Institut für Technische Produktentwicklung

Design for X

Beiträge zum 26. DfX-Symposium
Oktober 2015

Dieter Krause
Kristin Paetzold
Sandro Wartzack
(Hrsg.)

The Design Society is a charitable body,
registered in Scotland, number SC 031694

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über http://www.dnb.de/kataloge abrufbar.

Impressum

TuTech Verlag
TuTech Innovation GmbH
Harburger Schloßstr. 6-12
21079 Hamburg
Tel.: +49 40 76629-0
E-Mail: verlag@tutech.de
www.tutechverlag.de

Nachdruck, Vervielfältigung, Speicherung oder Übertragung in elektronische, optische, chemische oder mechanische Datenhaltungs- oder -verwertungssysteme sind -auch auszugsweise- ohne ausdrückliche schriftliche Genehmigung von TuTech Innovation GmbH verboten.

Die Verwertung von Informationen aus *Design for X | Beiträge zum 26. DfX-Symposium* zum Zweck der gewerblichen Informationsvermittlung ist nicht zulässig.

Alle Rechte vorbehalten.
© TuTech Innovation GmbH, Hamburg, 2015

ISBN 978-3-941492-93-6

Methodik zur Validierung, Verifikation und Auswahl mathematischer Metamodelle im Rahmen der virtuellen Produktentwicklung

Tobias C. Spruegel, Sandro Wartzack
Lehrstuhl für Konstruktionstechnik KTmfk;
Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg

Abstract

Product developers need to describe relations between input and output parameters mathematically. This central problem varies in many ways and starts from the description of measurement data and ends with the integration of results from numerical simulations in downstream simulations of similar problems. Therefor meta-models or surrogate models are used. In this publication a methodology for validation, verification and selection of proper meta-models within the virtual product development is presented.

Keywords: meta-model; surrogate model; goodness-of-fit parameter; plausibility-check

1 Motivation

Aktuell verfügbare FE Programme werden immer anwendungsfreundlicher und verfügen über immer weitreichendere Fähigkeiten zur Absicherung von Produkteigenschaften [1]. Da erfahrene Simulationsexperten im industriellen Umfeld sehr stark ausgelastet bzw. überhaupt nicht verfügbar sind, werden FE-Simulationen zunehmend von anderen Benutzergruppen, wie etwa Konstrukteuren, durchgeführt. [9] Vor diesem Hintergrund ist es essentiell dem

Produktentwickler, der konstruktionsbegleitende FE-Simulationen erstellt, den breiten Erfahrungsschatz der spezialisierten Berechnungsabteilungen, bereits in den frühen Phasen der Produktentwicklung geeignet bereit zu stellen. Daher wird im BFS-Forschungsverbund FORPRO² (Effiziente Produkt- und Prozessentwicklung durch wissensbasierte Simulation) ein wissensbasiertes FEA-Assistenzsystem entwickelt, welches sowohl beim Aufbau, der Durchführung und bei der Auswertung von strukturmechanischen FE-Simulationen unterstützt. Zentrale Bausteine des Analyseteils des Assistenzsystems sind ein wissensbasierter Fehlerassistent und die Plausibilitätsprüfung für strukturmechanische FE-Berechnungen. Für Plausibilitätsprüfungen können im beschränkten Maß analytische Gleichungen zur Anwendung angebracht werden, allerdings eignen sich analytische Gleichungen für viele industrielle Anwendungen nur in beschränktem Umfang, da die so ermittelten Vergleichswerte starken Schwankungen unterworfen sind. Daher muss auf andere Methoden zur Abbildung von bereits bestehenden Simulationsergebnissen oder Versuchsdaten im Unternehmen zurückgegriffen werden [9]. Das Vorgehen zur Nutzung vorliegender Daten und die Überführung in geeignete Metamodelle für spätere Plausibilitätsprüfungen ist in Bild 1 zu erkennen.

Zunächst werden mit einem Pool von bestehenden Simulationsergebnissen (bestehend aus Eingangsgrößen mit dazugehörigen Ergebnisgrößen) Metamodelle erzeugt. Diese können dann genutzt werden um für die Eingangsdaten einer neuen Simulation eine Prognose der Ergebnisgrößen zu berechnen. Diese prognostizierten Größen können mit den Ergebnissen aus einer neuen FE-Berechnung verglichen werden. So kann direkt eine Überprüfung der Ergebnisse auf Plausibilität erreicht werden.

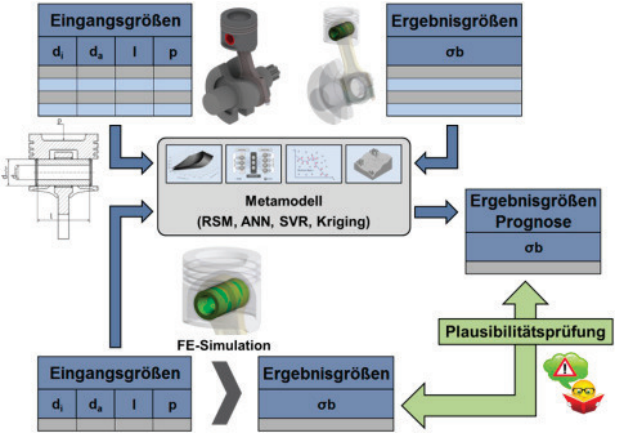

Bild 1: Plausibilitätsprüfung für FE-Simulationen mit Metamodellen

Bei genauerer Betrachtung ergeben sich einige Schwierigkeiten die Beachtung finden müssen:

- Welche Metamodellart (Response Surface Methodology RSM, Künstliche Neuronale Netze KNN, Support Vector Regression SVR, Kriging Methodology) soll gewählt werden?
- Welche Einstellungen sind bei den einzelnen Metamodellen zu wählen?
- Wie kann ein Metamodell mit hoher Qualität erzeugt werden?
- Wie kann die Qualität eines erzeugten Metamodells bewertet werden?

Im Rahmen dieser Veröffentlichung wird eine Methodik bereitstellt, welche das Ziel verfolgt ein sehr gutes Metamodell mit hoher Prognosequalität für eine gegebene Problemstellung der virtuellen Produktentwicklung zu erhalten. Zunächst wird auf das prinzipielle Vorgehen zur Anwendung von Metamodellen eingegangen und anschließend die Methodik zur Validierung, Verifikation und Auswahl mathematischer Metamodelle vorgestellt. Die Methodik wird schließlich auf den Demonstrator einer Bolzenverbindung angewendet und die Ergebnisse diskutiert.

2 Verwendung von mathematischen Metamodellen

Bei der Verwendung von mathematischen Metamodellen in der Produktentwicklung werden, wie in Bild 2 dargestellt, vier Schritte durchlaufen [10]:

1. Validierung
   Unter Validierung bei Metamodellen werden verschiedene Verfahren bezeichnet, die dazu dienen vorliegende Matrizen der Eingangs- und Ausgangsdaten in getrennte Matrizen für die weiteren Schritte Training und Testen zu teilen [2, 7]. Typische Validierungsverfahren sind die k-fold-cross Validierung, die Splitvalidierung oder die Repeated Random Sub-Sampling Methode.

2. Training
   Das Training beschreibt die eigentliche Generierung des Metamodells. Bei der Response Surface Methode sind diverse Regressionskoeffizienten zu bestimmen um einen Zusammenhang zwischen den Eingangs- und Ausgangsdaten herzustellen [5]. Mit Abschluss des Trainings liegt ein Metamodell vor, welches zur Berechnung von unbekannten Ausgangsgrößen für vorgegeben Eingangsgrößen verwendet werden kann. Allerdings ist

keine Aussage darüber möglich, ob es sich um ein Modell hoher oder niedriger Prognosegüte handelt.

3. Testen
   Zur Bestimmung der Prognosegüte werden Eingangsgrößen an das Metamodell übergeben, deren tatsächliche Ausgangsgrößen bereits bekannt sind. So kann in einem weiteren Schritt die Ausgangsgröße des Metamodells mit dem tatsächlich zu erwartenden Ergebnis verglichen werden. Ein sehr gutes Metamodell zeichnet sich dadurch aus, dass keine Diskrepanz zwischen den beiden Ausgangsdatensätzen besteht. Je größer die Unterschiede werden, desto schlechter ist das generierte Metamodell zu bewerten [9]. Zur Ermittlung der Prognosequalität können zahlreiche Kennwerte verwendet werden, dies sind z. B. der Coefficient of Prognosis [6], der Coefficient of Determination oder der mittlere quadratische Fehler.

4. Anwendung
   Nach der Generierung eines Metamodells mit ausreichend hoher Prognosegüte kann dieses für bisher unbekannte Eingangsgrößen die zugehörigen Ausgangsgrößen berechnen. Dies ist eine sehr komfortable Methode, wenn die Ermittlung der zugehörigen Ausgangsgrößen durch Simulationen oder reale Versuche sehr aufwändig ist.

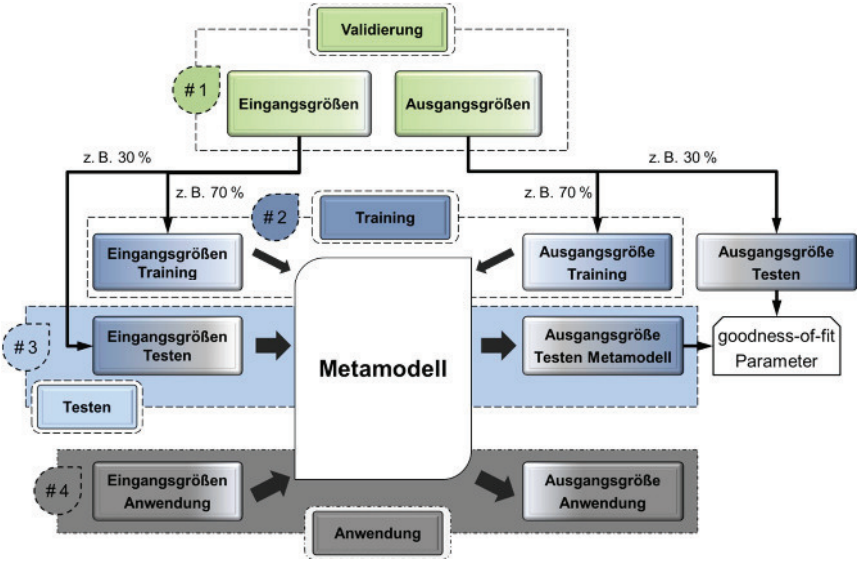

Bild 2: Vorgehen zur Validierung, Training, Testen und Anwendung von Metamodellen

3 Methodik zur Validierung, Verifikation und Auswahl mathematischer Metamodelle

Gemäß dem beschriebenen Vorgehen zur Verwendung von Metamodellen ist der erste Schritt in der Festlegung der geeigneten Validierungsstrategie zu sehen. Da im nächsten Schritt des Trainings zahlreiche Einstellungen für jedes individuelle Metamodell notwendig werden und diese Auswahl der richtigen Konfiguration essentiell für die spätere Prognosequalität des erzeugten Modells ist wird ein zweistufiges Validierungsverfahren vorgestellt. Im ersten Schritt werden die notwendigen Einstellungen des Metamodells bestimmt und dann im zweiten Schritt eine zielführende Validierungsstrategie für die zuvor ermittelten Einstellungen gesucht. In Bild 3 ist das Vorgehen für die Auswahl eines Response Surface Methodology Metamodells mit den beiden Validierungsschritten I und II gezeigt.

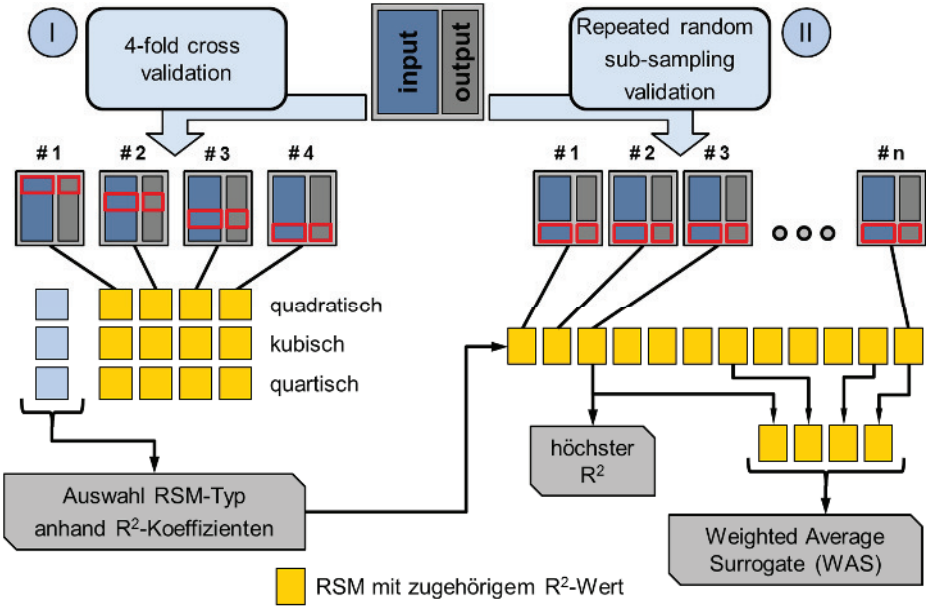

Bild 3: Methodik zur Validierung, Verifikation und Auswahl mathematischer Metamodelle

Im ersten Validierungsschritt erfolgt eine 4-fold cross Validierung, hierfür wird der gesamte Datensatz in 4 Datensätze aufgeteilt, so dass jeder Datenpunkt einmal zum Testen und dreimal zum Training verwendet wird. Es ergeben sich die im Bild 3 dargestellten Matrizen # 1 bis # 4. Um den geeigneten

RSM Typ zu ermitteln wird mit jedem Matrizensatz einmal eine quadratische, kubische und quartische RSM berechnet. Wie in Bild 3 dargestellt kann für jedes trainierte Metamodell mit den Testdaten eine Prognosequalität durch goodness-of-fit Parameter berechnet werden. Somit ergeben sich in Schritt I zwölf trainierte RSM Modelle mit den zugehörigen zwölf R^2-Werten (Coefficient of Determination). Nach der Bildung des Mittelwertes für jeden RSM Typ erfolgt die Auswahl des am besten geeigneten Modells. In der Regel sind die Unterschiede der Mittelwerte der einzelnen RSM Typen erheblich und es kann eine eindeutige Auswahl getroffen werden. Weiterhin unklar ist, welches der vier generierten Modelle mit dem besten Durchschnitt gewählt werden sollte und ob durch statistische Einflüsse die Aufteilung in Trainings- und Testdaten bereits sehr gut erfolgt ist. Diese Unklarheiten werden durch den zweiten Schritt der Methodik abgedeckt. Das Ergebnis aus Schritt I sind die Metamodell-Einstellungen, die getroffen werden sollten um gute Modelle zu erhalten und den Umfang an Berechnungen in Schritt II zu reduzieren.

Im zweiten Validierungsschritt erfolgte eine zufällige Aufteilung des vorliegenden Datensatzes in Trainings- und Testdaten mittels des Repeated Random Sub-Sampling Verfahren. Um statistische Einflüsse bei der Aufteilung des Datensatzes auszuschließen werden n Wiederholungen dieser Teilung vollzogen. Hierbei entspricht n der Anzahl an Samples im vorliegenden Datensatz. Für jede der dargestellten Matrizen # 1 bis # n wird ein Metamodelle mit dem zugehörigen R^2-Wert berechnet. Anschließend muss entschieden werden, welches der generierten Modelle für die weiteren Schritte verwendet werden sollte. Hierfür gibt es unterschiedliche Ansätze in der Literatur:

1. Metamodellauswahl anhand dem besten goodness-of-fit Parameter [11, 10]:

   Hierbei ist bekannt welche Prognosequalität das gewählte Modell besitzt, allerdings besteht eine erhöhte Wahrscheinlichkeit ein Modell zu wählen welches zufällig für den Testdatensatz sehr gut geeignet ist. Daher sollte stets der Mittelwert aller trainierten Modelle und deren Standardabweichung in der Bewertung des gewählten Metamodell mit berücksichtigt werden.

2. Erneutes Training eines Metamodells und Festlegung der Prognosequalität als höher als der zuvor bestimmte Mittelwert aller trainierten Modelle:

   Der Vorteil dieses Verfahrens ist darin zu sehen, dass ein Modell welches mit mehr Daten als ein anderes Modell trainiert wurde in der Regel eine höhere Prognosequalität aufweist. Da keine Testdaten mehr vorhanden

sind kann für das neue Modell keine exakte Güte bestimmt werden und es kann somit nicht nachgewiesen werden, dass das Metamodell tatsächliche eine höhere Prognosegüte besitzt.

3. Kombination von den besten Metamodellen mittels des Weighted Average Surrogate Verfahrens (WAS) [3, 8]:

   Der Vorteil dieses Verfahrens besteht darin mehrere Metamodelle zu koppeln und so einen deutlich besseren Zusammenhang zwischen den Eingangsgrößen und den Ausgangsgrößen zu erhalten. Bei der Verwendung des WAS Verfahrens in Verbindung mit Antwortflächen (Response Surfaces) steigt der Aufwand bei der Anwendung der Metamodelle nicht an. Bei anderen Metamodellen (z. B. Neuronale Netze) müssen für das Verfahren mehrere Netze angewendet werden und es erfolgt eine gewichtete Zusammensetzung der Ausgangsgrößen dieser Modelle. Somit müssen für die Berechnung einer Ausgangsgröße mehrere Modelle berechnet werden. Dies ist zwangsweise mit höheren Berechnungszeiten verbunden.

Für die Methodik zur Validierung, Verifikation und Auswahl mathematischer Metamodelle im Rahmen der virtuellen Produktentwicklung wird neben dem WAS Verfahren auch die Auswahl des Modells mit der höchsten Prognosequalität verwendet.

4 Umsetzung der Methodik und Verifikation

Als Demonstrator für die Umsetzung des Konzepts wird eine Bolzenverbindung nach Einbaufall 1 [4] wie in Bild 4 dargestellt gewählt. Neben den geometrischen Größen des Durchmessers der Bolzenverbindung d und der Bolzenlänge l wird die Belastung F und der Anwendungsfaktor K_A als variierende Eingangsgrößen definiert. Die Zielgröße ist die Biegespannung im Bolzen σ_b.

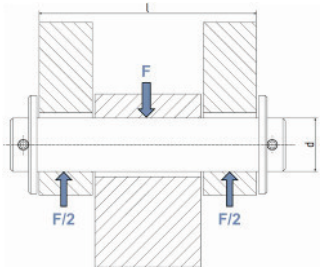

Bild 4: Demonstrator Bolzenverbindung nach Einbaufall 1 nach [4]

Als Initialdatensatz werden 1.500 Kombinationen/Samples aus variierenden Eingangsdaten und der zugehörigen Zielgröße erstellt und dann nach der zuvor beschriebenen Vorgehensweise zur Validierung, Verifikation und Auswahl mathematischer Metamodelle im Rahmen der virtuellen Produktentwicklung verarbeitet. Das Vorgehen mit den berechneten Werten für den Coefficient of Determination R^2 können Bild 5 entnommen werden. Das Ergebnis des ersten Validierungsschrittes zeigt, dass für das weitere Vorgehen eine quartische RSM verwendet werden sollte. Nach dem zweiten Validierungsschritt stehen zwei unterschiedliche Validierungsmodelle zur Verfügung. Das erste Modell weißt für die Testdaten den höchsten R^2-Wert auf und das zweite Modell wird über das WAS-Verfahren aus den zehn Modellen mit dem höchsten R^2-Wert gebildet.

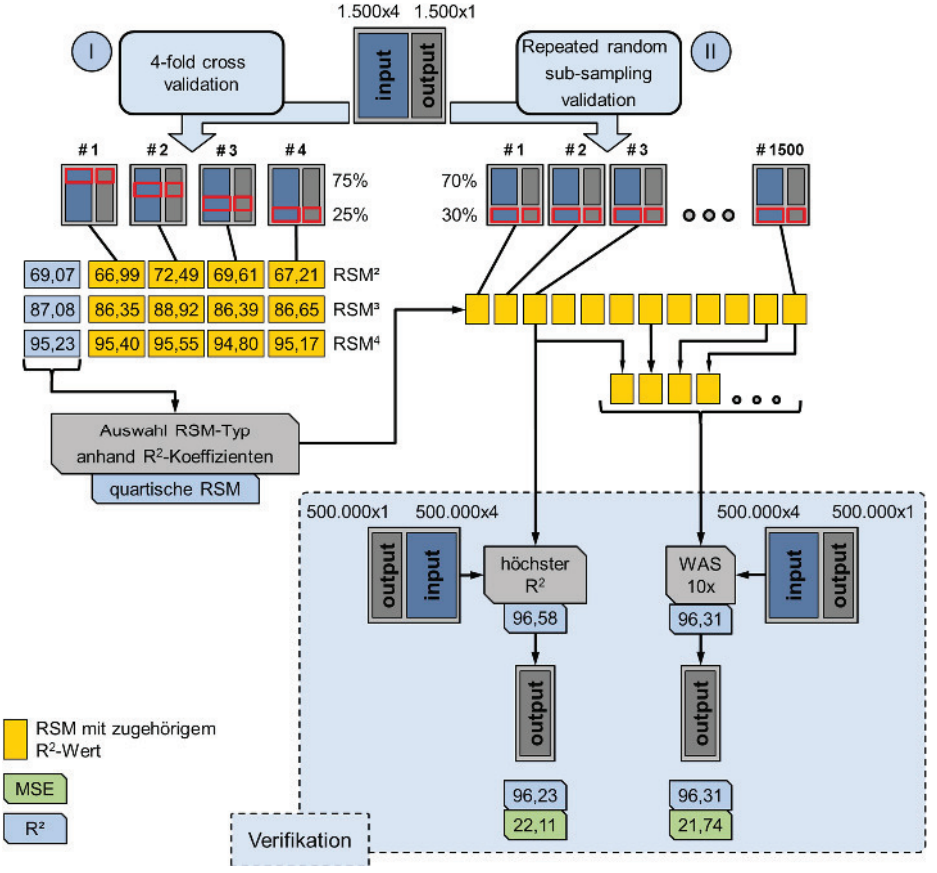

Bild 5: Anwendung der beschriebenen Methodik an einer Bolzenverbindung

Um festzustellen welches der beiden Modelle gewählt werden sollte wird in einem letzten Verifikationsschritt der Formelzusammenhang in einem Verifikationsdatensatz mit 500.000 Samples herangezogen. Durch die Verifikation soll überprüft werden inwiefern die Intension durch die Methodik softwareseitig umgesetzt werden kann. Es zeigt sich, dass der Ansatz mittels WAS-Verfahren geringfügig bessere Ergebnisse als der Ansatz der Auswahl des besten Metamodells nach errechnetem R^2-Wert liefert. Um Einflüsse des goodness-of-fit Parameters R^2 auszuschließen wird ebenfalls der Mean-Squared-Error berechnet. Da ein Modell umso besser ist je geringer das berechnete Fehlermaß ist, empfiehlt sich nach dieser Berechnung ebenfalls das WAS-Verfahren zur Auswahl eines geeigneten Metamodells für die weitere Anwendung in der virtuellen Produktentwicklung.

5 Resümee

Durch die Methodik zur Validierung, Verifikation und Auswahl mathematischer Metamodelle im Rahmen der virtuellen Produktentwicklung wird ein Vorgehen bereitgestellt mit dem zielführend für bestehende Datensätze ein Metamodell mit hoher Prognosequalität berechnet werden kann. Insbesondere das Weighted-Average-Surrogate Verfahren hat sich als zielführend erwiesen um ein Prognosemodell mit hoher Güte zu berechnen. Nach der Beschreibung der Methodik wurde diese erfolgreich am Demonstrator einer Bolzenverbindung zur Anwendung gebracht und erzielte vielversprechende Ergebnisse. Weitere Anwendungsgebiete für die mit dem Verfahren generierten Metamodelle sind beispielsweise FE-Plausibilitätsprüfungen um weniger erfahrene Simulationsanwender zu unterstützen und fehlerhafte, nicht plausible, FE-Simulationen zu erkennen.

Literatur

[1] Aberdeen Group: "Unlocking Product Innovation with Virtual Prototypes", Research Brief January, 2012.

[2] Box, G.E.P.; Draper, N.R.: "Response Surfaces, Mixtures, and Ridge Analyses", John Wiley & Sons, Hoboken, 2007.

[3] Goel, T.; Haftka, R. T.; Shyy, W.; Queipo, N. V.: "Ensemble of surrogates", Structural and Multidisciplinary Optimization, 2007, 33. Jg., Nr. 3, S. 199-216.

[4] Matek, W.; Roloff, H.: "Roloff/Matek Maschinenelemente", Vieweg, Wiesbaden, 2013.

[5] Khuri, A. I.; Mukhopadhyay, S.: "Response surface methodology". Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Statistics, 2010, 2. Jg., Nr. 2, S. 128-149.

[6] Most, T.; Will, J.: "Meta-model of Optimal Prognosis – An automatic approach for variable reduction and optimal meta-model selection", Optimization and Stochastic Days 5.0, Weimar Germany, 20-21 November 2008.

[7] Prekopcsak, Z.; Henk, T.; Gaspar-Papanek, C.: "Cross-validation: the illusion of reliable performance estimation", Proceedings of RCOMM RapidMiner Community Meeting And Conference, Dortmund, 2010.

[8] Ryberg, A.B.: "Metamodel-Based Design Optimization – A Multidisciplinary Approach for Automotive Structures", Dissertation, Linköping University, 2013.

[9] Spruegel, T.C.; Hallmann, M.; Wartzack, S.: "A Concept for FE Plausibility Checks in Structural Mechanics", NAFEMS World Congress, San Diego, 2015.

[10] Walter, M.; Spruegel, T.; Wartzack, S.: "Tolerance analysis of mechanism taking into account the interactions between deviations using meta-models", Proceedings of the 9th Norddesign Conference, 22.-24. August 2012 Aalborg, Dänemark, S. 587-594.

[11] Walter, M.; Spruegel, T.; Wartzack, S.: "Tolerance analysis of systems in motion taking into account interactions between deviations", Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part B: Journal of Engineering Manufacture 207 5, S. 709-719, 2013.

[12] Witten, I. H.; Frank, E.; Hall, M. A.: "Data Mining: Practical Machine Learning Tools and Techniques", Elsevier/Morgan Kaufmann, Amsterdam, 2011.

Das hier vorgestellte Vorgehen ist Bestandteil des BFS Forschungsverbunds FORPRO² „Effiziente Produkt- und Prozessentwicklung durch wissensbasierte Simulation“ (AZ 1071-13). Die Autoren danken der Bayerischen Forschungsstiftung BFS und den Industriepartnern ANSYS Germany, B&W Software und Federal-Mogul Nürnberg für die finanzielle Unterstützung.