

Moderne statistische Verfahren zur Parameteroptimierung und systematischen Modellauswahl

Prof. Dr. Thomas Bartz-Beielstein
bartz@gm.fh-koeln.de, Tel. 02261/8196-6391

Prof. Dr. Wolfgang Konen
wolfgang.konen@fh-koeln.de, Tel. 02261/8196-275

Abstract:

Die Simulation komplexer technischer Vorgänge kann mit unterschiedlichen Modellen durchgeführt werden. Meistens erfolgt die Modellauswahl und anschließende Parametrisierung des Modells nach subjektiven Kriterien. Wir demonstrieren, wie eine systematische Vorgehensweise zur Modellselktion mittels SPO (sequentieller Parameteroptimierung) diesen Vorgang objektivieren kann. Diese Vorgehensweise konnte erfolgreich zur Auswahl eines Modells zur Vorhersage von Füllständen in Regenüberlaufbecken angewandt werden.

Ansprechpartner: Prof. Dr. Thomas Bartz-Beielstein

Institut: Institut für Informatik

Kooperationspartner: Technische Universität Dortmund, Universität Karlsruhe, Tilburg University (NL), Vrije Universiteit Amsterdam (NL)

Zielsetzung

Verfahren der Computational Intelligence (CI) haben in den letzten Jahrzehnten einen festen Platz im Repertoire der Simulations- und Optimierungsverfahren erobert. Neuronale Netze (NN), Evolutionsstrategien (ES) oder genetisches Programmieren (GP) – um nur einige CI-Verfahren zu

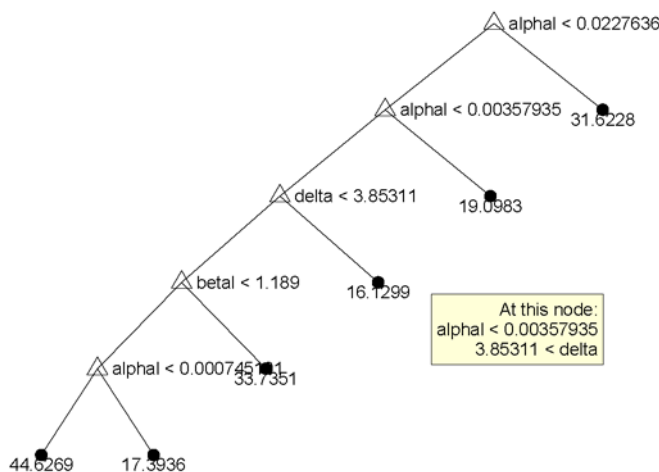


Abbildung 1: Baumbasierte Darstellung der Ergebnisse. Günstige Eigenschaften können direkt abgelesen werden. Obwohl die zugrunde liegenden statistischen Verfahren komplex sind, benötigt der Anwender zur Interpretation der Ergebnisse lediglich Grundkenntnisse der Statistik.

nennen – werden tagtäglich in der industriellen Praxis eingesetzt. Die Entscheidung für den Einsatz dieser Verfahren wird dabei häufig von subjektiven Kriterien beeinflusst. Als Kriterien können hier z.B. die Vertrautheit mit einem Verfahren, das persönliche Interesse an beispielsweise bioanalogen Verfahren oder Vorträge auf Fachkonferenzen genannt werden. Nach unserer Erfahrung spielt bei dieser Auswahl der Zufall eine große Rolle. Nur in seltenen Fällen erfolgt die Auswahl allein nach objektiven Maßstäben. Außerdem ist es nicht ausreichend, das beste Verfahren auszuwählen, da der Auswahlprozess selbst möglichst optimal durchgeführt werden sollte. Es ist also nicht alleine ausreichend, das beste Verfahren zu finden; der Findungsprozess selbst muss optimal gestaltet werden.

Der Fluch der Dimensionen

Im Rahmen unserer Analysen haben wir verschiedene Prognosemodelle betrachtet, wie zum

Beispiel Neuronale Netze (NN), Echo State Networks (ESN), Nonlinear AutoRegressive models with exogenous inputs (NARX), finite impulse response filter (FIR), Differentialgleichungen (ODE) oder Integralgleichungen (INT) [4,5].

Die von uns untersuchten Modelle besitzen bis zu 20 Parameter. Selbst bei nur drei verschiedenen Einstellungen pro Parameter, beispielsweise "kalt", "warm" und "heiss", gibt es mehr als drei Milliarden verschiedene Kombinationen. In vielen Situationen wird versucht, manuell, d.h. durch Probieren, günstige Parametereinstellungen für das Modell zu finden. Die sog. one-factor-at-a-time (OAT) Vorgehensweise findet dabei häufig Anwendung. Allerdings wächst die Anzahl der möglichen Einstellungen mit der Anzahl der Faktoren exponentiell. Daher besitzt die OAT-Vorgehensweise in vielerlei Hinsicht große Nachteile im Vergleich zu einer systematischen Vorgehensweise. Im Bereich der Simulation wurde dies von Kleijnen ausführlich dargestellt [6].

Sequentielle Parameteroptimierung

Wir setzten die SPO ein [1-3]. SPO wurde speziell für Optimierungsprobleme entwickelt und kombiniert Ansätze aus der klassischen Regressions- und Varianzanalyse mit modernen statistischen Verfahren wie Kriging. SPO ist eine umfassende, auf einem rein experimentellen Ansatz beruhende Methode zur Analyse und Verbesserung deterministischer und stochastischer Simulations- und Optimierungsverfahren [2]. Ein eingangs kleiner Stichprobenumfang mit wenigen Wiederholungen wird im Laufe der SPO vergrößert. Zur Bestimmung neuer Stichproben und der Anpassung der Anzahl der Wiederholungen fließen die bisher gewonnenen Informationen ein, so dass das Modell sequenziell verbessert und die Aussagen immer sicherer werden. Die sequenzielle Vorgehensweise ermöglicht ein Lernen der zugrunde liegenden Abhängigkeiten. SPO kann zudem automatisiert ablaufen und ist für die numerische Simulation und Optimierung praktisch konkurrenzlos. Uns ist zurzeit kein vergleichbares Verfahren bekannt, das einem Anwender mit geringem Aufwand die Anpassung, den Vergleich und die Analyse verschiedener Modelle ermöglicht.

Ergebnisse

Die manuellen Ergebnisse eines Experten konnten durch SPO nochmals um 30-40% gesteigert werden [5]. Durch die SPO erschließen sich oftmals überraschende Einsichten über die Modellierung sowie Ansätze, wie sich möglicherweise ein verbessertes Modell bauen lässt. Die SPO selbst zeigte sich als robustes Optimierungsverfahren, das mit einer kleinen Samplezahl gestartet werden kann.

Kooperationen

Die Bestimmung günstiger Einstellungen und geeigneter Modelle ist Gegenstand aktueller Forschung, in Kooperation mit der Technischen Universität Dortmund (Prof. Rudolph), Universität Karlsruhe (PD Dr. Branke), der Vrije Universiteit Amsterdam (Prof. Eiben) und der University Tilburg (Prof. Kleijnen) durchgeführt wird. Im Rahmen dieser Kooperationen wurden Forschungsanträge beantragt, so dass regelmäßige Treffen, Gastaufenthalte und kooperative Promotionsvorhaben durchgeführt werden können.

Danksagung

Teile dieser Arbeit wurden durch die FH Köln im Rahmen des anerkannten Forschungsschwerpunktes COSA gefördert.

Literatur

- [1] Bartz-Beielstein, T.; Parsopoulos, K. E.; Vrahatis, M. N.: Design and analysis of optimization algorithms using computational statistics. Applied Numerical Analysis and Computational Mathematics (ANACM) 1 (2004) 2, S. 413–433.
- [2] Bartz-Beielstein, T.; Lasarczyk, C.; Preuß, M.: Sequential Parameter Optimization. In:

- Proceedings 2005 Congress on Evolutionary Computation (CEC'05), Edinburgh, Scotland (McKay, B.; et al., Hg.), Bd. 1, S. 773–780. Piscataway NJ: IEEE Press. 2005.
- [3] Bartz-Beielstein, T.: *Experimental Research in Evolutionary Computation—The New Experimentalism*. Natural Computing Series. Berlin, Heidelberg, New York: Springer. 2006.
- [4] Bartz-Beielstein, T.; Bongards, M.; Claes, C.; Konen, W.; Westenberger, H.: *Datenanalyse und Prozessoptimierung für Kanalnetze und Kläranlagen mit CI-Methoden*. In: Proc. 17th Workshop Computational Intelligence (Mikut, R.; Reischl, M., Hg.), S. 132–138. Universitätsverlag, Karlsruhe. 2007.
- [5] Bartz-Beielstein, Thomas ; Zimmer, Tobias ; Konen, Wolfgang: *Parameterselktion für komplexe Modellierungsaufgaben der Wasserwirtschaft – Moderne CI-Verfahren zur Zeitreihenanalyse*. In: Mikut, R. (Hrsg.) ; Reischl, M. (Hrsg.): Proc. 18th Workshop Computational Intelligence, Universitätsverlag, Karlsruhe, 2008. – im Druck
- [6] Bartz-Beielstein, Thomas: *Review: Design and Analysis of Simulation Experiments by Jack P. C. Kleijnen*. In: *INFORMS Computing Society News* (2008), Fall 2008. – <http://computing.society.informs.org/newsletter.php>