

Metaheurisztikus kereső algoritmusok hiperparamétereinek beállítása szimuláció alapú mérnöki optimalizálási feladatokra

Metaheuristic search algorithm hyperparameter tuning for simulation-based engineering optimization tasks

Dr. HURI Dávid¹, Dr. TRISOVIC Natasa², Dr. MAJOR Zoltán³, Dr. MANKOVITS Tamás¹

¹Debreceni Egyetem, Műszaki Kar, Gépészmérnöki Tanszék, 4028 Debrecen, Ótemető utca 2-4.,
huri.david@eng.unideb.hu, tamas.mankovits@eng.unideb.hu, <https://mecheng.unideb.hu/>

²University of Belgrade, Faculty of Mechanical Engineering, Department of Mechanics, 11120 Belgrade 35, Kraljice Marije 16, Szerbia, ntrisovic@mas.bg.ac.rs, <https://www.en.mas.bg.ac.rs/>

³Johannes Kepler University Linz, Institute of Polymer Product Engineering, 4040 Linz, Altenberger Str. 69, Ausztria, zoltan.major@jku.at, <https://www.jku.at/en/institut-of-polymer-product-engineering/>

Abstract

Regardless of how the objective function behaves, metaheuristic search techniques can be used to approach the optimal solution; however, task-specific hyperparameter selection is required. The computational cost of the simulation-based objective function evaluation makes it impossible to solve this process in time. Artificial intelligence tools can be used to increase automation and decrease the amount of time needed for engineering optimization tasks. The developed procedure can reduce uncertainty and increase the design cycle's efficiency, which together accelerate innovation.

Keywords: hyperparameter tuning, metaheuristic optimization algorithm, machine learning

Kivonat

A metaheurisztikus kereső eljárások a célfüggvény viselkedésétől függetlenül alkalmasak az optimum megközelítésére, azonban ehhez a hiperparamétereket feladat-specifikusan kell megválasztani. Ez a folyamat a szimuláció alapú célfüggvény költsége miatt belátható időn belül nem megoldható. A mérnöki optimalizálási feladat időszükségletének csökkentése és az automatizáltsági fokának növelése a mesterséges intelligencia eszközeinek alkalmazásával elérhető. Az így kidolgozott folyamattal a tervezési ciklus hatékonysága növelhető, míg bizonytalansága csökkenthető melyek együttes hatása az innováció felgyorsítása.

Kulcsszavak: hiperparaméter adaptálás, metaheurisztikus kereső eljárás, gépi tanulás

1. BEVEZETÉS

A vevői elvárások alapján a tervezőmérnököknek egyre bonyolultabb feladatokkal kell megküzdeniük, melyre a rendelkezésére álló idő és költség egyre kevesebb. Ezen követelmények teljesítése gyakran csak módszeres gépészeti tervezéssel és azokba integrált szimuláció alapú tervezési eljárásokkal lehetséges. Ha lehetőség van az iterációs folyamat automatizálására, a próbálgatáson „what if” alapuló gépészeti tervezési módszer helyett, optimalizáló algoritmus implementálásával lehet versenyképes maradni a piacon.

Az optimalizálási feladat felírása a tervezési változók, a célfüggvény és az optimalizálási kényszerek segítségével lehetséges. Ezek ismeretében továbbá a célfüggvény viselkedése alapján az optimalizálási probléma kategorizálható és a megoldására alkalmas szélsőérték kereső eljárások azonosíthatóak. Ezek közül a leghatékonyabb eljárás kiválasztása számos esetben nehéz feladat. A mérnöki tervezési problémák jelentős részében az optimalizálási feladat és annak célfüggvénye is változik. Így tehát könnyen előfordulhat, hogy a célfüggvény viselkedéséről (konvexitás, szélsőértékek száma, folytonosság, differenciálhatóság) kevés információ áll rendelkezésre és a tervezési folyamat automatizáltsága csak feladatfüggetlen, robosztus kereső eljárással biztosítható. Azonban egy jól kidolgozott eljárás esetén is az 1. ábrán látható hatékonyság, robosztusság és pontosság szempontok közül csak kettő elégíthető ki kellő mértékben.



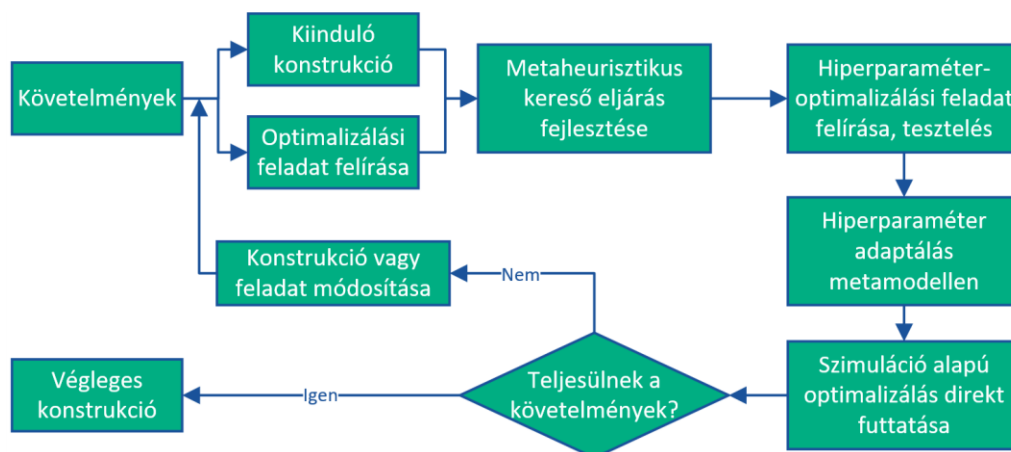
1. ábra. Az optimalizáló módszer kiválasztásának szempontjai

Ha a szimuláció futásideje hosszú, vagy a számítási kapacitás korlátozott, akkor kézenfekvő megoldás helyettesítő modell (metamodell, *surrogate model*) [1] alapú optimum kereső eljárást választani, melynek számítás költsége a választott kísérletterv függvénye, de mindenképpen kedvező. Azonban a szimulációs modellek hibáján túl így a helyettesítő modell becsléséből adódó bizonytalanságot is figyelembe kell venni az optimális kialakítás eredményének értékelése során.

Amennyiben pontosabb megoldást kívánunk garantálni a robusztusság megtartásával, akkor a magasabb függvényhívás számot igénylő, ezáltal kevésbé hatékony globális optimum kereső eljárásokat célszerű választani. Ide tartoznak a mesterséges intelligencia (MI, *Artificial Intelligence*, AI) módszerei közé tartozó természet ihlette metaheurisztikus optimalizáló algoritmusok [2], mint a genetikus algoritmus [3], a differenciális evolúció [4], vagy a szimulált hűtési eljárás (*simulated annealing*, SA) [5], melyek megfelelő beállítással garantálják a globális optimum egy kellően jó környezetének megközelítését. Azonban ezen algoritmusok számos hiperparamétert tartalmaznak, melyek megválasztása feladatspecifikus, ezért tapasztalati úton történik [6,7]. Jelen kutatás célja ennek az adaptálási folyamatnak a fejlesztése és ezáltal az algoritmusok hatékonyságának javítása.

2. OPTIMALIZÁLÓ ALGORITMUS HIPERPARAMÉTEREINEK HELYETTESÍTŐ MODELL ALAPÚ ADAPTÁLÁSA SZIMULÁCIÓ ALAPÚ CÉLFÜGGVÉNYEKRE

Célunk egy olyan új eljárás fejlesztése volt (2. ábra), mely alkalmas a metaheurisztikus szélsőérték kereső eljárások hiperparamétereinek adaptálására a mérnöki gyakorlatban előforduló szimuláció alapú optimalizálási feladatokra. Ezért a célfüggvényt helyettesítve a kisebb számításigénnyel hívható metamodellt alkalmazva végeztük el az algoritmus tesztelését és adaptálását.

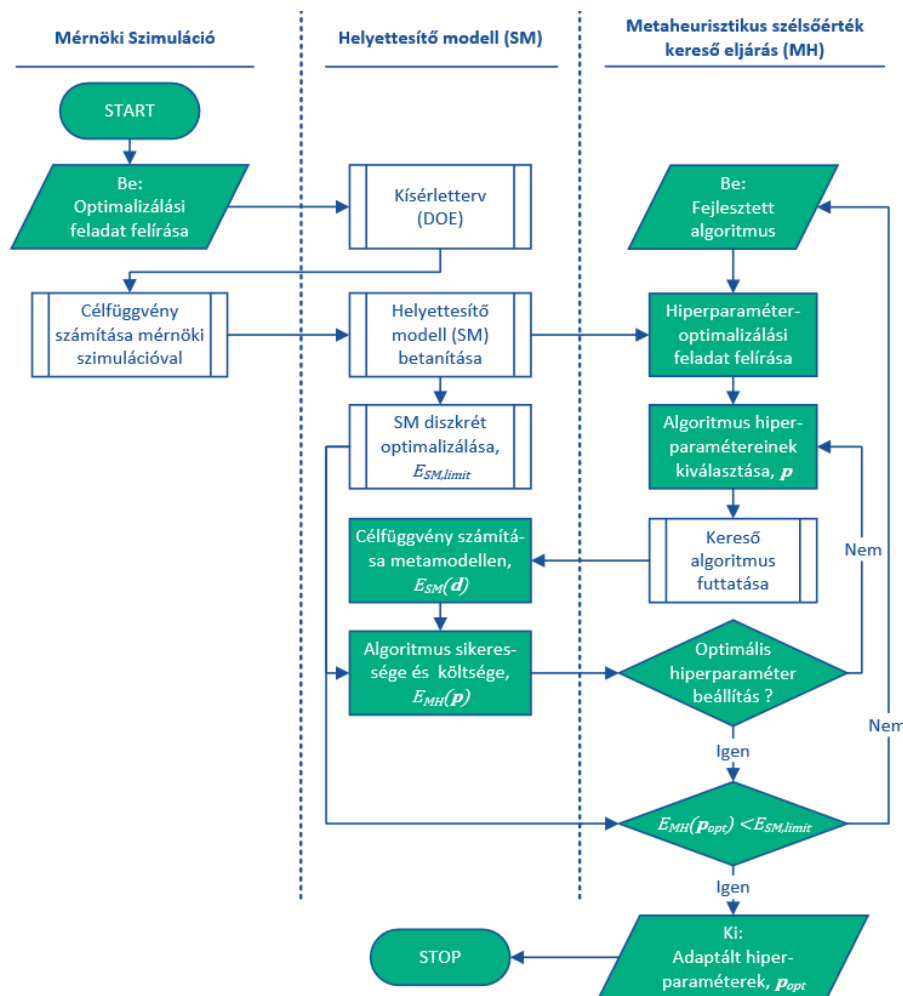


2. ábra. Mérnöki szimuláció alapú optimalizálási feladatok megoldása metaheurisztikus szélsőérték kereső eljárással, hiperparaméterek feladatspecifikus adaptálása

Az algoritmus hiperparamétereit feladatspecifikusan kell felvenni, hogy pontos és költséghatékony keresési eljárást kapjunk. Ennek a célnak a teljesítéséhez első lépésben egy olyan hiperparaméter-optimalizálási eljárást dolgoztunk ki az irodalmi és tapasztalati úton felvett diszkrét hiperparaméter értékekre, mely kellően robusztus ahhoz, hogy akár tetszőleges optimalizálási problémára képes legyen az SA algoritmus hiperparaméterezését meghatározni. Az eljárás alapgondolata, hogy a fizikai jelenségek

modellezésének szimulációjával meghatározott célfüggvények általában polinomokkal közelíthető viselkedést mutatnak. Ezen célfüggvényekre a tapasztalatok alapján az elnyúló völgy és/vagy több lokális minimum érték előfordulása a leginkább jellemző tulajdonság. Ezért az algoritmus működésének és hiperparaméter-optimalizálási feladatának tesztelésére az említett tulajdonságokkal rendelkező a globális optimum megtalálása szempontjából kihívást jelentő *Rosenbrock*, *Six-hump camel*, *McCormick* és *Michalewicz* matematikai tesztfüggvények [8] megfelelő választásnak bizonyultak. Az eredmények alapján a diszkrét hiperparaméterek közül az SA algoritmus adaptálható a vizsgált matematikai tesztfüggvények szélsőérték keresési feladatára, mellyel biztosítható annak beállíthatósága a szimuláció alapú mérnöki optimalizálási feladatra is [9].

A fejlesztett helyettesítő modell alapú hiperparaméter adaptáló eljárás kivitelezése három részre osztható a 3. ábra alapján, melyek közül az első a paraméterezett mérnöki szimuláció alapú feladat automatizált elő- és utófeldolgozása. A folyamatba való integrálhatóság miatt ebben a lépésben általában szükség van a parancsokat a szoftver utasításkészletéhez hozzáférő külső program által kétirányú kommunikációval vezérelve kialakítani.



2. ábra. A szimuláció alapú optimalizálási feladat kereső algoritmusának helyettesítő modell alapú hiperparaméter adaptálása

A folyamat következő lépése a szimuláció alapú célfüggvény helyettesítése egy az optimalizálási feladat változóinak számától és a fizikai probléma viselkedésének összetettségétől függetlenül alkalmazható metamodellel. Erre megoldás az MI módszerei közé tartozó gépi tanuló (*Machine Learning*, ML) eljárás [10,11] mint például a tartóvektor gép (*Support Vector Regression*, SVR) [12], vagy a neurális hálózat [13]. Ehhez elsőként a tanításhoz szükséges adathalmaz generálására van szükség, mely történhet különböző statisztikai mintavételezéseken alapuló kísérletterv (*Design of Experiment*, DoE) [14] segítségével.

A folyamat utolsó része a matematikai tesztfüggvényeken fejlesztett hiperparaméter optimalizálási eljárás futtatása a szimulációs feladat metamodelljén. Egy beállítás akkor tekinthető sikeresnek, ha a helyettesítő modellen futtatott diszkrét optimalizálás által megtalált szélsőértéknél kisebbben áll le az

algoritmus és teljesíti a konvergencia feltételeket. Így feladat-specifikusan van lehetőség beállítani a metaheurisztikus kereső eljárás hiperparamétereit a helyettesítő modell optimumának keresési feladatán. A betanítás előtt súlyozással van lehetőség az algoritmus sikerességét, vagy a konvergenciához szükséges függvényhívások számát előnyben részesíteni.

3. KÖVETKEZTETÉSEK

A helyettesítő modellen adaptált hiperparaméterekkel a metaheurisztikus kereső eljárás sikeresen futtatható közvetlenül a szimulációval meghatározott célfüggvényt tartalmazó optimalizálási feladaton. Az algoritmus beállítása a metamodellen nagyságrendekkel kevesebb időt igényel, mint a szimuláció direkt futtatásával. Az eljárás további előnye, hogy az optimalizálási folyamatot időben tervezhetővé teszi az algoritmus konvergenciájához szükséges függvényhívások becslésével. A fejlesztett eljárás a mérnöki szimuláció alapú optimalizálási feladatokat nagy pontossággal, magas automatizáltsági fokkal és időben tervezhető módon képes megoldani, mely támogatja annak termékfejlesztési folyamatba történő integrálhatóságát. A folyamat lehetőséget ad globális és lokális kereső eljárások hatékony kombinálására.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

A kutatást részben az OMAA 117öu9 - Experimentelle und numerische Untersuchung maßgeschneiderter, zellulärer Implantate, hergestellt mit AMTechnologie (DE-JKU), valamint részben a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal 2023-1.2.4-TÉT-2023-00114 - 3D nyomtatással gyártott cellás szerkezetű titán implantátum szerkezetoptimalizálása mesterséges intelligencia segítségével c. projektek támogatták.

HIVATKOZÁSOK

- [1] Forrester, A.I.J.; Sóbester, A.; Keane, A.J. *Engineering Design via Surrogate Modelling*; Wiley: Oxford, UK, 2008; ISBN 9780470060681.
- [2] Chopard, B.; Tomassini, M. *An Introduction to Metaheuristics for Optimization*; Natural Computing Series; Springer International Publishing: Cham, 2018; ISBN 978-3-319-93072-5.
- [3] David E. Goldberg *Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*; Addison-Wesley Longman Publishing Co., Inc.: Boston, MA, USA, 1989; ISBN 0201157675.
- [4] Das, S.; Suganthan, P.N. Differential Evolution: A Survey of the State-of-the-Art. *IEEE Trans. Evol. Comput.* 2011, 15, 4–31, doi:10.1109/TEVC.2010.2059031.
- [5] Kirkpatrick, S.; Gelatt, C.D.; Vecchi, M.P. Optimization by Simulated Annealing. *Science* (80-.). 1983, 220, 671–680, doi:10.1126/science.220.4598.671.
- [6] Jackson, W.G.; Ozcan, E.; John, R.I. Tuning a Simulated Annealing Metaheuristic for Cross-Domain Search. In Proceedings of the 2017 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC); IEEE, June 2017; pp. 1055–1062.
- [7] Fotuhi, F. Optimal Determination of Simulated Annealing Parameters Using TOPSIS. In Proceedings of the 2011 IEEE International Conference on Industrial Engineering and Engineering Management; IEEE, December 2011; pp. 46–50.
- [8] Surjanovic, S.; Bingham, D. Optimization Test Functions and Datasets Available online: <https://www.sfu.ca/~ssurjano/optimization.html> (Utolsó letöltés: 2025.01.17).
- [9] Huri, D.; Mankovits, T. Surrogate Model-Based Parameter Tuning of Simulated Annealing Algorithm for the Shape Optimization of Automotive Rubber Bumpers. *Appl. Sci.* 2022, 12, 5451, doi:10.3390/app12115451.
- [10] Burkov, A. *The Hundred-Page Machine Learning Book*; 2019; ISBN 9781999579500.
- [11] Kubat, M. *An Introduction to Machine Learning*; Springer International Publishing: Cham, 2017; ISBN 978-3-319-63912-3.
- [12] Drucker, H.; Burges, C.J.C.; Kaufman, L.; Smola, A.; Vapnik, V. Support Vector Regression Machines. In Proceedings of the Advances in neural information processing systems; MIT Press: Cambridge, 1997; pp. 155–161.
- [13] Neapolitan, R.E.; Jiang, X. Neural Networks and Deep Learning. In *Artificial Intelligence*; Chapman and Hall/CRC, 2018; pp. 389–411 ISBN 9783319944623.
- [14] Hinkelmann, K. *Design and Analysis of Experiments*; Hinkelmann, K., Ed.; Wiley Series in Probability and Statistics; John Wiley & Sons, Inc.: Hoboken, NJ, USA, 2012; Vol. 3; ISBN 9781118147634.