

Vorlesungsreihe „Diskrete Simulation“ (Masterkurs)

Experimentdurchführung und Optimierung mit diskreten Simulationssystemen

Prof. Dr.-Ing. Thomas Wiedemann
email: wiedem@informatik.htw-dresden.de

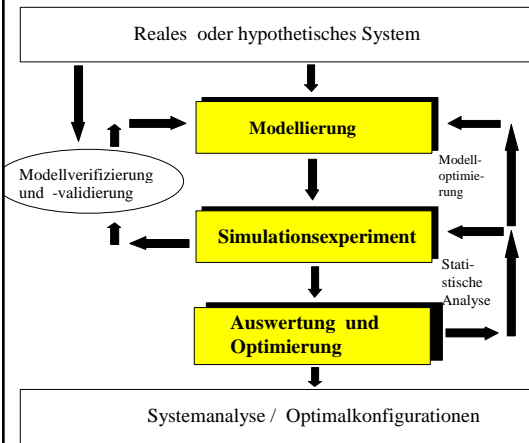


HOCHSCHULE FÜR TECHNIK UND WIRTSCHAFT DRESDEN (FH)
Fachbereich Informatik/Mathematik

Überblick

- Auswertung von Simulationsexperimenten
 - Typische Tools und Auswertungsformen
- Schlussfolgerungen und Einflussmöglichkeiten auf Simulationsmodelle
 - Erkennen und Beseitigen von Engpässen
 - Erkennen von instabilen Systemabschnitten
 - Parameter- und Strukturmodifikationen
- Optimierung von/mit Simulationsmodellen
 - spezielle Anforderungen
 - Überblick über geeignete Optimierungsverfahren

Wiederholung: Ablauf von Simulationsuntersuchungen



Ein Simulationsexperiment liefert nur eine **quantitative Bewertung eines möglichen Systemzustandes**. Eine Optimierung von Modellparametern setzt einen erweiterten Experimentieralgorithmus voraus.

Bei der Existenz zufälliger Einflußgrößen innerhalb eines Modells muß zur Ermittlung statistisch relevanter Ergebnisse ein mehrfaches Simulieren mit verschiedenen Zufallszahlenströmen erfolgen.

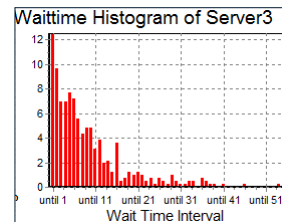
Aus statistischer Sicht sind ca. 20...30 Läufe notwendig.

Werkzeuge für die Simulationsauswertung

A. Integrierte Werkzeuge:

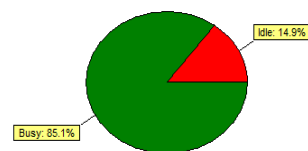
Bei den meisten **modernen Baustein-Simulationssystemen** (ED/SimIO/ SimPlant etc.) sind die Auswertungen und Experimentsteuerungen bereits in den Systemen integriert:

- Gesamtstatistiken auf Basis von Logdateien,
- Ganttpläne (Reihenfolgegrafiken),
- Einzelanzeigen zu Objekten: Kreis-Charts, Histogramme,
- dyn. Laufzeit-Anzeigen (ED: Monitorbaustein)



Programmiersprachen-basierte Systeme wie SLX bieten zumindest Datenausgaben und textbasierte Statistiken an :

- Aufzeichnungsfunktionalitäten (SLX: Observer)
- einfache Statistikfunktionen
- keine direkte grafische Visualisierung, aber ggf. Animation (über PROOF – jedoch relativ aufwändig)



Werkzeuge für die Simulationsauswertung

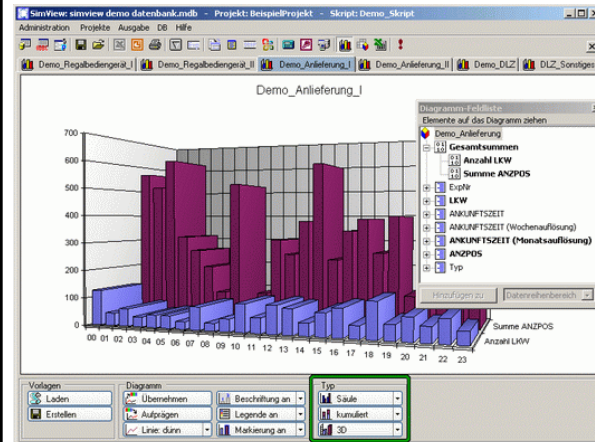
B. Abgesetzte Werkzeuge:

In Ergänzung zu den integrierten Tools können auch spezielle Auswertungswerkzeuge eingesetzt werden:

- Beispiel **SimView** der dt. Firma SimPlant :
(<http://www.simview.de/>)

Funktionalitäten :

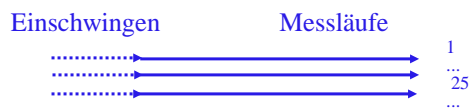
- Interface zu Logfiles, DB-Schnittstelle oder mit speziellen Bausteinen zur Integration andere Sim-Systeme direkter **Online-Import** während der Laufzeit
- Erstellung von Diagrammen per Drag & Drop:
 - Min / Max /Average
 - Counter
 - Durchlaufzeiten etc.



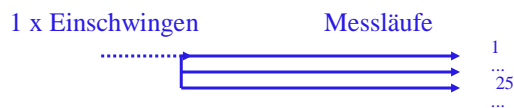
Diskrete Simulation (MA) - Ergebnisausw. Und Optimierung - Prof. T.Wiedemann - HTW Dresden - Folie 5

Optionen bei der Experimentdurchführung

- bei jedem Experiment Kaltstart mit Einschwingen des Systems und anschließend Rücksetzen der Statistik und Warmstart mit neuen Startwerten für die Zufallsgeneratoren



- nur ein Kaltstart bis zur Erreichen des eingeschwungenen Zustandes und anschließend mehrfacher Warmstart mit geänderten Parametern auf der Basis des Basiswertes (erfordert Speicherung des gesamten Systemzustandes)



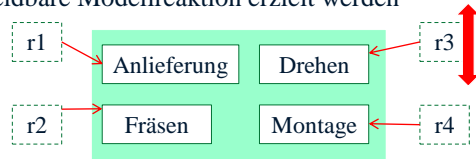
- Falls keine quasistationären Parameter erreicht werden können, sollte das Einschwingen des Systems in der Regel immer ein Mehrfaches der Durchlaufzeit betragen !

Diskrete Simulation (MA) - Ergebnisausw. Und Optimierung - Prof. T.Wiedemann - HTW Dresden - Folie 6

Experimente mit stochastischen Modellen

Zur Bestimmung des Einflusses zufälliger Größen bieten moderne Simulationssysteme einige Sonderfunktionen an:

- mehrere, getrennt aufrufbare und modifizierbare Zufallszahlengeneratoren
- Bsp. SLX: `rn_stream r1,r2,r3,r4` -> Einsetzen in die ZF-Funktionen
- durch Zuweisung der Generatoren zu jeweils einem Modellbereich oder einer Parametergruppe kann eine unterscheidbare Modellreaktion erzielt werden
- durch getrennte Änderungen der Zufallszahlenstartwerte in einzelnen Bereichen des Modells kann der spezifische Einfluss verschiedener zufälliger Größen bestimmt werden
-> Starke Unterschiede -> Verdacht auf **Systeminstabilitäten**
- Erzeugung **antithetischer Zufallszahlen** als symmetrische Zufallszahlenfolge mit $X_2 = 1 - X_1$
- durch diese antithetischen Zufallszahlen kann bei geringem Aufwand ein entgegengesetztes zufälliges Verhalten simuliert werden, dies führt zu deutlich verringerten Streuungen der statistischen Werte



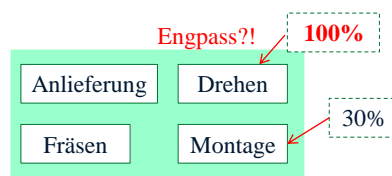
Änderung der Ergebnisse ?

Diskrete Simulation (MA) - Ergebnisausw. Und Optimierung - Prof. T.Wiedemann - HTW Dresden - Folie 7

Erkennung von Modellproblemen durch Ergebnisanalyse

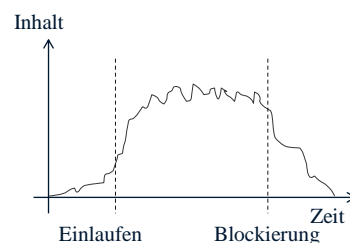
Erkennung von Problemen durch Simulationsexperimente :

- Engpässe** im Modell (und realen System):
- Analyse der Auslastungszahlen (Status) der Modellelemente (ME):
 - 100%-Werte zeigen volle Auslastung an und können auf Engpässe hinweisen
 - Behebung durch Erweiterung der Ressourcen oder ggf. zeitlich bessere Steuerung



Anlaufeffekte und Blockierungen

- Symptome: Modellelemente laufen zu Beginn langsam auf Auslastung >0 und gehen nach längerer Laufzeit plötzlich auf Werte nahe 0 zurück
- Kontrolle der vor- und nachgelagerten ME auf Durchlässigkeit oder Rückkopplungseffekte
- ggf. andere Pufferungsstrategien



Diskrete Simulation (MA) - Ergebnisausw. Und Optimierung - Prof. T.Wiedemann - HTW Dresden - Folie 8

Optimierung auf der Basis von Simulationsexperimenten

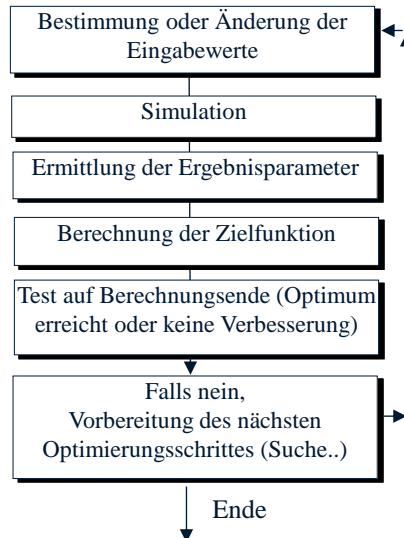
Allgemeine Definition:

Die Optimierung versucht mit Hilfe verschiedener Suchstrategien, durch geschickte Wahl von Eingabeparametern ein Modellverhalten so zu erzeugen, daß die mit Hilfe der Ausgabegrößen berechnete Zielfunktion ein Optimum einnimmt. [Schmi95]

Anmerkung :

- In der praktischen Aufgabenstellungen wird häufig schon eine Verbesserung eines bestehenden Zustandes als Ziel gestellt. Das Erreichen eines wahren, globalen Optimums ist dabei geringer priorisiert als akzeptable Laufzeiten der Berechnung.

Ablauf :



Diskrete Simulation (MA) - Ergebnisausw. Und Optimierung - Prof. T.Wiedemann - HTW Dresden - Folie 9

Bestimmung der Zielfunktion

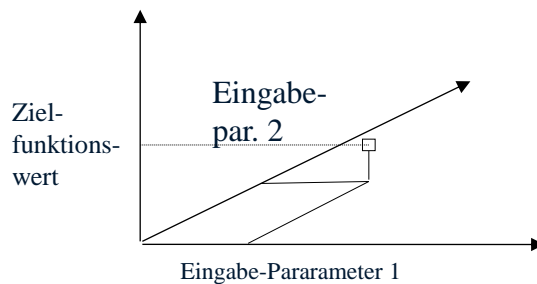
Die Zielfunktion bei der Optimierung

- berechnet aus einer Reihe ermittelter Ergebnisparameter einen Wert zur summarischen, quantitativen Beurteilung der Ergebnisparameter
- die Berechnungsvorschrift ist meist linearer Natur, bei verschiedenartigen Ergebnisparameter muß eine Normierung und Wichtung erfolgen
- da die Ergebnisparameter Resultat der Eingabeparameter des Modells sind, ist auch die Zielfunktion eine Funktion der Eingabeparameter,
- der funktionelle Zusammenhang zwischen den Eingabeparametern und der Zielfunktion ist bei Simulationsuntersuchungen in der Regel nicht bekannt - **jeder einzelne Wert der Zielfunktion setzt daher ein Simulationsexperiment voraus**
- **Im Gegensatz zu mathematischen Aufgabenstellungen können bei der Optimierung mittels Simulationsexperimenten durch den Punktcharakter der Lösungsmenge auch keine Ableitungen gebildet werden ! Gradientenmethoden sind folglich nicht anwendbar !**
- **Alle simulationsbasierten Optimierungsverfahren müssen allein mit Punktmengen arbeiten können.**
- **(ZF = Umsatz_Stk * Menge - 1*Kosten - (100%- Qualität)^4 - (Verspätg)^2**

Diskrete Simulation (MA) - Ergebnisausw. Und Optimierung - Prof. T.Wiedemann - HTW Dresden - Folie 10

Der Suchraum

- Da sich die Zielfunktion über die Simulationsexperimente aus den Eingabeparametern ergibt, bilden die Eingabeparameter den Suchraum.
- Unter Hinzunahme der Zielfunktion ergibt sich bei n -Eingabeparametern eine $n+1$ -dimensionale Darstellung.
- Bei 2 Eingabeparametern kann der Suchraum noch als dreidimensionale Darstellung visualisiert werden.



Diskrete Simulation (MA) - Ergebnisausw. Und Optimierung - Prof. T.Wiedemann - HTW Dresden - Folie 11

Die Suchstrategie

Die Suchstrategie:

- bestimmt die konkreten Eingabeparameter für das jeweilige Simulationsexperiment aus der Menge aller möglichen Eingabewerte

Bei Simulationsmodellen sind als Eingabeparameter zu unterscheiden:

- kontinuierlich veränderliche Eingabeparameter - z.B. reale Zahlen für Mischungsverhältnis oder Bedienzeiten
- diskret veränderliche Eingabeparameter - z.B. ganze Zahlen oder reale Einzelwerte für Puffergrößen, Anzahl von Bearbeitungsplätzen etc.
- Steuerstrategien von Verteilungsprozessen und Prioritätenregelungen, für automatische Optimierungsstrategien ist meist eine Abbildung aller möglichen Varianten auf diskrete Steuerparameter günstig (einfaches Durchnummerieren der Strategien oder Methoden)
- strukturelle Kenngrößen wie Verzweigungsarten, lokale Rückkopplungen etc. (aufgrund vieler Freiheitsgrade und software-technischer Restriktionen ist eine automatisierte Optimierung struktureller Größen mit den gegenwärtigen Simulationssystemen zur Zeit kaum beherrschbar)

Diskrete Simulation (MA) - Ergebnisausw. Und Optimierung - Prof. T.Wiedemann - HTW Dresden - Folie 12

Arten von Suchstrategien

Vollständige Enumeration bei sehr wenigen diskreten Eingabeparametern oder auf diskrete Werte abgebildete Steuerungsstrategien

- es wird mit Sicherheit das globale Optimum gefunden
- bei kontinuierlichen oder vielen diskreten Eingabeparametern führt die vollständige Enumeration zur kombinatorischen Explosion und ist nicht mehr praktikabel

Standardverfahren der analytischen Mathematik zur Optimierung

- basieren meist auf der Auswertung des Gradienten der Zielfunktion
- Voraussetzung dafür ist die Differenzierbarkeit der Zielfunktion in Abhängigkeit von den Basisparametern, hier entsprechend von den Eingabeparametern - diese Funktion existiert bei simulierten Systemen nicht !
- aus dem gleichen Grund sind auch exakte und auf Linearisierung beruhende Lösungsverfahren nicht anwendbar

Fazit : -> es sind Verfahren notwendig, welche auf Einzelwerten der Zielfunktion laufen und mit wenigen Werten eine gute Konvergenz zum Optimum erreicht

Diskrete Simulation (MA) - Ergebnisausw. Und Optimierung - Prof. T.Wiedemann - HTW Dresden - Folie 13

Auswahl der Suchstrategie

Entscheidend bei der Auswahl der Suchstrategie und des gesamten Optimierungsablaufes ist die Charakteristik der Zielfunktion:

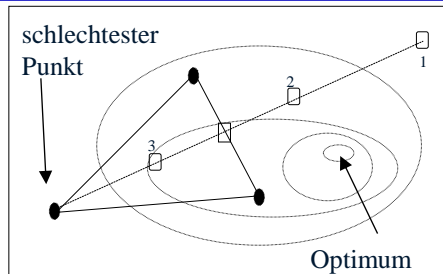
- immer wenn sich von einem beliebigen Ausgangspunkt eine monoton steigende Kurve zum globalen Maximum finden läßt, handelt es sich um ein konvexes Problem
 - in allen anderen Fällen existieren Suboptima und es besteht keine Sicherheit bezüglich des Erreichens des globalen Optimums
- > Zielfunktion ist bei Simulationsuntersuchungen meist kaum analytisch darstellbar
- > bei Simulationsmodellen kann nur in sehr einfachen Fällen auf ein konvexes Problem geschlossen werden
- > bei Unsicherheit oder Vermutung eines nichtkonvexen Optimierungsproblems muß die Optimierung von einer Vielzahl von Startpunkten wiederholt werden
- bei verschiedenen Resultaten handelt es sich um Suboptima
 - bei einem stets gleichen Resultat kann es sich um das globale Optimum handeln

Diskrete Simulation (MA) - Ergebnisausw. Und Optimierung - Prof. T.Wiedemann - HTW Dresden - Folie 14

Das Complex-Suchverfahren

Ausgangsbasis

- bei einem n-dimensionalen Problem werden n+1 Startpunkte definiert- die aufgespannte Fläche (oder das Metavolumen) wird Simplex genannt



Ablauf

- Bestimmung des schlechtesten Simplexpunktes
- Bestimmung des Mittelpunktes aus allen Punkten ohne den schlechtesten Punkt
- Versuch den schlechtesten Punkt durch Reflexion über den Mittelpunkt zu verbessern, zuerst mit Verlängerungsfaktor $\alpha = 1.3$ (siehe Punkt 1)
- falls schlechter, dann mit äußerem Verkürzungsfaktor τ (meist 0.5) (Punkt 2)
- falls immer noch schlechter, dann innere Verkürzung ebenfalls mit τ (Punkt 3)
- falls immer noch kein Erfolg, dann Sekundäralgorithmus mit geänderter Suchrichtung und -abständen (falls ebenfalls Mißerfolg -> Abbruch)
- erfolgreiches Ende der Optimierung, falls das Verhältnis zwischen bestem und schlechtesten Zielfunktionswert eine Schranke unterschreitet

Diskrete Simulation (MA) - Ergebnisausw. Und Optimierung - Prof. T.Wiedemann - HTW Dresden - Folie 15

Spezialfall - Eindimensionales Suchverfahren

* insbesondere geeignet für konvexe Probleme, sonst mehrfacher Neustart in Subintervallen notwendig)

* Zielfunktion gegeben als $z = F(x)$

Suchstrategie in Anlehnung an das Gradientenverfahren:

- Auswahl und Unterteilung eines Intervalls in eine Anzahl Abschnitte
- Berechnung der Zielfunktionen für die Abschnittsgrenzen
- Bestimmung des Extremwertes



- Bildung eines neuen Intervalls mit dem Extremwert in der Mitte und erneuter Start der Suche



- erfolgreiche Beendigung der Suche bei Erreichen einer vorgegebenen Intervallbreite



Diskrete Simulation (MA) - Ergebnisausw. Und Optimierung - Prof. T.Wiedemann - HTW Dresden - Folie 16

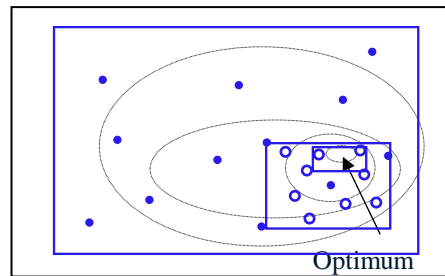
Monte-Carlo-Verfahren zur Optimierung

Prinzipieller Ablauf :

- Analog zur bekannten Monte-Carlo-Simulation wird ein Bereich des Suchraumes durch zufällige Parameterkombinationen abgedeckt
- Für jeden per Zufallszahlengenerator ermittelten Punkt wird durch Simulation die Zielfunktion ermittelt und mit den bestehenden Minimalwerten verglichen..

Verbesserungen des Verfahrens

- Nach einer gewissen Zeit wird der Suchraum auf einen Bereich um besonders gute Ergebnisse verkleinert.
- Dadurch konvergiert das Verfahren schneller.
- Gefahr besteht bei sehr zerklüfteten Suchflächen – Suboptima werden eventuell als global angenommen



Diskrete Simulation (MA) - Ergebnisausw. Und Optimierung - Prof. T.Wiedemann - HTW Dresden - Folie 17

Evolutionstrategien / Genetische Algorithmen,

Ausgangsbasis :

- die Komplexität von Optimierungsproblemen aus der Praxis ähnelt stark der biologischen Evolutionsstrategie
- Nach Rechenberg [1975] :
Die biologische Evolution stellt eine optimale Strategie zur Anpassung der Lebewesen an ihre Umwelt dar. Deshalb sollte es sich lohnen, Prinzipien der biologischen Evolution auch zur Optimierung technischer Systeme heranzuziehen.

Innerhalb der Evolutionstheorie gelten als wissenschaftlich abgesichert:

- Die Evolution ist ein Prozeß auf der Grundlage von Chromosomen, den Trägern von **Erbinformationen**.
- Die natürliche Selektion stellt die Verbindung zwischen den Chromosomen und der Güte der kodierten Information dar. Nach Darwin (1859) besitzen Organismen mit der besten Umweltpassung die größte Überlebenschance („survival of the fittest“).
- Die Evolution beruht auf den Schritten **Reproduktion, Rekombination, Mutation** und Selektion.
- Die Evolution hat kein Gedächtnis. Nur das Erbmaterial lebender Organismen geht in die nächste Generation ein.

Diskrete Simulation (MA) - Ergebnisausw. Und Optimierung - Prof. T.Wiedemann - HTW Dresden - Folie 18

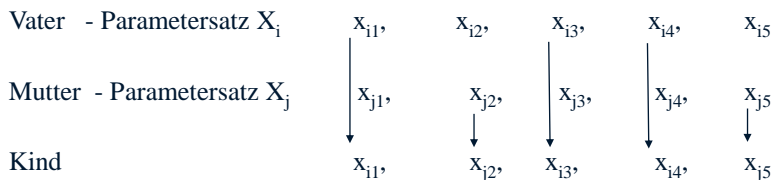
Anwendung von Evolutionstrategien / GA

Anpassung der genetischen Algorithmen an technische Problemstellungen

- Die Anzahl der Individuen bleibt konstant. (Extremfall auch nur 1 Individuum, in der weiteren Betrachtung wird hier jedoch von einer Anzahl größer 1 ausgegangen, z.B. 10-20 Individuen)
- Ein Individuum kann prinzipiell unendlich lange leben und ungeschlechtlich Nachkommen erzeugen.
- Die Umwelt und damit das Vitalitätskriterium (= Zielfunktion der Optimierungsaufgabe) bleiben konstant.

Beispielhafter Ablauf

- Jedes Individuum wird charakterisiert durch einen Parametervektor $X = \{ x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 \}$. Es seien zu einem beliebigen Zeitpunkt N Individuen mit den entsprechenden Erbeigenschaften $X_1 \dots X_N$ gegeben.
- **Prinzip der Rekombination** (Reproduktion bei nur einem Individuum) die neuen Parameter werden durch zufällige Auswahl aus den Elternparametern bestimmt:



Diskrete Simulation (MA) - Ergebnisausw. Und Optimierung - Prof. T.Wiedemann - HTW Dresden - Folie 19

Evolutionstrategien / Genetische Algorithmen II

Die Mutation :

- bei der Rekombination eines neuen Individuums oder während der Lebensdauer desselben erfolgt die zufällige Veränderungen eines Parameters
 - zufällige Bestimmung des entsprechenden Parameters
z.B. gerundete Zufallszahl => Parameterindex
 - zufällige Veränderung des Parameters
- Arten der Veränderung
 - nach den Regeln der Evolutionsstrategie über die Addition einer normalverteilten Zufallszahl

$$x_{i3} = x_{i3} + NV(\mu, \sigma)$$
 - bei den genetischen Algorithmen werden die Zustandsgrößen häufig durch Bitfolgen dargestellt
 - Mutation erfolgt durch Invertierung eines oder mehrerer Bits
 - zur wirklichkeitsnahen Darstellung werden meist spezielle Bitcodes verwendet
 - (z.B. Graycode mit jeweils nur einem unterschiedlichen Bit in der Anzahl gesetzter Bits)

Diskrete Simulation (MA) - Ergebnisausw. Und Optimierung - Prof. T.Wiedemann - HTW Dresden - Folie 20

Evolutionstrategien / Genetische Algorithmen III

Prinzip der Selektion

- Nach der Bildung neuer Individuen muß in der Regel wieder eine Reduzierung auf die vereinbarte oder zulässige Anzahl erfolgen. Zur Beurteilung der Individuen wird meist eine Fitneßfunktion gebildet, welche sich an der Zielfunktion orientiert.
- von der Art der Selektion hängt der Erfolg der Algorithmen ab. Mögliche Varianten sind:
 - zufällige Auswahl der neuen Nachkommen
 - generell schlecht, da keine Beachtung der Fitneßfunktion, sinnvoll u.U. zur Varianzerhöhung am Anfang der Berechnung
 - zufällige Auswahl proportional zum Fitneßkoeffizienten
 - verbindet sehr gut die Bewertung der Vitalität mit einem Anteil Zufall
 - bevorzugt "gute" Individuen, gibt aber auch schlechten noch eine Chance
 - Berechnung erfolgt analog zur Ermittlung von beliebigen Zufallszahlen auf der Basis der normierten Fitneßfunktionswerte

Diskrete Simulation (MA) - Ergebnisausw. Und Optimierung - Prof. T.Wiedemann - HTW Dresden - Folie 21

Evolutionstrategien - Zusammenfassung

Steuerung des Optimierungsablaufes

Praktische Versuche haben eine Reihe von Empfehlungen zur Experimentsteuerung ergeben:

- zu Beginn der Optimierung sollte die Mutationsrate relativ hoch sein (dies entspricht einer zufälligen Verteilung der Individuen über den Suchraum)
- mit fortschreitender Optimierungsdauer sinkt die Mutationsrate, so daß sich neue Lösungen verstärkt durch Rekombination ergeben
- zur Vermeidung des "Festsitzens" auf lokalen Optima wird eine Normierung und teilweise Kappung der Fitneßfunktionen vorgeschlagen

Fazit: Der Steuerung des zeitlichen Verlaufs der Schwellenwerte für die Mutations- und Rekombinationswahrscheinlichkeiten kommt eine ebenso große Bedeutung zu, wie den Evolutionsvorgängen selbst.

Vergleich zu Standardverfahren:

- der "definierte und nicht völlig blinde Zufall" kann insbesondere bei Existenz vieler Suboptima ein günstigeres Verhalten als die Standardverfahren zeigen
- bei konvexen und einfachen Optimierungsproblemen ist der Aufwand bei genetischen Algorithmen in der Regel größer

Diskrete Simulation (MA) - Ergebnisausw. Und Optimierung - Prof. T.Wiedemann - HTW Dresden - Folie 22

Fazit zur Optimierung

Vorteile von Optimierungsverfahren in Simulationsstudien

- Bei kompletter Einbindung der Simulationsexperimente in Optimierungsläufe kann eine weitgehende Automatisierung der Abläufe erfolgen :
 - Es sind **keine manuellen Auswertungen** (meist umfangreich) notwendig
 - Das Gesamtsystem erweitert den Analyseansatz der Simulation um einen **Syntheseansatz : NEUE, OPTIMALE Lösungen** werden generiert !
 - Einbindungen in den operativen Steuerungsprozess sind möglich, z.B.:
 - Bestimme optimale Ansatz von Fahrzeugen oder Personal
 - Bestimme optimale Call-Center-Strategie für nächste Woche oder Feiertag

Probleme bei Einsatz von Optimierungstools

- Pro Optimierungspunkt sind 20...30 Einzelläufe notwendig !
- Damit sind bei 100 ...500 zu berechnenden Optimierungspunkten einige Tausend bis Zehntausend Simulationsläufe notwendig
- Damit spielt die Performance des Simulationssystems eine wichtige Rolle
- gewisse Hilfe durch neue Cloud/Grid-Systeme möglich (vergl. VL)

Gesamtfazit: Wenn technisch anwendbar, ist eine Lösung zur Optimierung immer sinnvoll und lohnend !