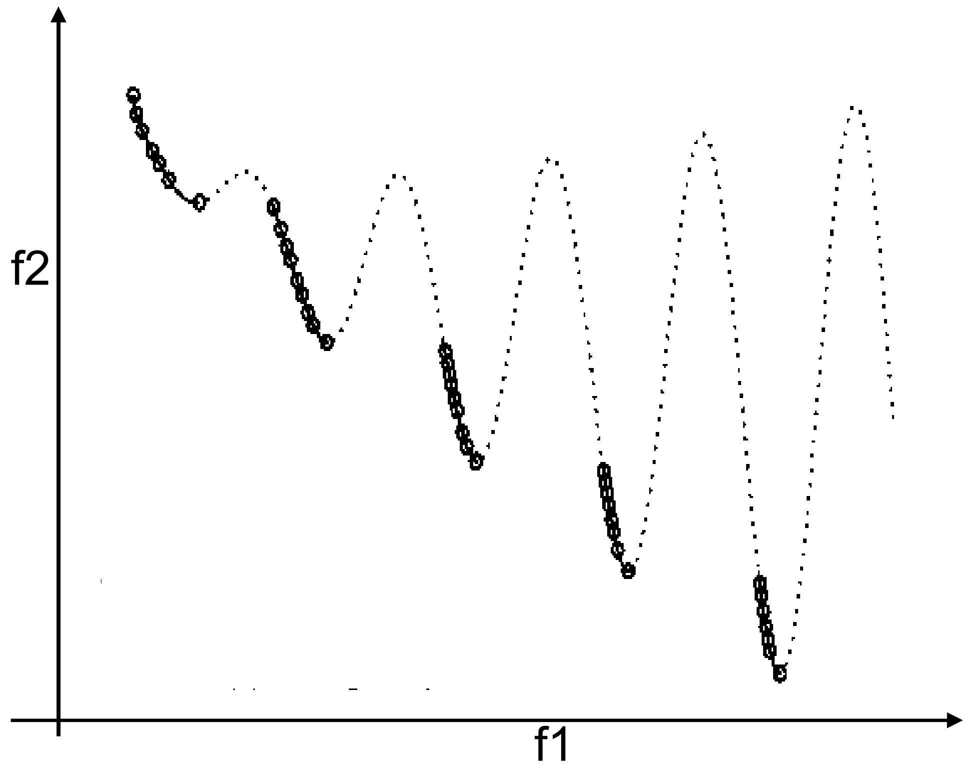
Fkt. ähnlich ZDT3: hier 10 freie Variablen und 2 Zielfunktionen

$$f_1(\vec{x}) = x_1$$

$$g(\vec{x}) = 1 + \frac{9}{n-1} \sum_{i=2}^{NoOfVar} (x_i - 0.5)^2,$$

$$h(f_{1,}g) = 2 - \sqrt{\frac{f_1}{g}} - (\frac{f_1}{g}) \cdot \sin(10 \cdot \pi \cdot f_1)$$

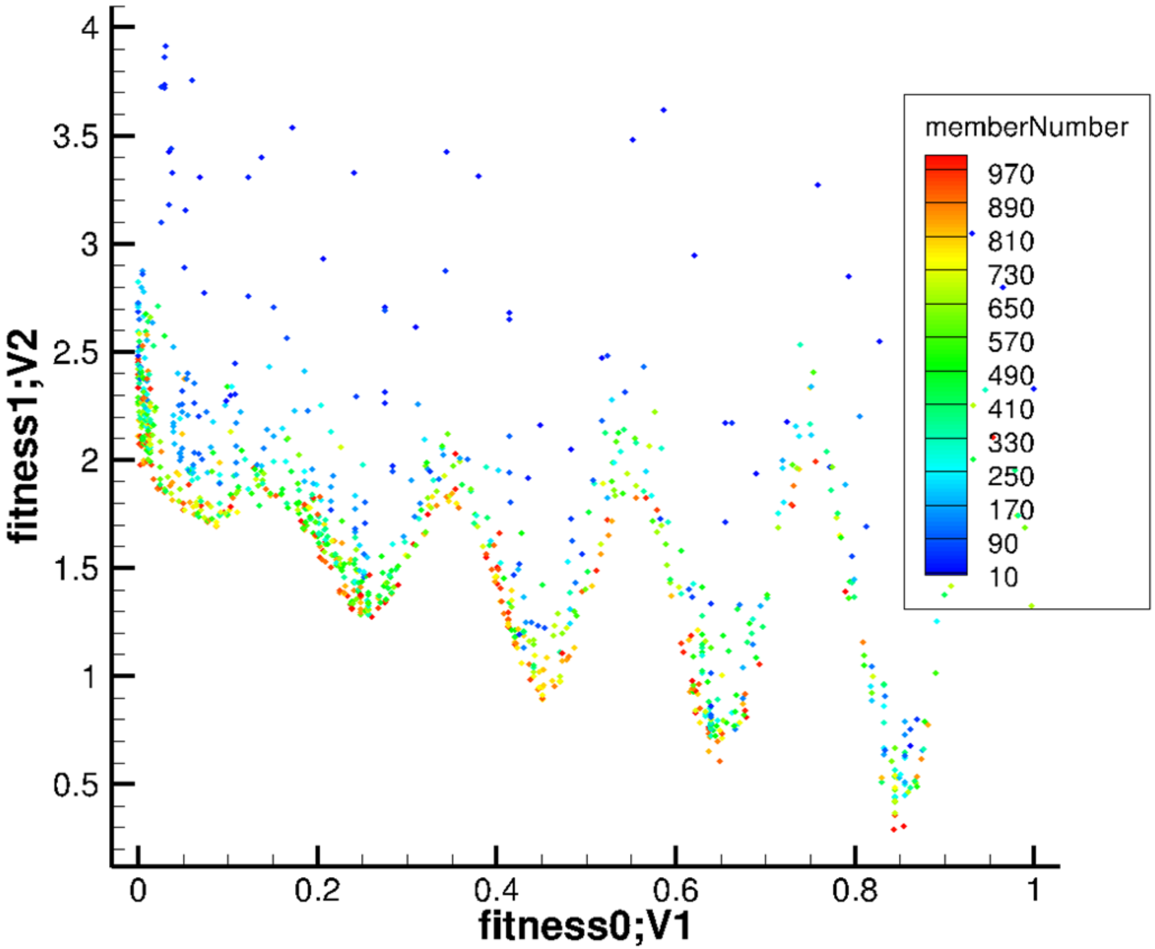
$$f_2(\vec{x}) = g(\vec{x}) * h(x_{1,}g(\vec{x}))$$



Analytisches Beispiel

Initialisierung: 30 LHC-Member

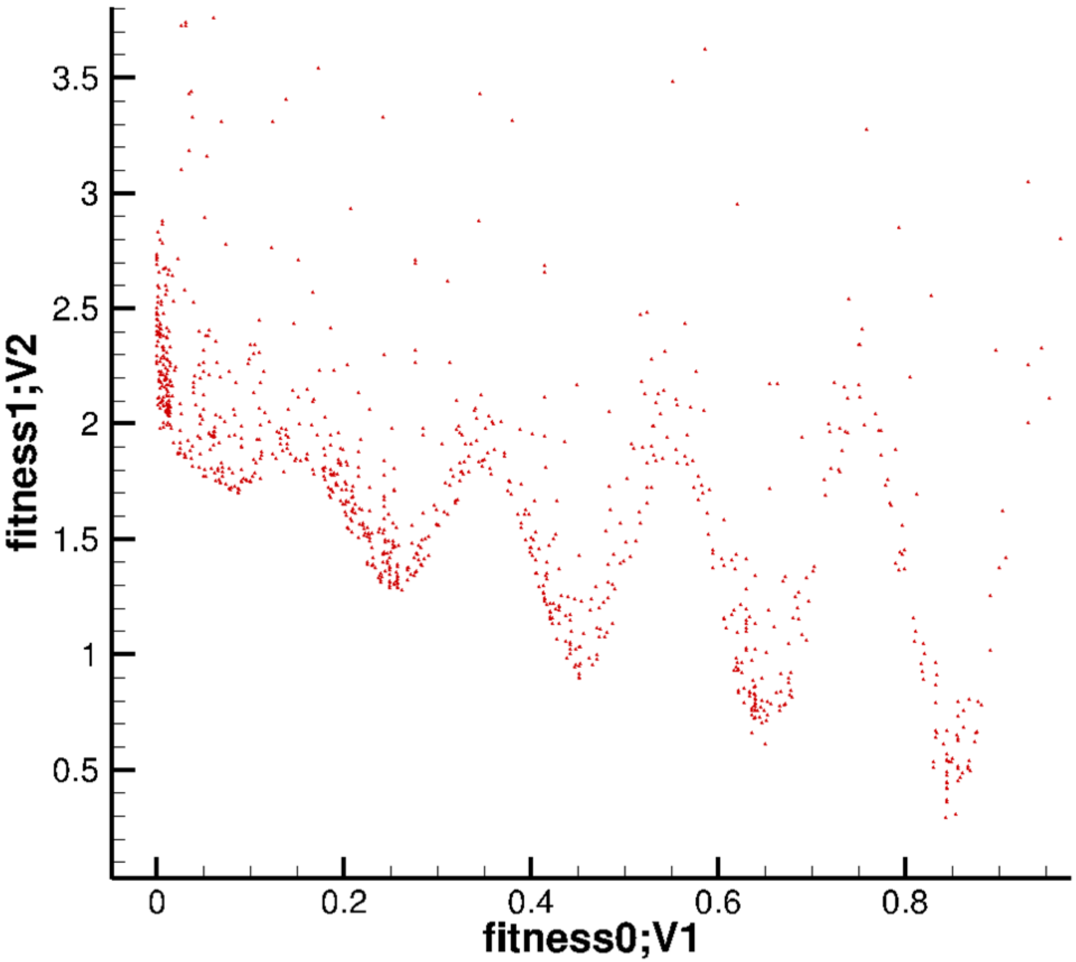
SYMBOL	ERZEUGUNG	ANZAHL
▲	Mutate	1000



Analytisches Beispiel

Initialisierung: 30 LHC-Member

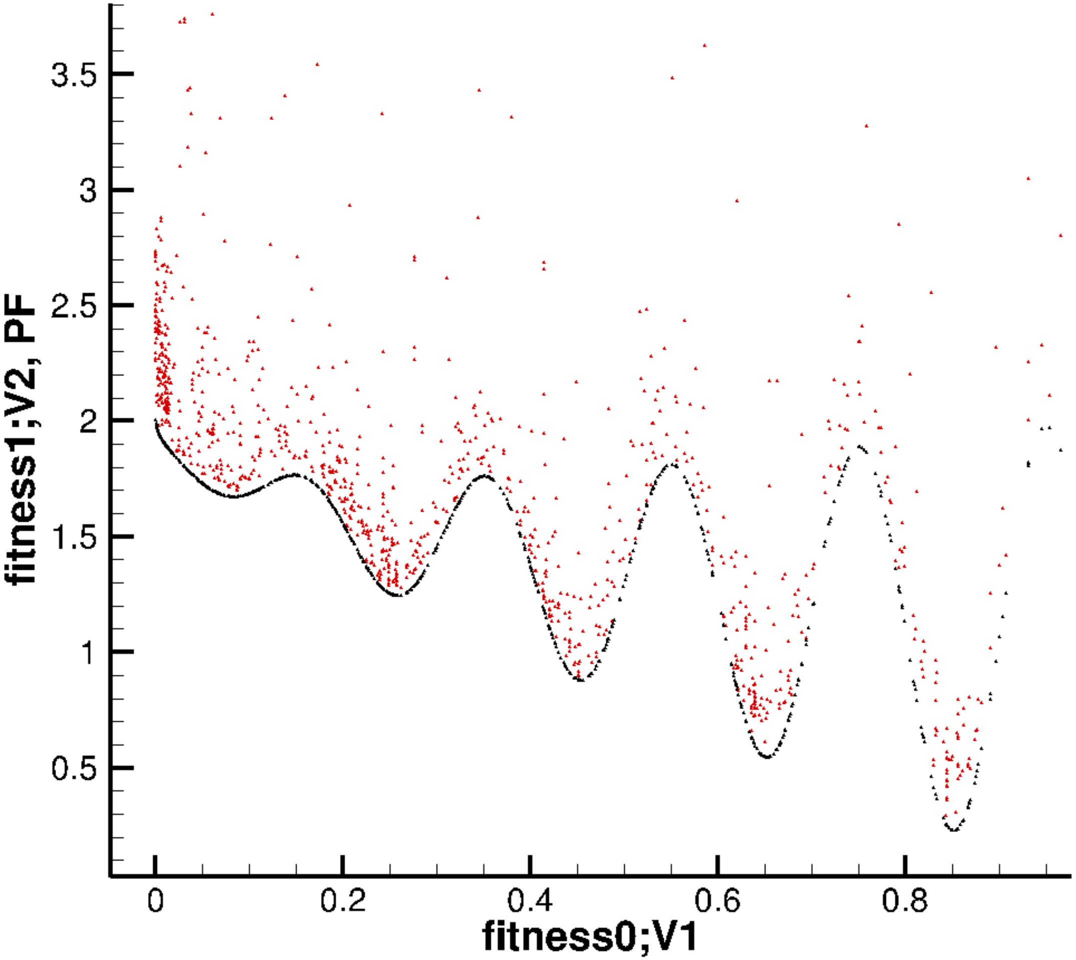
SYMBOL	ERZEUGUNG	ANZAHL
▲	Mutate	1000



Analytisches Beispiel

Initialisierung: 30 LHC-Member

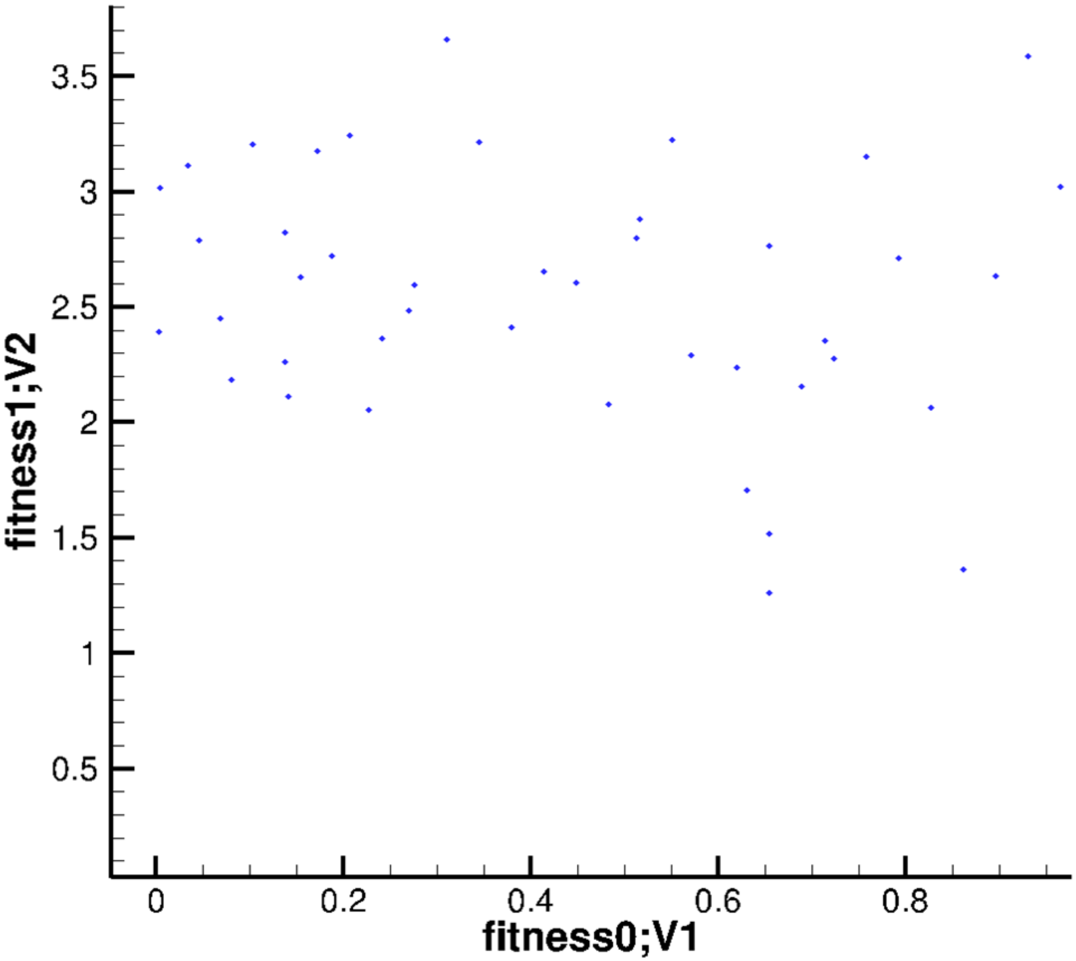
SYMBOL	ERZEUGUNG	ANZAHL
▲ (schwarz)	PF analytisch	
▲ (rot)	Mutate	1000



Analytisches Beispiel

Initialisierung: 30 LHC-Member

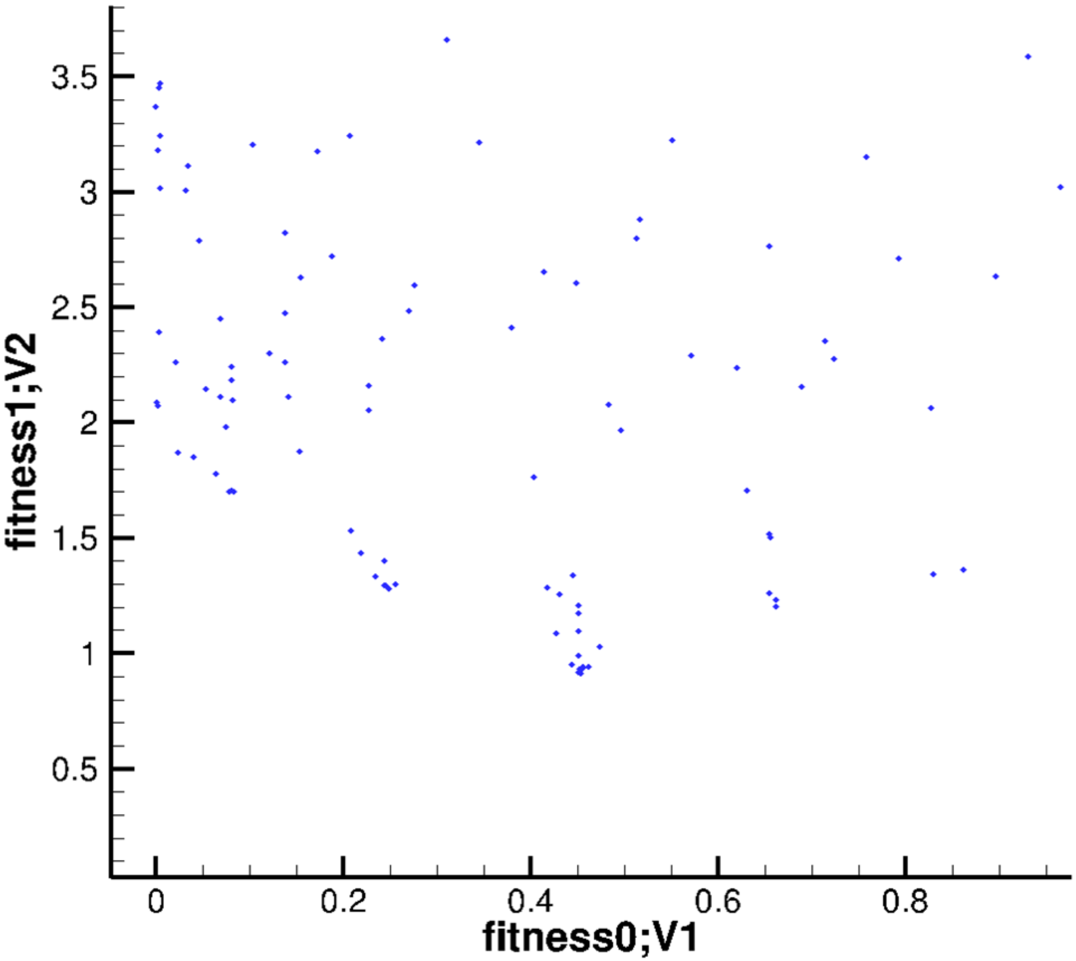
SYMBOL	ERZEUGUNG	ANZAHL
●	Exp Vol Gain	50



Analytisches Beispiel

Initialisierung: 30 LHC-Member

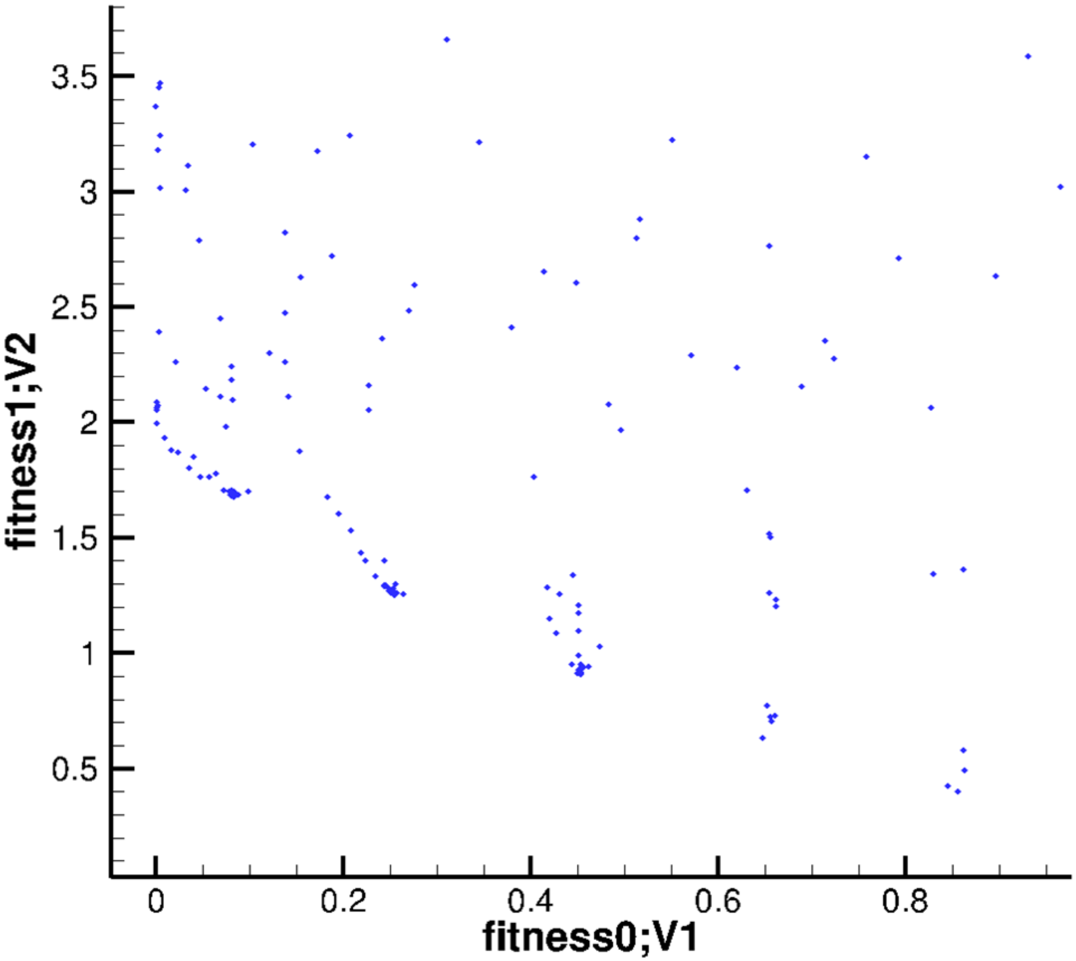
SYMBOL	ERZEUGUNG	ANZAHL
●	Exp Vol Gain	100



Analytisches Beispiel

Initialisierung: 30 LHC-Member

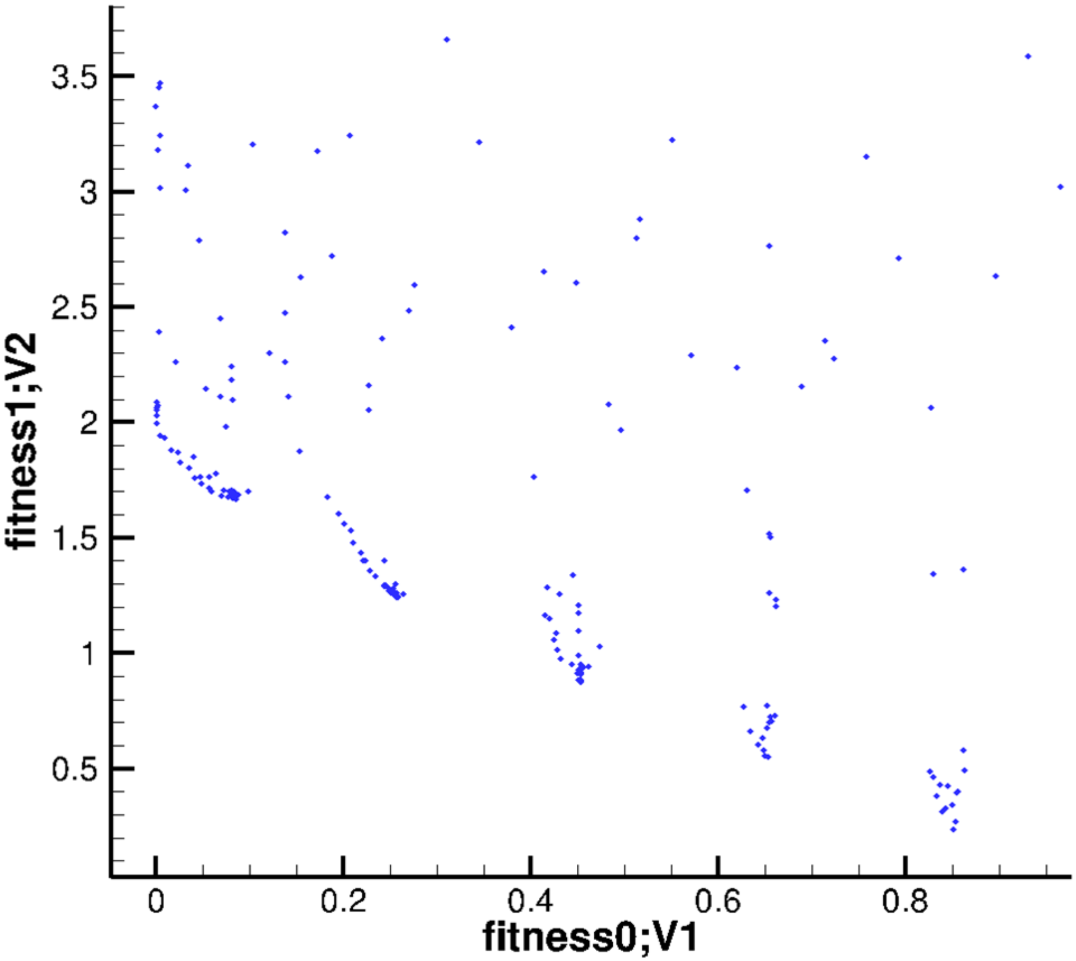
SYMBOL	ERZEUGUNG	ANZAHL
●	Exp Vol Gain	150



Analytisches Beispiel

Initialisierung: 30 LHC-Member

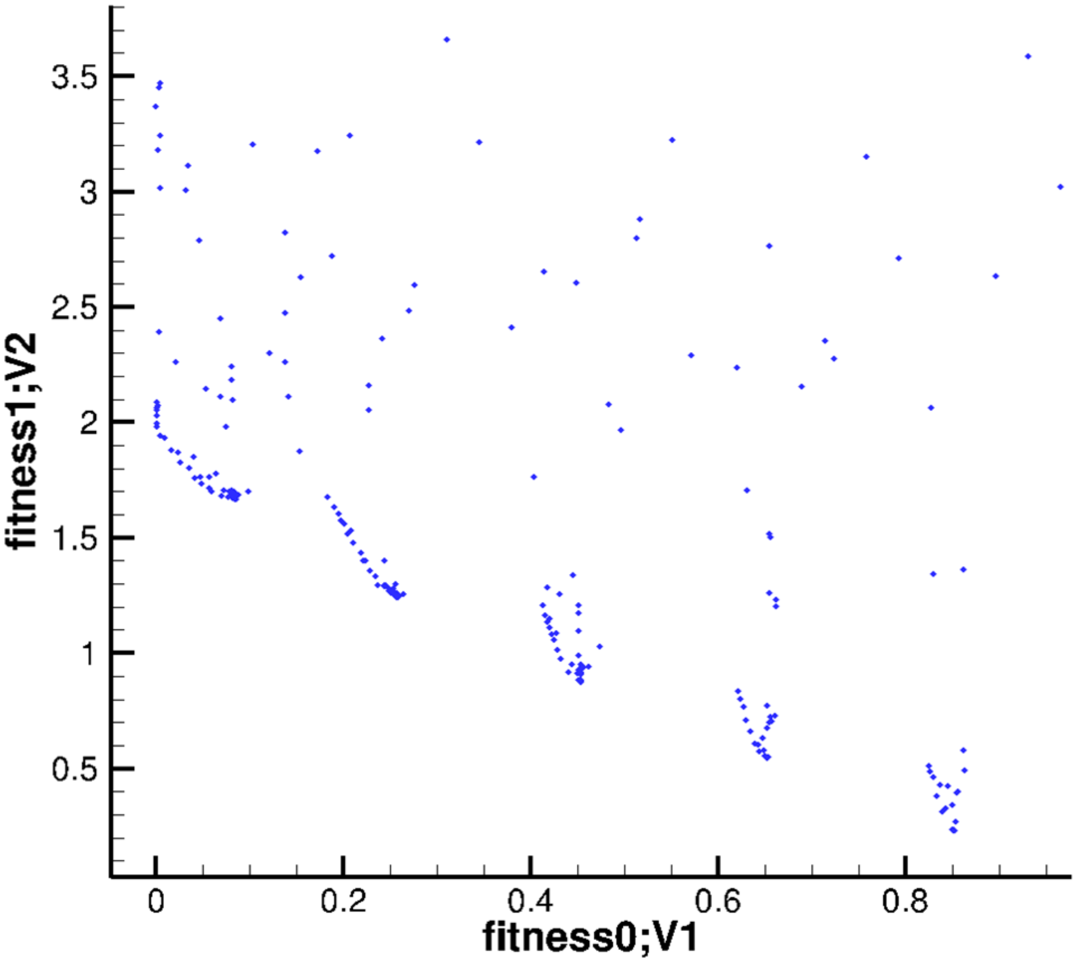
SYMBOL	ERZEUGUNG	ANZAHL
●	Exp Vol Gain	200



Analytisches Beispiel

Initialisierung: 30 LHC-Member

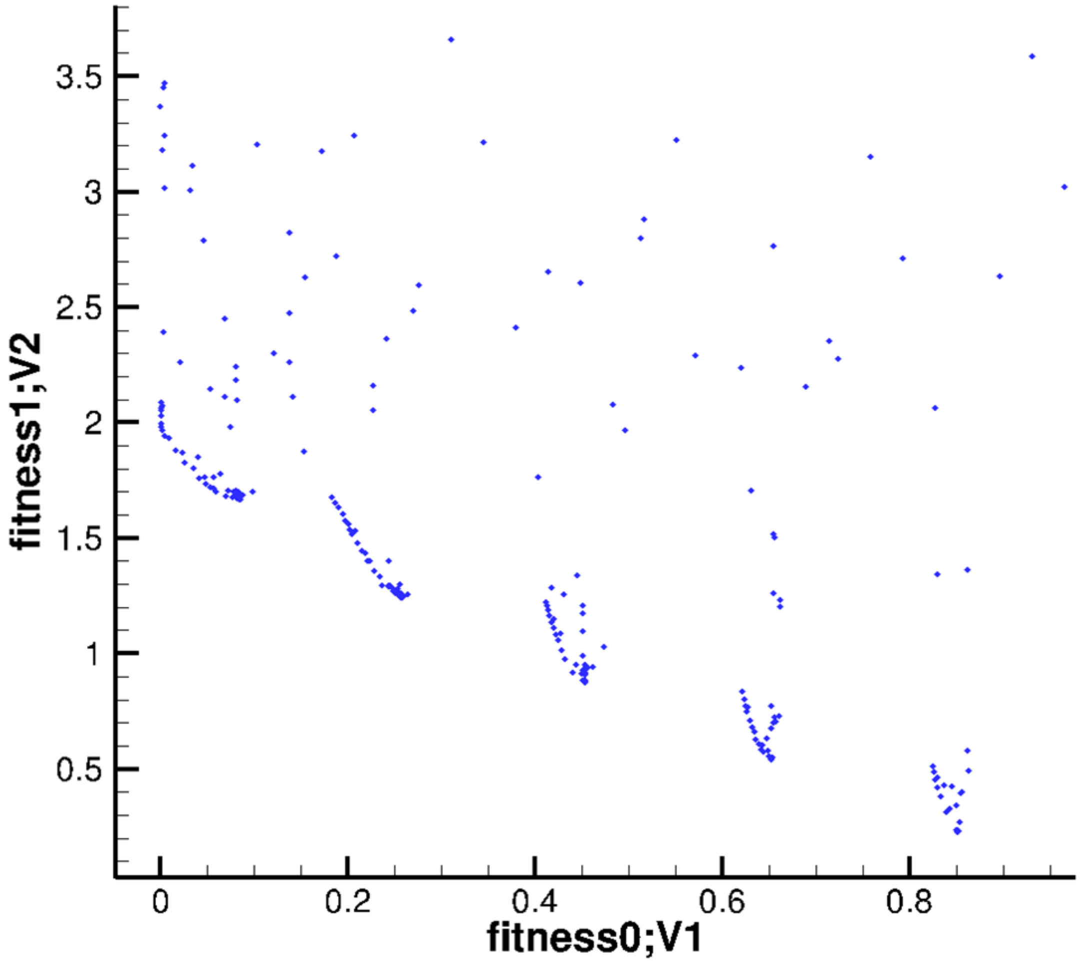
SYMBOL	ERZEUGUNG	ANZAHL
●	Exp Vol Gain	250



Analytisches Beispiel

Initialisierung: 30 LHC-Member

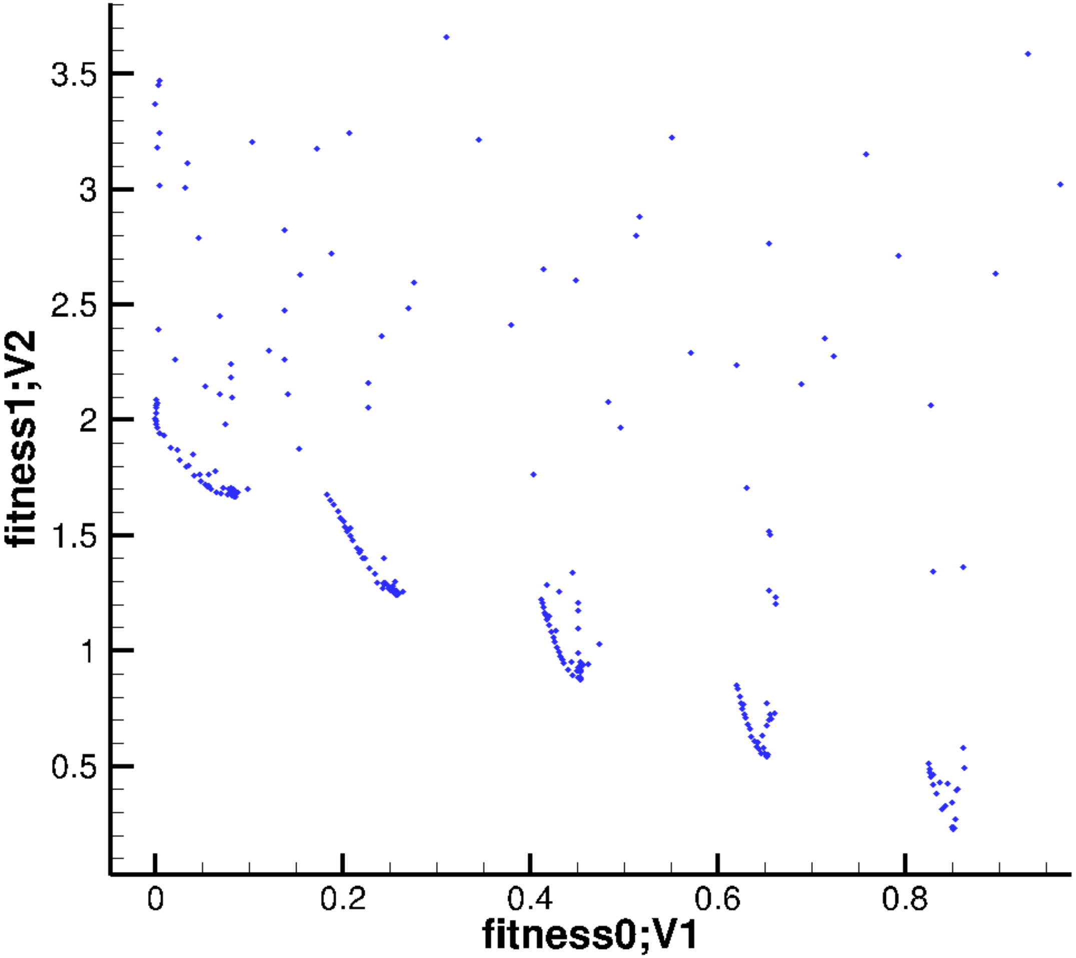
SYMBOL	ERZEUGUNG	ANZAHL
●	Exp Vol Gain	300



Analytisches Beispiel

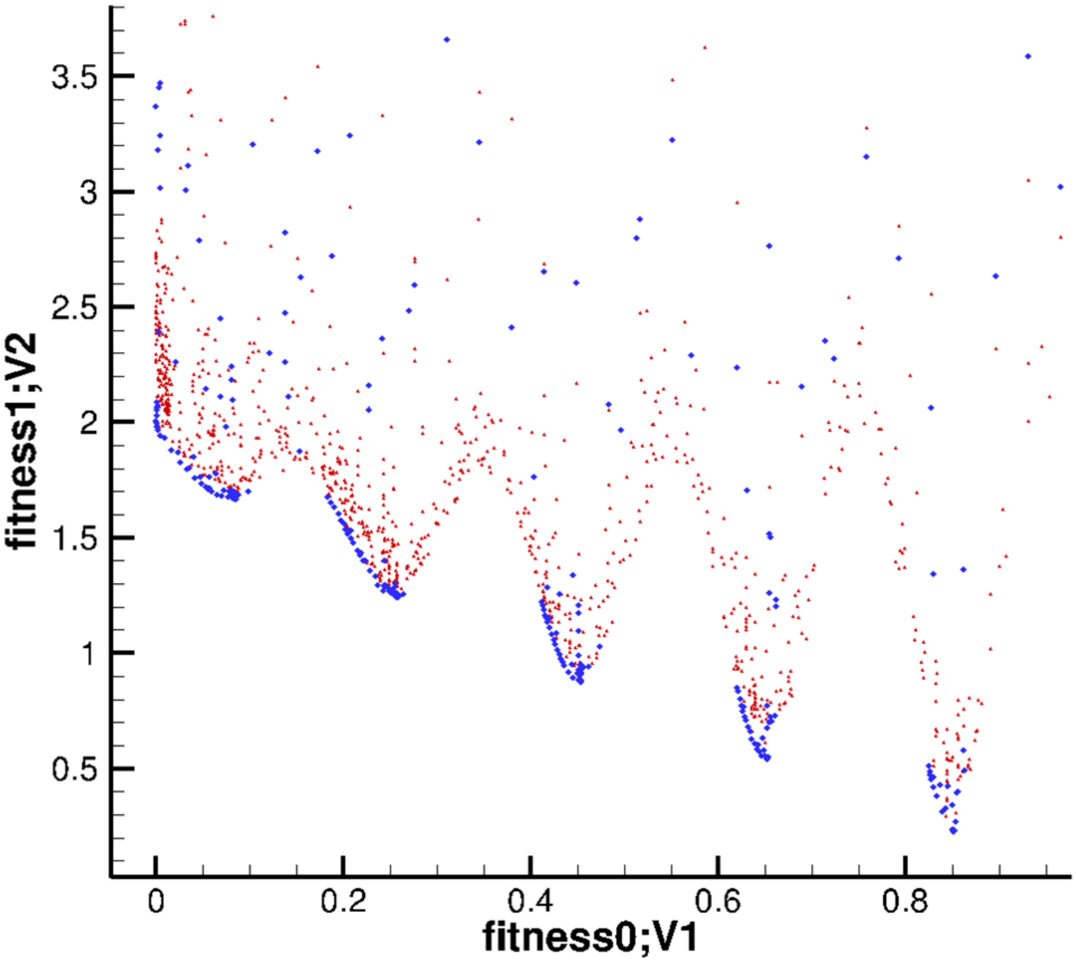
Initialisierung: 30 LHC-Member

SYMBOL	ERZEUGUNG	ANZAHL
●	Exp Vol Gain	350



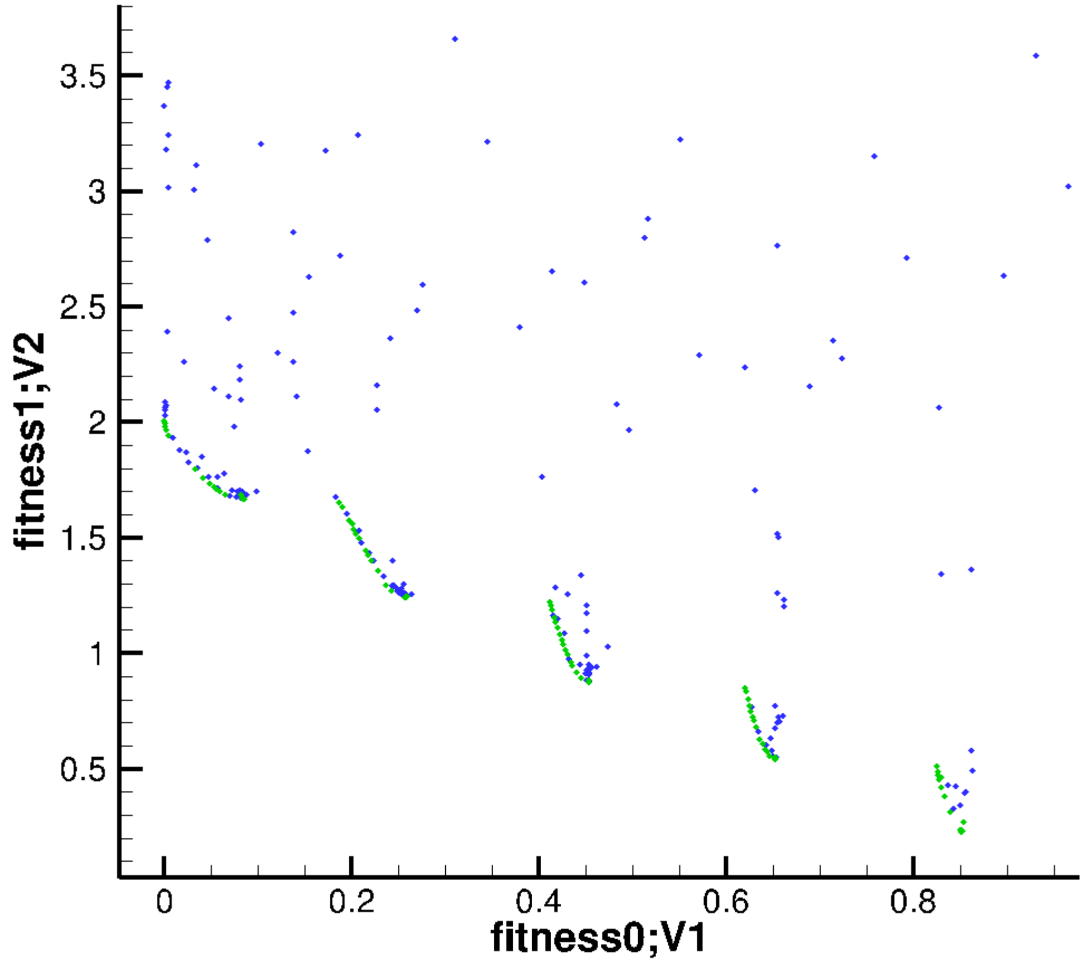
Analytisches Beispiel

SYMBOL	ERZEUGUNG	ANZAHL
●	Exp Vol Gain	350
▲	Mutate	1000



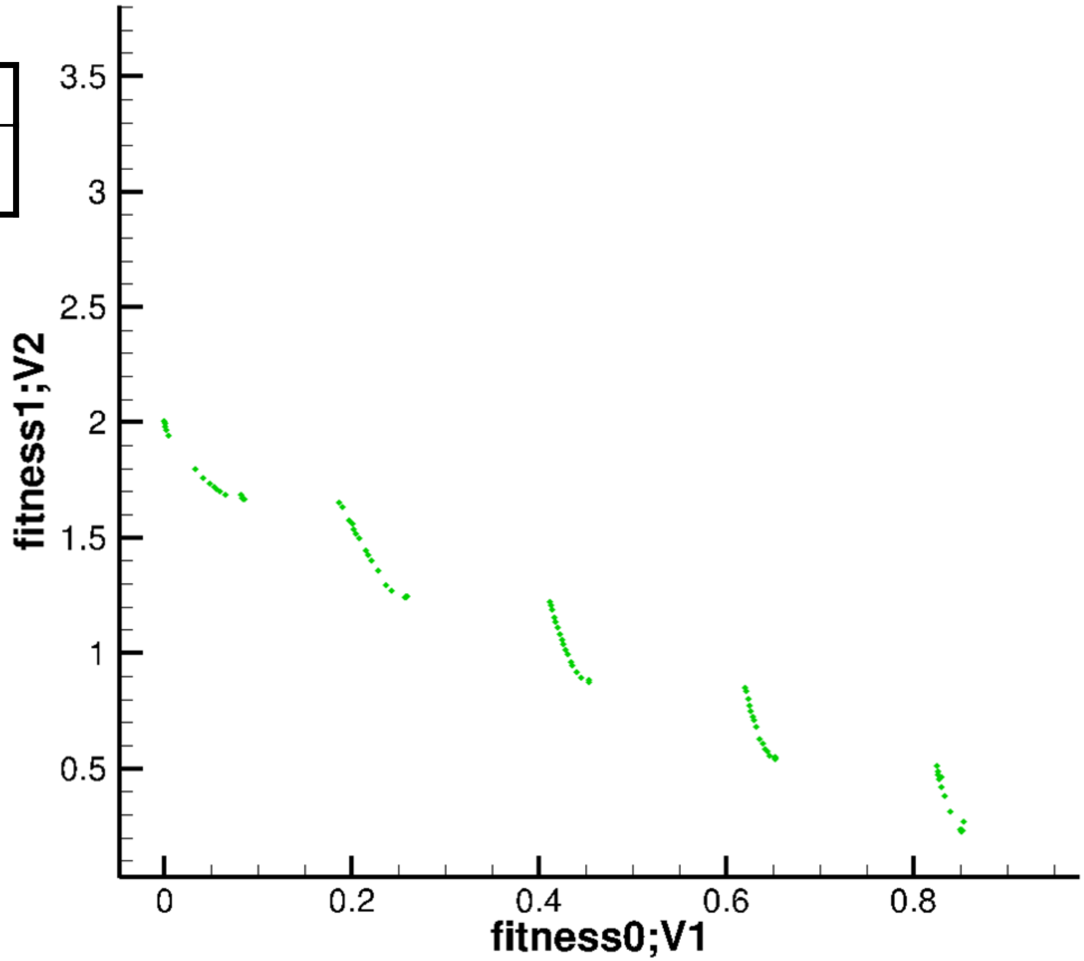
Analytisches Beispiel

SYMBOL	ERZEUGUNG	ANZAHL
● (blue)	Exp Vol Gain	350
● (green)	Exp Vol Gain Last 150	150



Analytisches Beispiel

SYMBOL	ERZEUGUNG	ANZAHL
●	Exp Vol Gain Last 150	150



Turbomaschinen Beispiel

Partner: Siemens PG

Optimiere Lauf_1 einer stationären Gasturbine

Rechengebiet: IGV-R1-S1

Simulationen pro Member:

- 2*TRACE
- 3*Calculix statisch dynamisch mit/ohne Aero Druckverteilung

#gespeicherte Simulationsgrößen=4261

#freie Variablen= 81 (nur R1-Schaufelgeometrie retrofittable)

#Betriebspunkte=2 (ADP / pumpgrenznaher Punkt Teildrehzahl)

#Zielfunktionen =2 (Wirkungsgrad Rotor ADP / Pumpgrenzkriterium)

#Nebenbedingungen CFD = 4 (ADP: massflow / eta / Pi-tot; OP2: eta)

#Nebenbedingungen CSM = 4 (vanMises / MagFaktor / Eigenfrqu. Mode1 +Mode2)

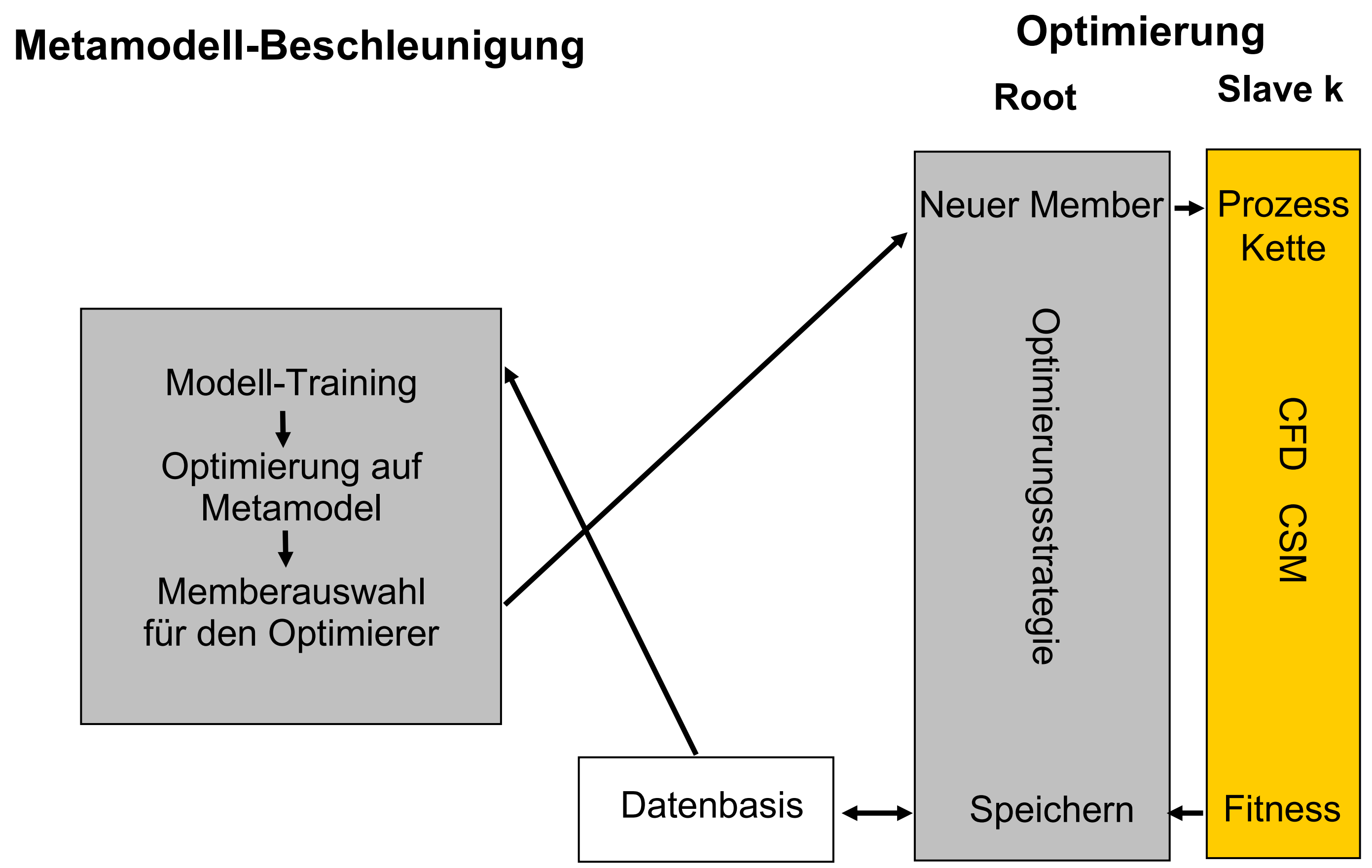
#Nebenbedingungen Geometrie = 6 (Sehnenlaengen Profile)

5<Anzahl Slaves<50

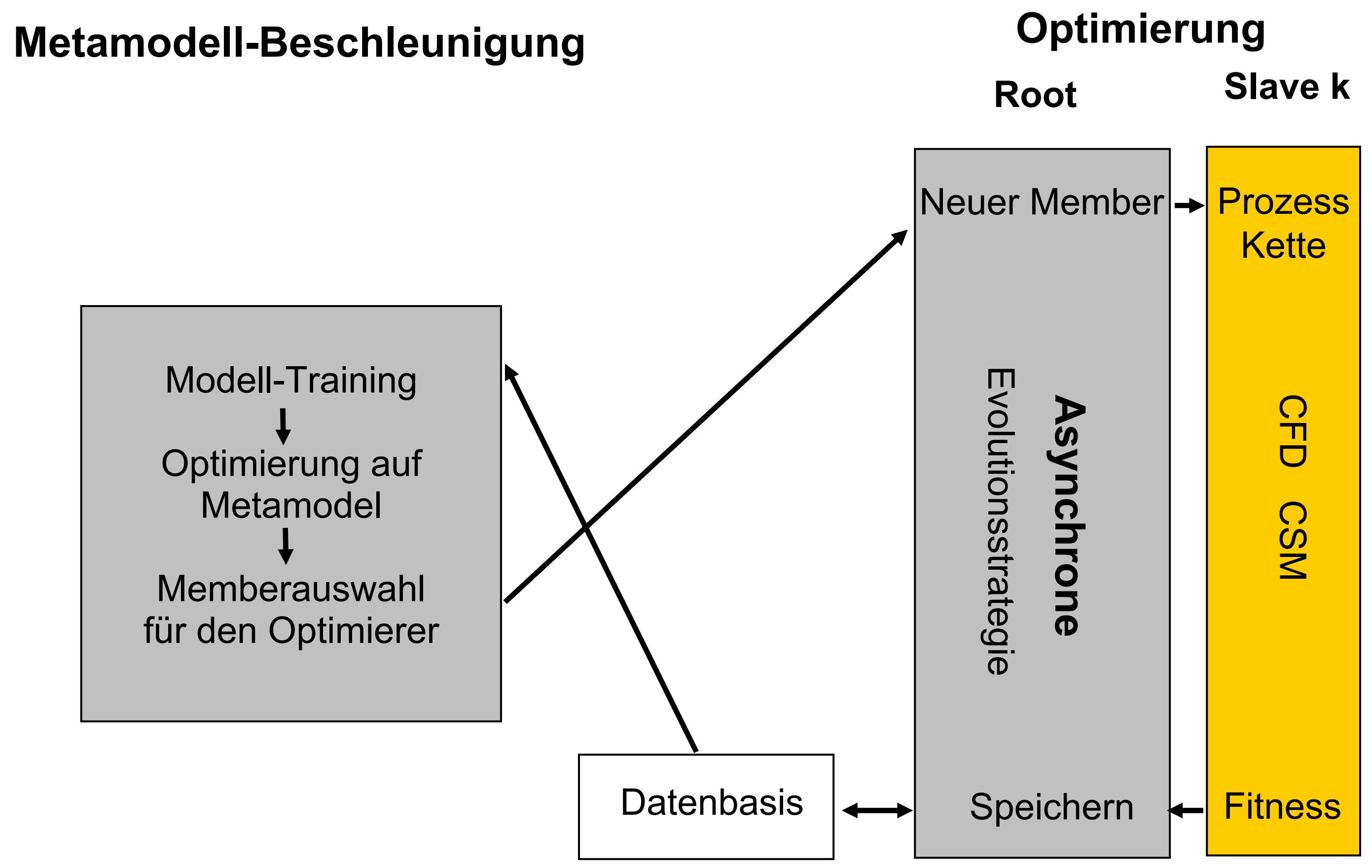
Turbomaschinen Beispiel Partner: Siemens PG

Wieso ist die Angabe *5<Anzahl Slaves<50* hier von Bedeutung?

→ Hier: Spezielle Implementierung von Exp Vol Gain

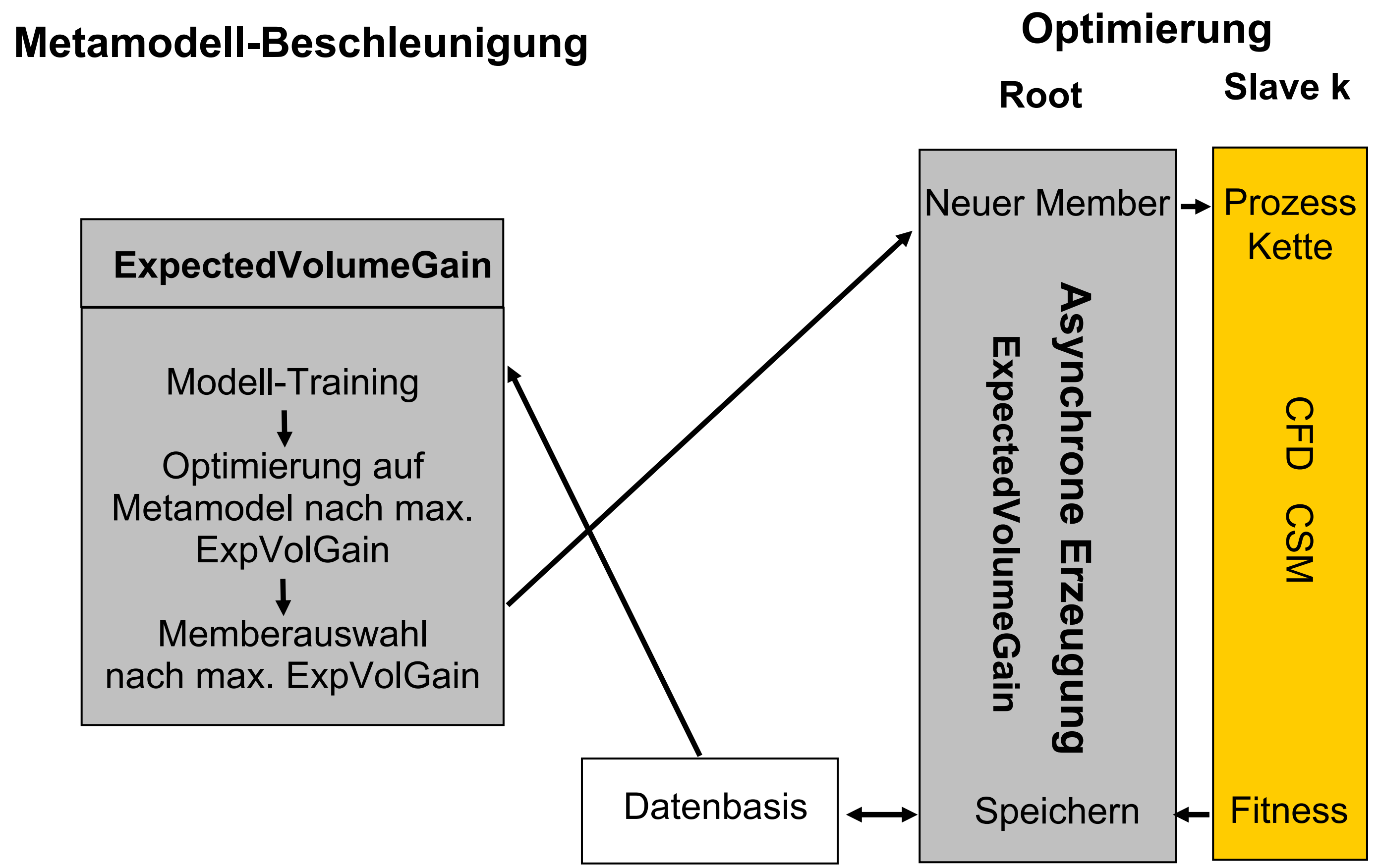


Turbomaschinen Beispiel Partner: Siemens PG



Turbomaschinen Beispiel Partner: Siemens PG

5<Anzahl Slaves<50

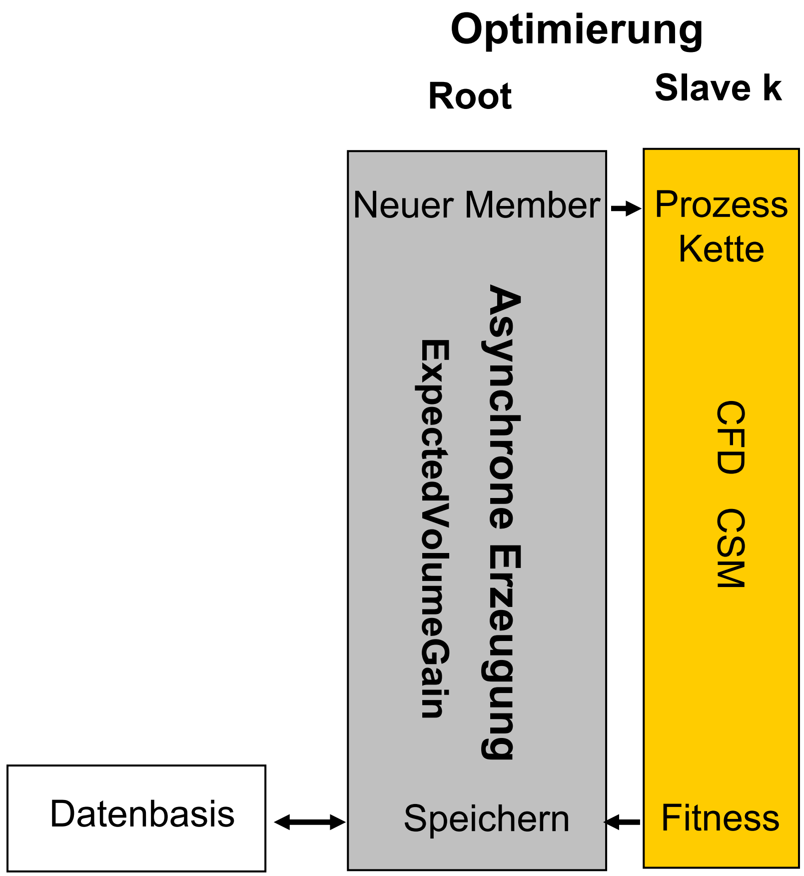


Turbomaschinen Beispiel Partner: Siemens PG

5<Anzahl Slaves<50

Implementierung ExpVolGain hier:

Erzeuge einen neuen Member so, daß die n noch rechnenden Slave-Member mit diesem zusammen das ExpVolGain gegenüber der aktuellen Paretofront maximieren.



Turbomaschinen Beispiel

Partner: Siemens PG

Optimiere Lauf_1 einer stationären Gasturbine

Rechengebiet: IGV-R1-S1

Simulationen pro Member:

2*TRACE

3*Calculix statisch dynamisch mit/ohne Aero Druckverteilung

5<Anzahl Slaves<50

#gespeicherte Simulationsgrößen=4261

#**freie Variablen= 81** (nur R1-Schaufelgeometrie retrofittable)

#Betriebspunkte=2 (ADP / pumpgrenznaher Punkt Teildrehzahl)

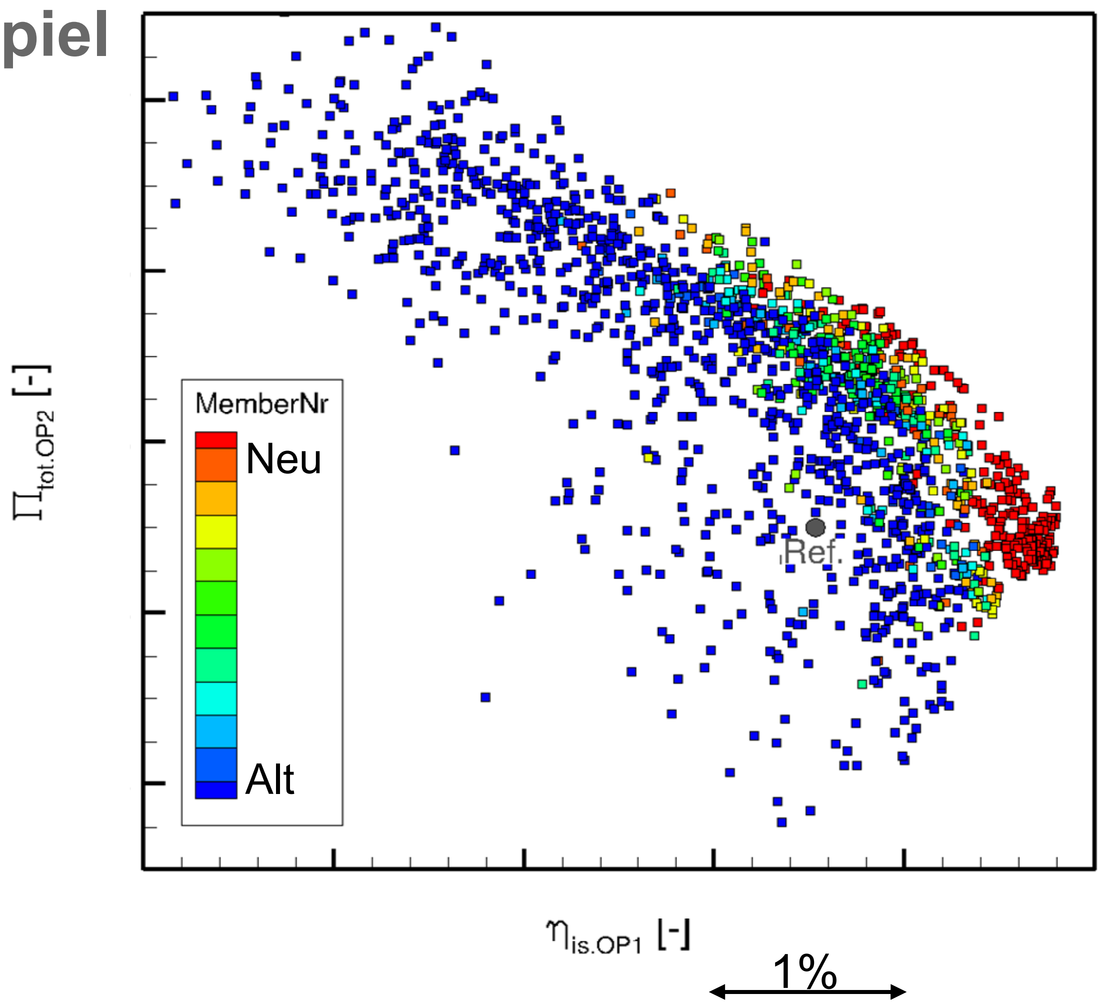
#**Zielfunktionen =2** (Wirkungsgrad Rotor ADP / Pumpgrenzkriterium)

#Nebenbedingungen CFD = 4 (ADP: massflow / eta / Pi-tot; OP2: eta)

#Nebenbedingungen CSM = 4 (vanMises / MagFaktor / Eigenfrqu. Mode1 +Mode2)

#Nebenbedingungen Geometrie = 1 (Sehnenlaenge Tipprofil)

Turbomaschinen Beispiel

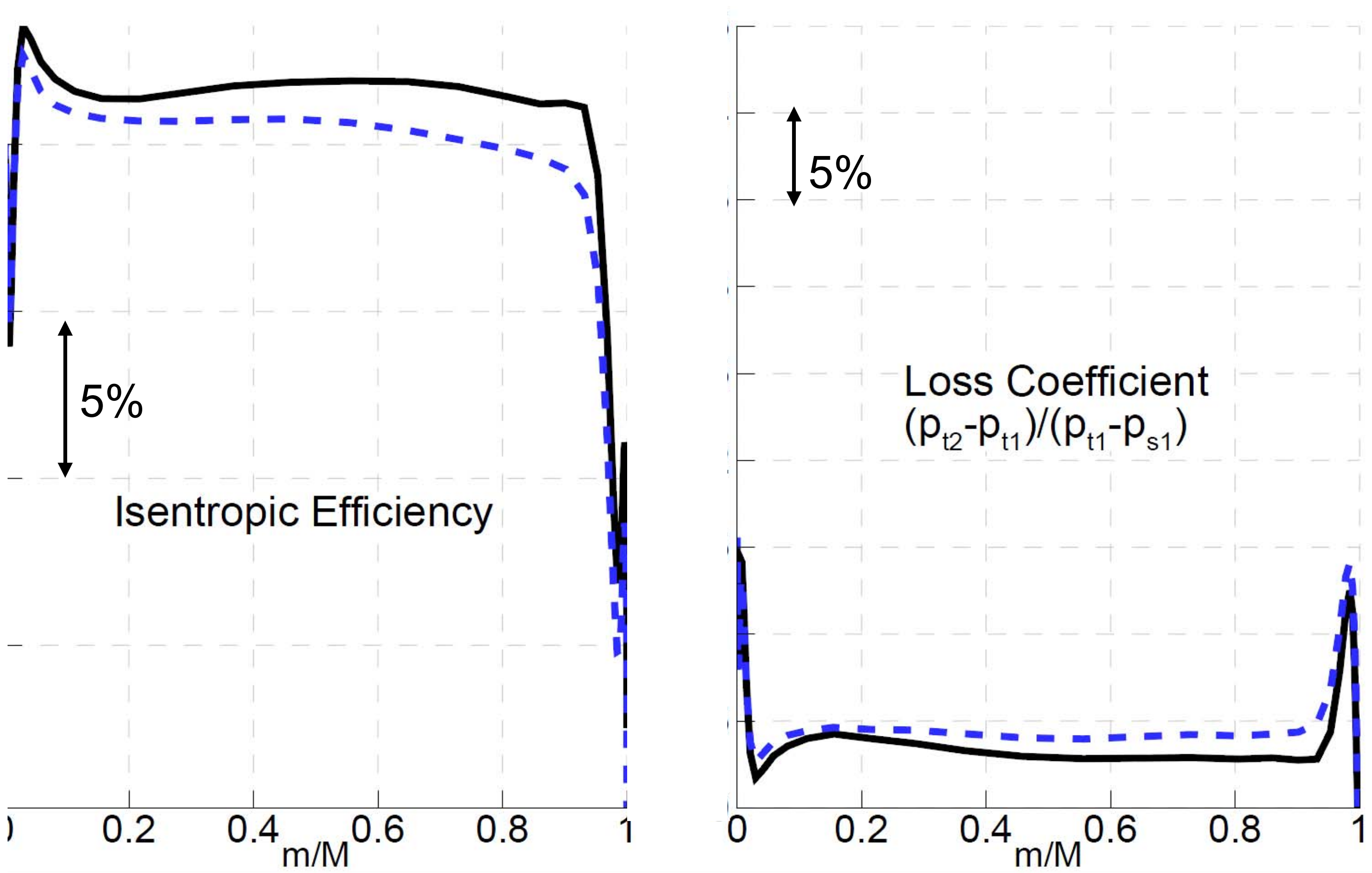


Anzahl konvergente Member ≈ 1500

Rechenzeit ≈ 5 Wochen

CPU-h ≈ 5(Wochen)*7*24*2(Knoten)*8(CPU's)*20(Slaves)=268800

Turbomaschine Beispiel: Radiale Verteilung R1 ADP



Ende