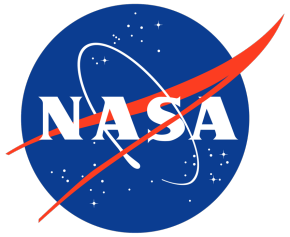
# OpenMDAO ワークショップ


金子宗瑚
ミシガン大学 航空宇宙工学科

2023年1月12日　東京大学

スライドのダウンロード

```
$ git clone git@github.com:kanekosh/OpenMDAO_workshop_UTokyo.git
```

# 本日の流れ

1. OpenMDAOの概要と理論
2. OpenMDAOを用いたオープンソースライブラリの紹介
3. 実践編

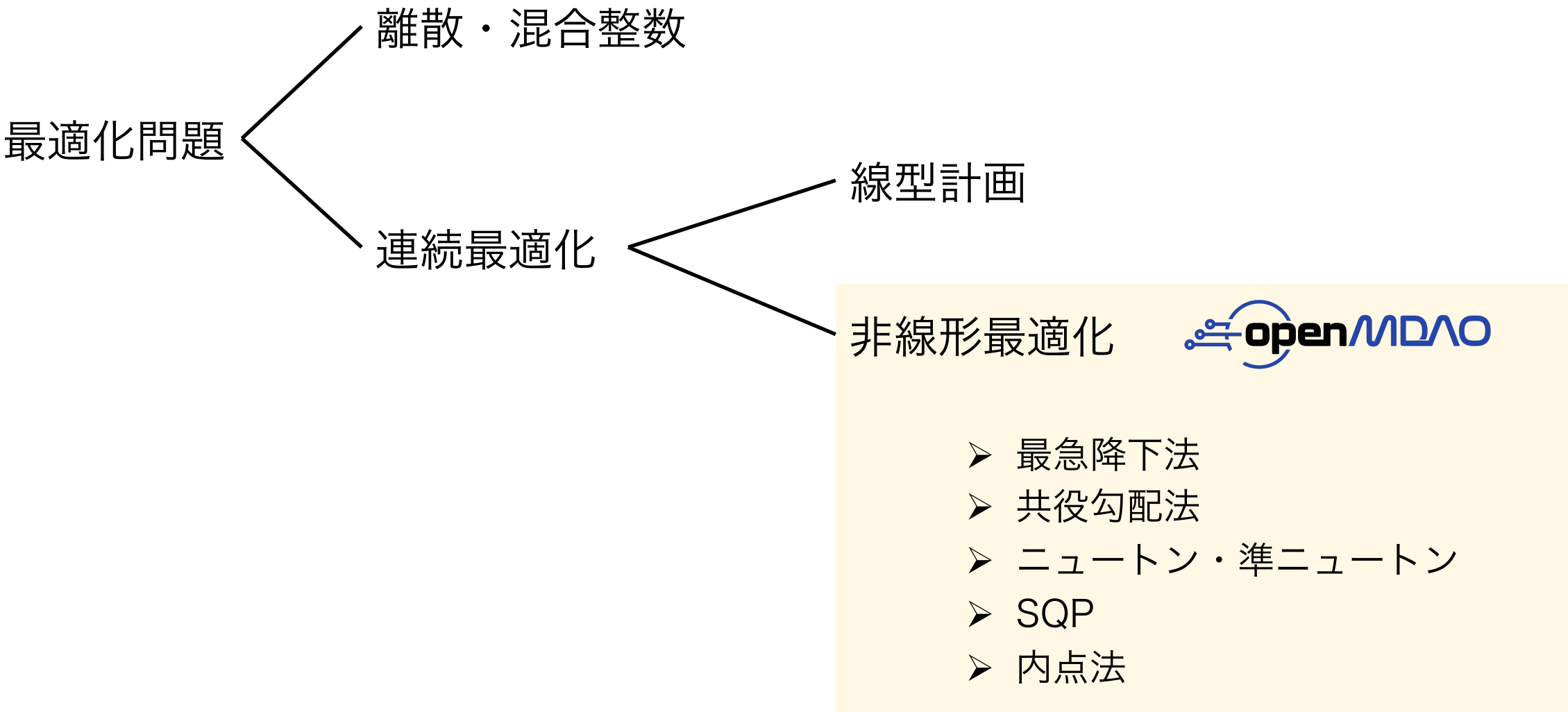
# OpenMDAOとは？

- NASA Glenn開発の最適化フレームワーク
- Python、オープンソース

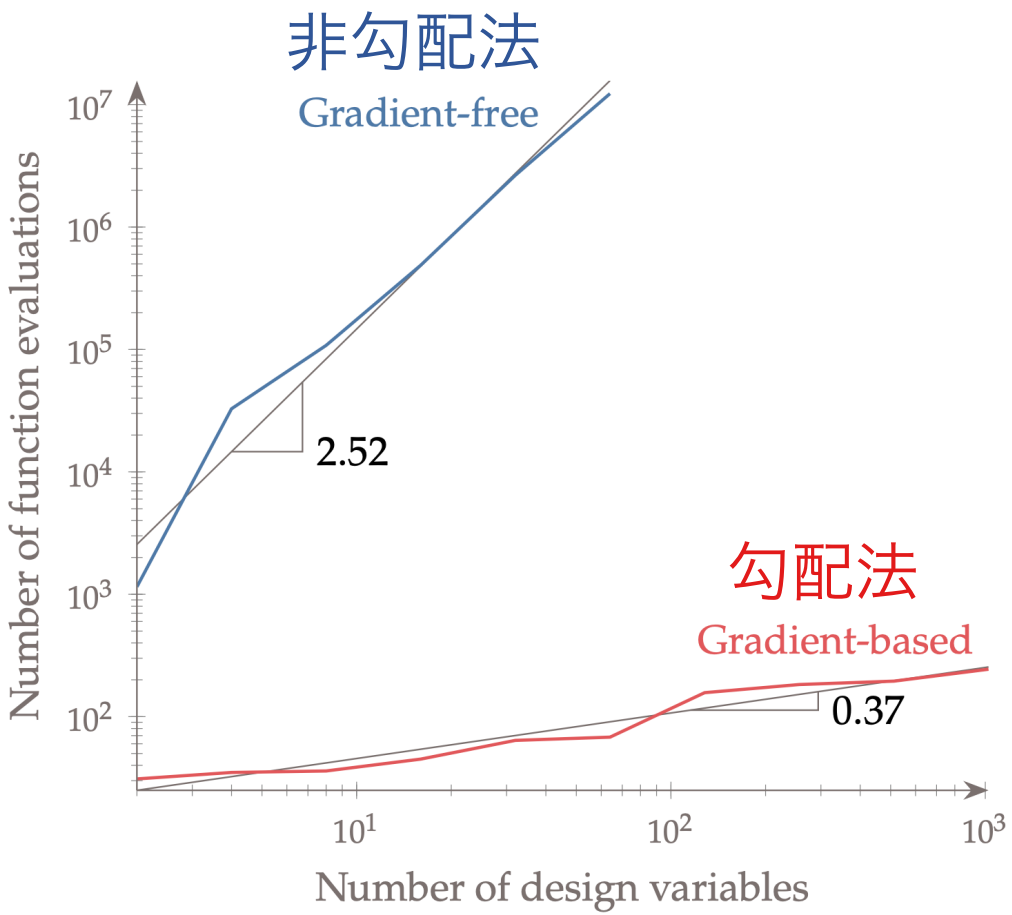
- 背景の理論 MAUD[1] はミシガン大学 MDO Lab の考案
- MDO Lab 卒業生が開発コアメンバーに複数


[1] Hwang and Martins, A computational architecture for coupling heterogenous numerical models and computing coupled derivatives, 2018, https://dl.acm.org/doi/10.1145/3182393

# OpenMDAO：非線形連続最適化向け



# 連続最適化の解法：勾配法 vs 非勾配法




関数評価の回数

問題サイズ

## 勾配法のメリット

- 少ない関数評価 → 低コスト
- 大規模問題を解くことができる
- 数学的な局所最適条件 (KKT)

## デメリット・注意点

- 局所解に収束する可能性
- 勾配計算が必要
- 勾配が非正確だと収束しない

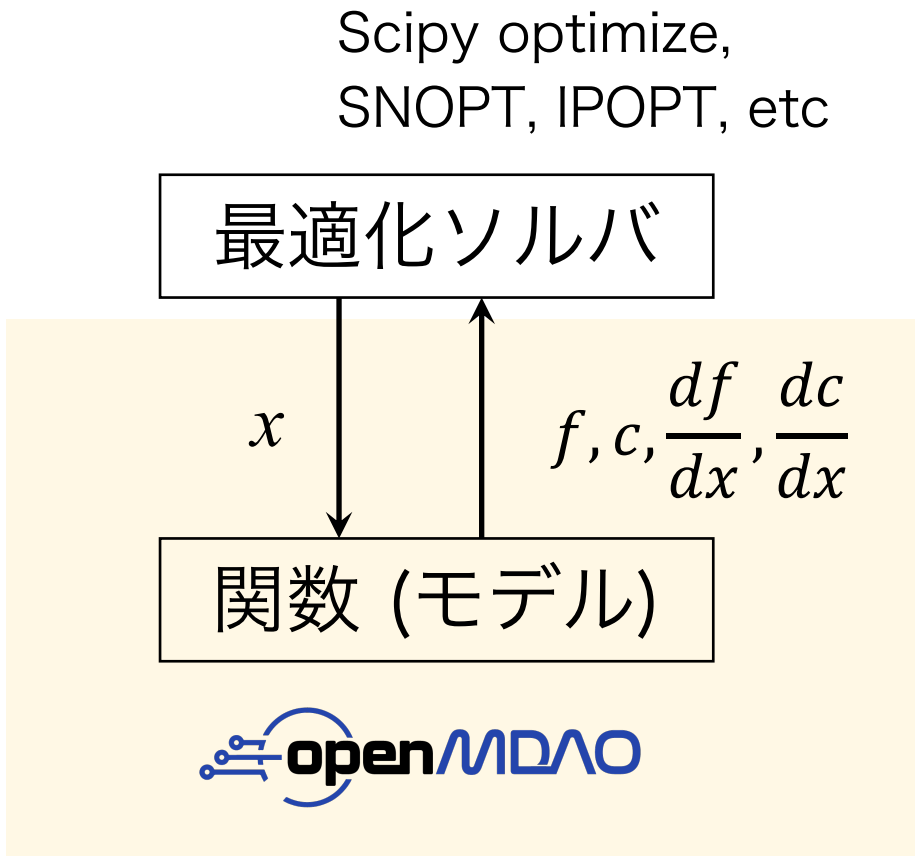
OpenMDAO

正確で低コストな勾配計算

Martins and Ning, Engineering Design Optimization, pp. 281

# OpenMDAOの役割

$$\begin{aligned} \text{minimize} \quad & f(x) \\ \text{by varying} \quad & x \\ \text{subject to} \quad & c(x) \leq 0 \end{aligned}$$



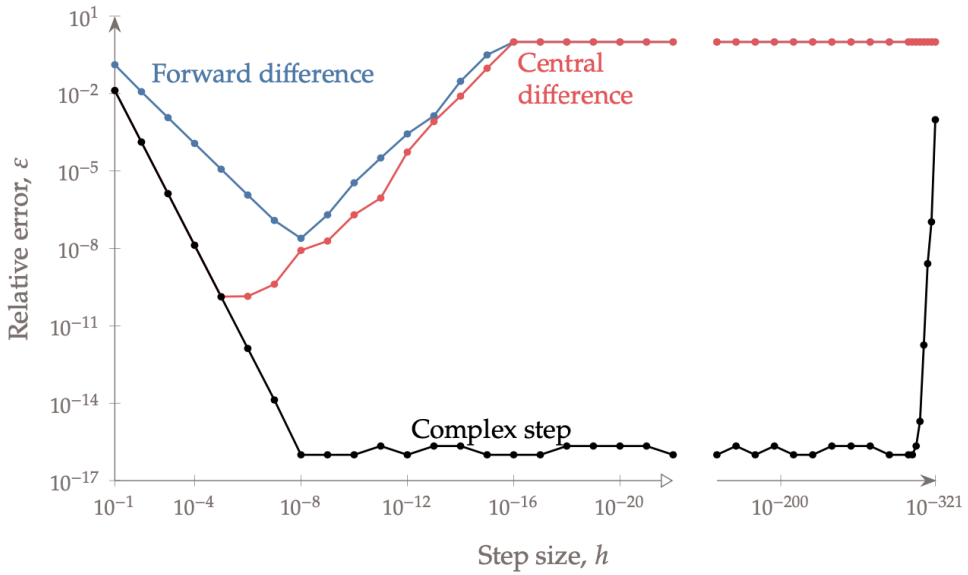

- 関数(モデル)をユーザーがOpenMDAO上で実装する
- 半自動で微分計算
- 最適化ソルバへのインターフェイス

# 勾配の計算方法

## 1. 有限差分近似 (finite difference)

$$\frac{\partial f}{\partial x_j} = \frac{f(x + h\hat{e}_j) - f(x)}{h} + O(h)$$

計算コスト：$O(n_x)$　　$n_x$：設計変数の数




ステップサイズのジレンマ

## 2. 複素ステップ法 (complex-step difference)

$$\frac{\partial f}{\partial x_j} = \frac{\mathrm{Im}\left(f(x + ih\hat{e}_j)\right)}{h} + O(h^2)$$

計算コスト：$O(n_x)$

Martins and Ning, Engineering Design Optimization, Chapter 6.

# 勾配の計算方法

## 3. **自動微分** (Automatic differentiation; Algorithmic differentiation, AD)

計算コスト：$O(n_x)$ (Forward mode)　　$n_x$ : 設計変数の数

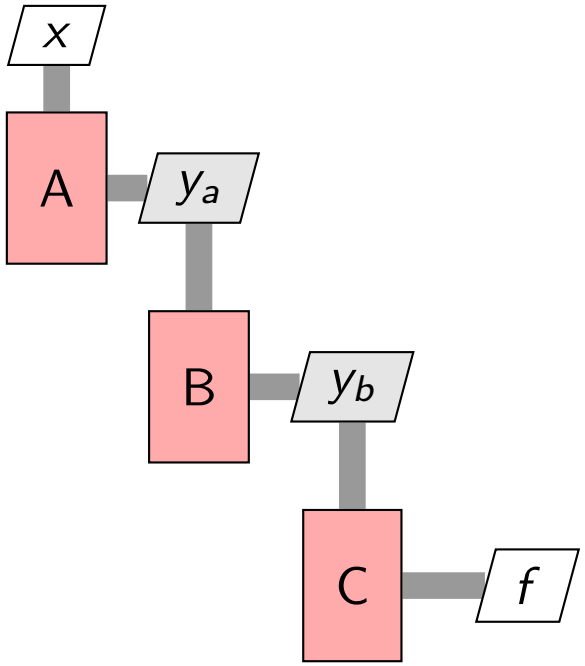
$O(n_f)$ (Reverse mode)　　$n_f$ : 関数の数

Martins and Ning, Engineering Design Optimization, Chapter 6.

# 勾配の計算方法

## 4. 解析法 (Implicit analytic methods)

Feed-forwardモデルの場合



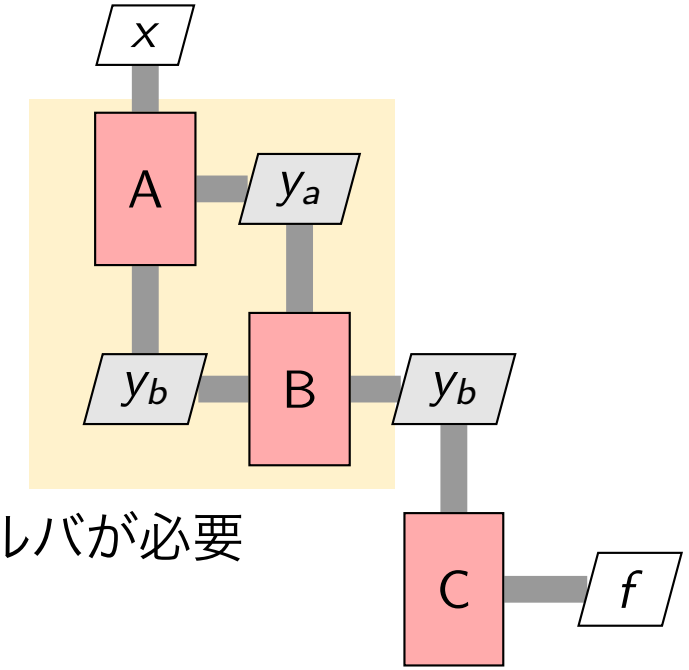

解析法 = 連鎖律 (Chain rule)

$$\frac{df}{dx} = \frac{\partial f}{\partial y_b}\frac{\partial y_b}{\partial y_a}\frac{\partial y_a}{\partial x}$$

Slide credit: John Jasa and Shamsheer Chauhan

# 連成モデルのChain ruleは複雑

連成モデルの場合




非線形ソルバが必要

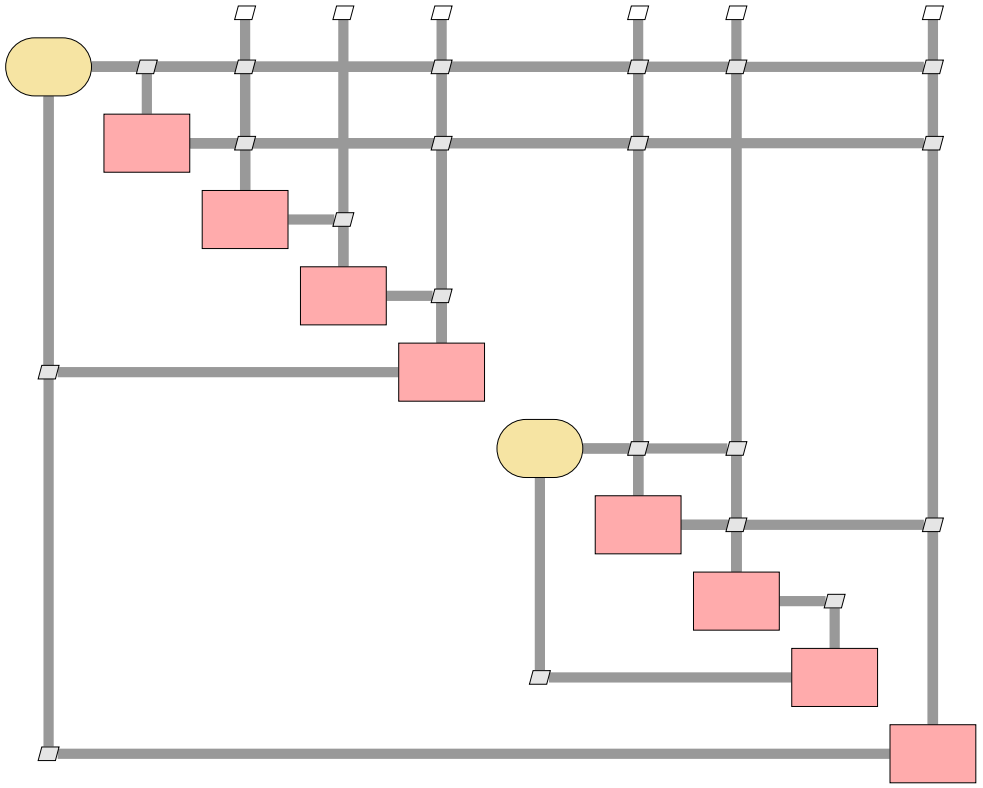
連鎖律 (Chain rule)

$$\frac{df}{dx} = \frac{\partial f}{\partial y_b}\frac{\partial y_b}{\partial y_a}\frac{\partial y_a}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y_b}\frac{dy_b}{dx} + \frac{\partial f}{\partial y_a}\frac{dy_a}{dx}$$

Slide credit: John Jasa and Shamsheer Chauhan

# OpenMDAOは、解析法による微分計算を自動で行ってくれる

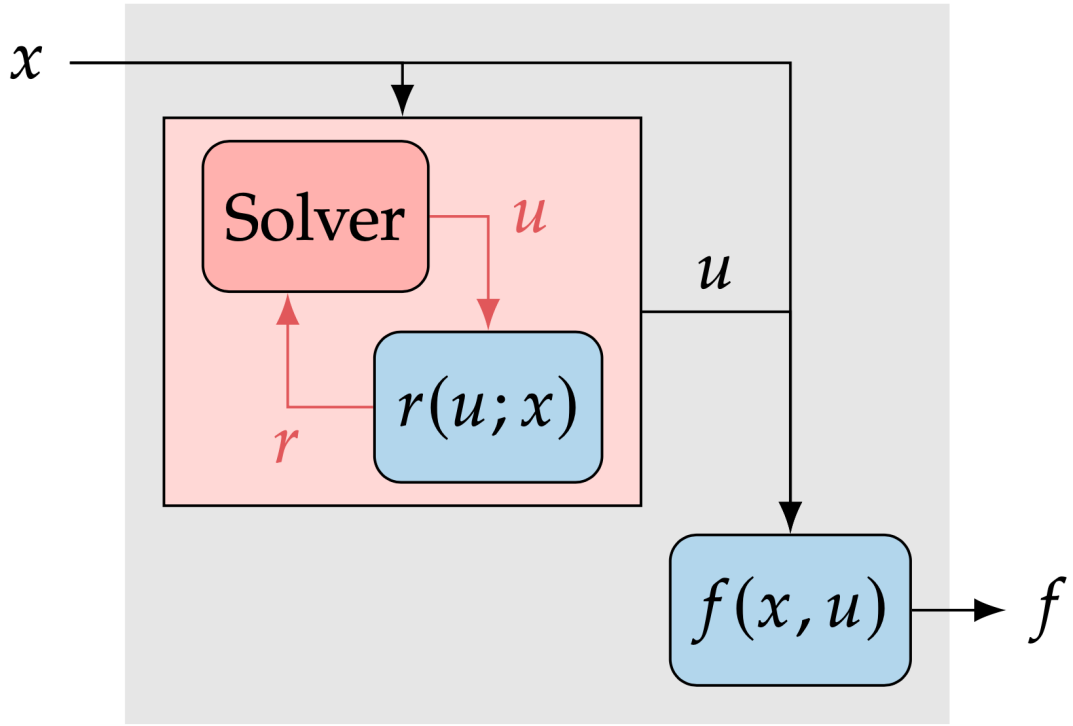
より複雑な連成モデルの場合



$$\frac{df}{dx} = [\text{ask openMDAO}]$$

Slide credit: John Jasa and Shamsheer Chauhan

# 解析法 – 状態変数と残差方程式




$x$：設計変数
$f$：目的関数・制約関数
$u$：状態変数 (states)
$r$：残差方程式 (redisuals)

$$r(u;x) = 0$$

例1：有限要素法

$u$ = 節点変位、$r = Ku - f$

例2：CFD

$$u = [\rho,\ \rho u,\ \rho v,\ \rho e],$$

Martins and Ning, Engineering Design Optimization, Chapter 6.

# 解析法 – Direct法 & Adjoint法の導出 (1)

連鎖律(chain rule)より、

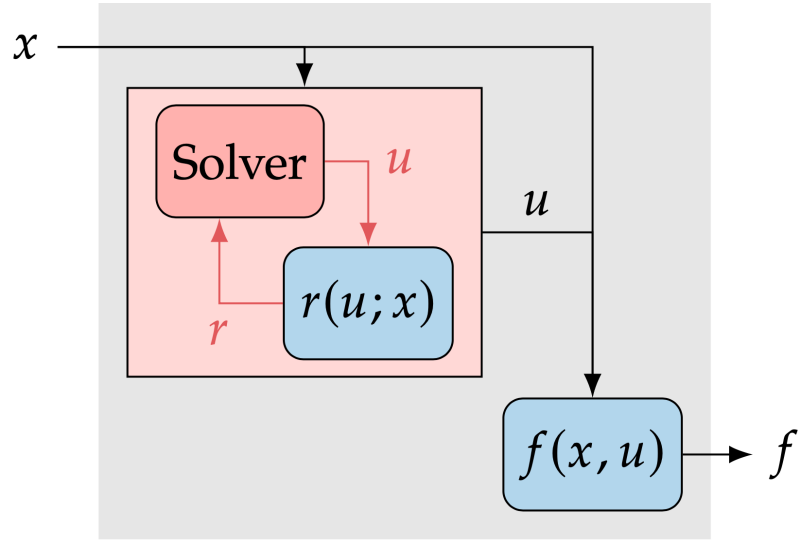
$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial u}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}$$

残差方程式は常に満たされる必要があるから、

$$\mathrm{d}r = \frac{\partial r}{\partial x}\mathrm{d}x + \frac{\partial r}{\partial u}\mathrm{d}u = 0$$

上2式より du/dx を消去すると、

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{\partial f}{\partial u}\left(\frac{\partial r}{\partial u}\right)^{-1}\frac{\partial r}{\partial x}$$




$x$：設計変数
$f$：目的関数・制約関数
$u$：状態変数 (states)
$r$：残差方程式 (redisuals)

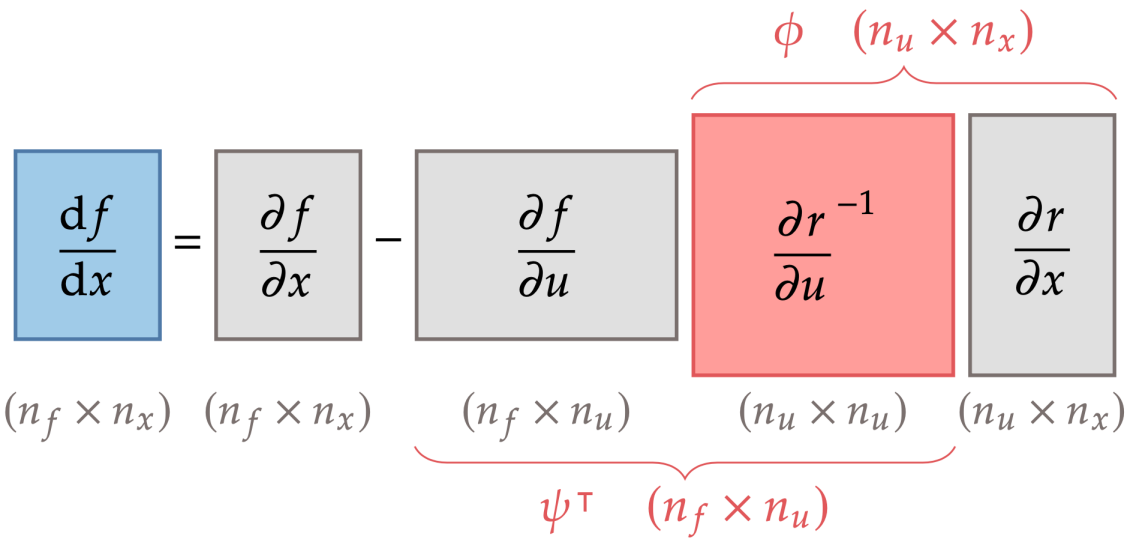
$$r(u;x) = 0$$

Martins and Ning, Engineering Design Optimization, Chapter 6.

# 解析法 – Direct法 & Adjoint法の導出 (2)

(続き)

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{\partial f}{\partial u}\frac{\partial r}{\partial u}^{-1}\frac{\partial r}{\partial x}$$




## Direct法： コスト $O(n_x)$

1. 偏微分ヤコビ行列を計算する
2. 線型システムを解く： $\frac{\partial r}{\partial u}\phi = \frac{\partial r}{\partial x}$
3. 全微分を計算： $\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{\partial f}{\partial u}\phi$

## Adjoint法： コスト $O(n_f)$

1. 偏微分ヤコビ行列を計算する
2. 線型システムを解く： $\frac{\partial r}{\partial u}^\intercal \psi = \frac{\partial f}{\partial u}^\intercal$
3. 全微分を計算： $\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = \frac{\partial f}{\partial x} - \psi^\intercal \frac{\partial r}{\partial x}$

Martins and Ning, Engineering Design Optimization, Chapter 6.

# OpenMDAOによるAdjoint/Direct法による勾配計算

1. 各コンポーネントの関数・偏微分をユーザーが実装する
   - 手計算
   - 自動微分
   - 有限差分 or Complex-step

2. 偏微分ヤコビ行列 $\frac{\partial f}{\partial x}$ , $\frac{\partial f}{\partial u}$ , $\frac{\partial r}{\partial x}$ , $\frac{\partial r}{\partial u}$ ・線型システムを組み立て
   - Unified derivative equation (UDE)
   - Modular analysis and unified derivatives (MAUD)

   Martins and Ning, Engineering Design Optimization, Chapter 6 and 13.

3. 線型システムを解く：Adjoint or Direct or 合わせ技
   - 問題サイズによって適した手法を、OpenMDAOが自動で選択

4. 全微分$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}$ を計算

# OpenMDAOによるAdjoint/Direct法による勾配計算

1. 各コンポーネントの関数・偏微分をユーザーが実装する
   - 手計算
   - 自動微分
   - 有限差分 or Complex-step

2. 偏微分ヤコビ行列・線型システムを組み立て
   - Unified derivative equation (UDE)
   - Modular analysis and unified derivatives (MAUD)

   Martins and Ning, Engineering Design Optimization, Chapter 6 and 13.

3. 線型システムを解く：Adjoint or Direct or 合わせ技
   - 問題サイズによって適した手法を、OpenMDAOが自動で選択

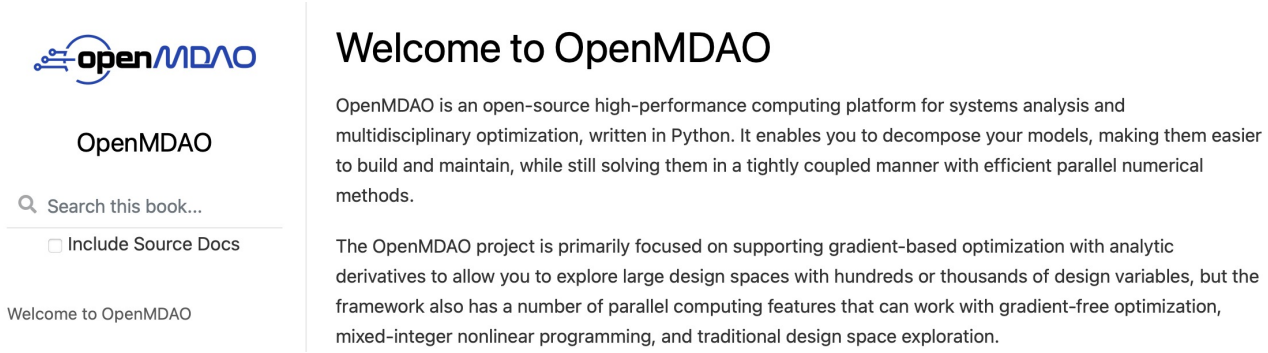
4. 全微分 $\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}$ を計算

openMDAO

# まとめ：OpenMDAOの理論と概要

- OpenMDAOは非線形連続最適化向け。
  - モデル (関数)とその勾配の実装
  - 最適化ソルバ（例: scipy optimize）とのインターフェイス
- 大規模な最適化問題を解くには、勾配法が必要。
- OpenMDAOは、正確で低コストな勾配計算の実装を簡易化
  - コンポーネントベースのモデル実装
  - Direct & Adjoint法
  - Modular analysis and unified derivatives (MAUD)

# 参考リソース（理論）




OpenMDAO
ドキュメント

https://openmdao.org/newdocs/versions/latest/main.html

Structural and Multidisciplinary Optimization (2019) 59:1075–1104
https://doi.org/10.1007/s00158-019-02211-z

RESEARCH PAPER

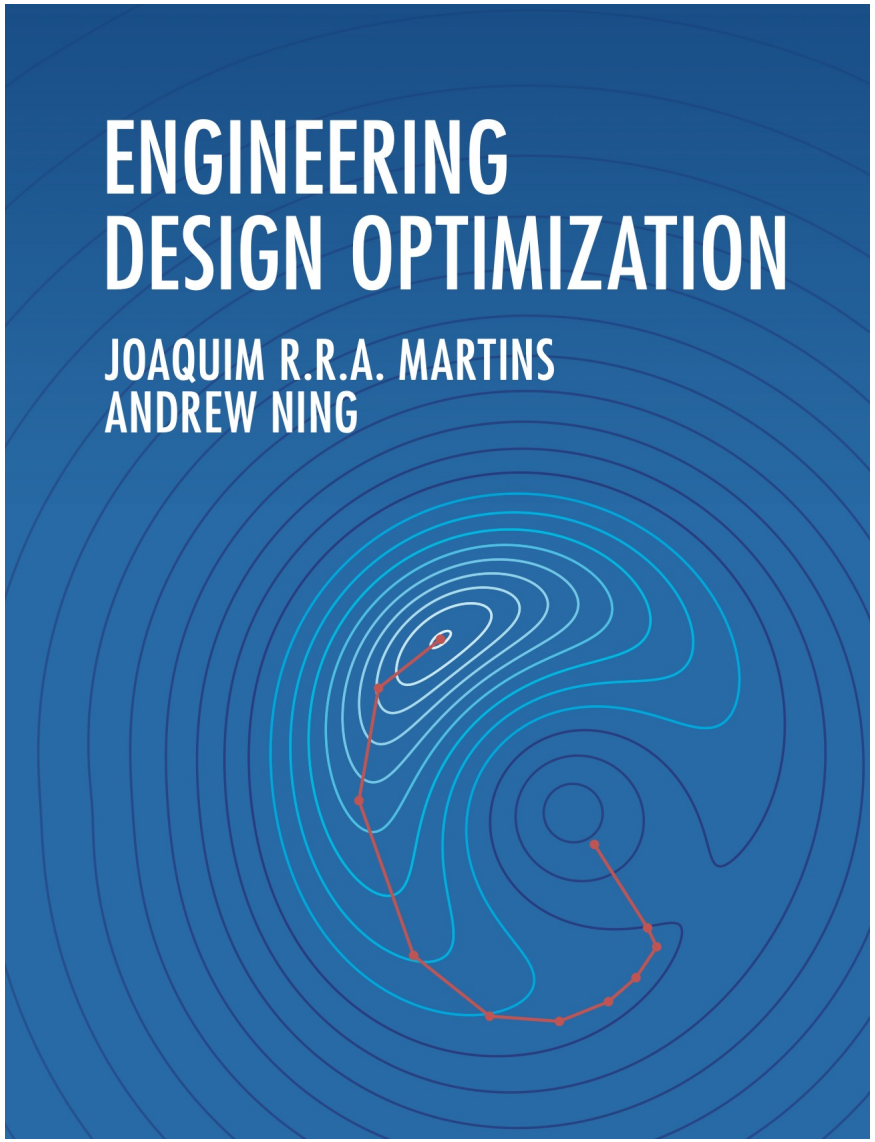
## OpenMDAO: an open-source framework for multidisciplinary design, analysis, and optimization

Justin S. Gray[1] · John T. Hwang[2] · Joaquim R. R. A. Martins[3] · Kenneth T. Moore[4] · Bret A. Naylor[4]

OpenMDAO 論文

https://link.springer.com/article/10.1007/s00158-019-02211-z

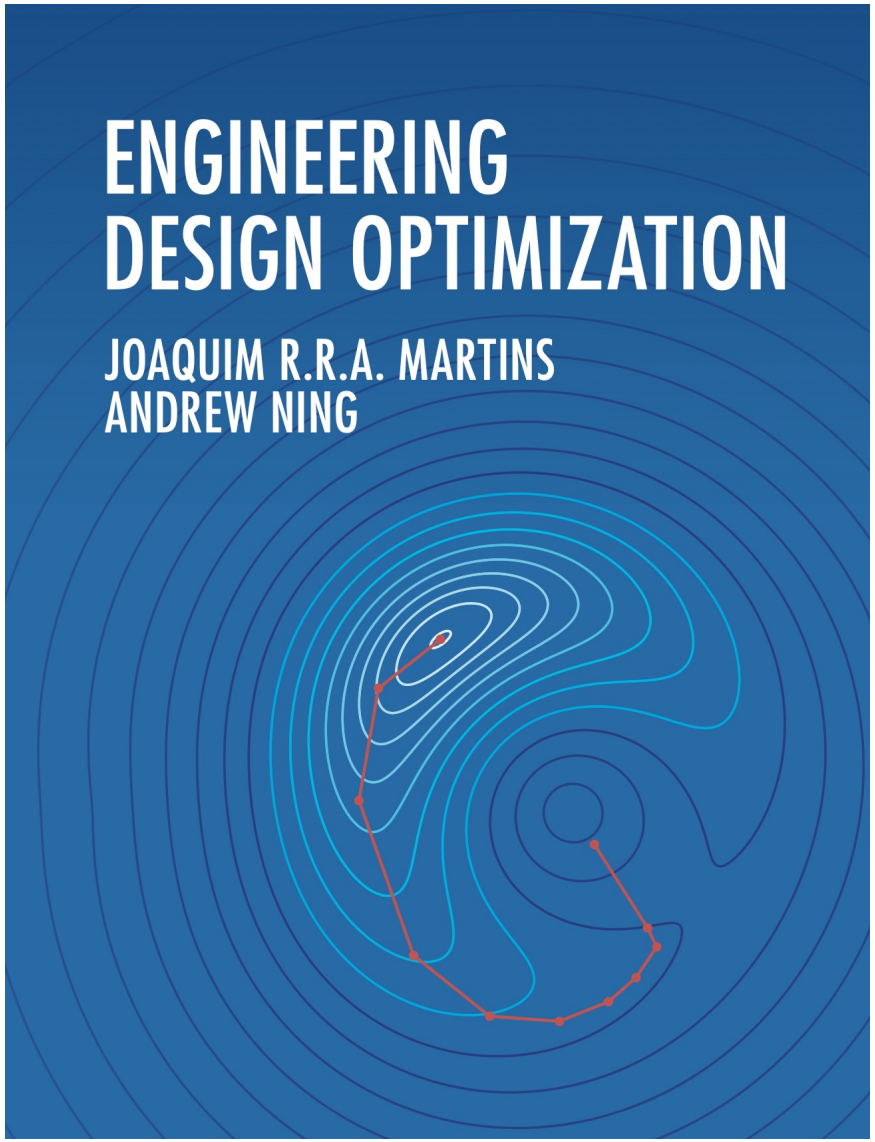
# 参考リソース （理論）




https://mdobook.github.io

設計最適化の教科書
PDF版は無料でダウンロード可能

# 参考リソース （理論）




## OpenMDAOに関連する項目

- Chapter 1 header and Sec. 1.1: Idea of optimization, motivation
- Sec. 1.2: Problem formulation
- Sec. 1.4.1-1.4.3: Gradient-based vs gradient-free optimization algorithms (see Fig. 1.23 for cost comparison), local vs global search, mathematical vs heuristic approaches
- Sec. 1.5: How to select an optimization algorithm
- Sec. 3.3: Introduction to governing equations residuals and function (explicit and implicit)
- Sec. 3.6: Overview of governing equation solvers
- Chapter 4 headerSec. 4.1-4.2: Basic idea of gradient-based optimization
- Example 4.18 and Sec. 4.6: Comparison of gradient-based algorithms, summary
- Chapter 5 header and Sec. 5.1: Basic idea of constrained optimization
- Sec 5.8: Summary of constrained optimization
- Chapter 6: Derivatives. Whole chapter recommended. Particularly important Sec. 6.7 (implicit analytic methods including adjoint), Sec. 6.8 (sparse Jacobians), Sec. 6.9 (UDE), and Sec. 6.10 (summary)
- Sec. 7.1: When to use gradient-free algorithms
- Chapter 13 header and 13.1: Introduction to MDO
- Sec. 13.2: Coupled models and solvers (includes MAUD in Sec. 13.2.6)
- Sec. 13.3.3: Implicit analytic coupled derivatives
- Tip 13.4: OpenMDAO
- Sec. 13.6: MDO summary

# 本日の流れ

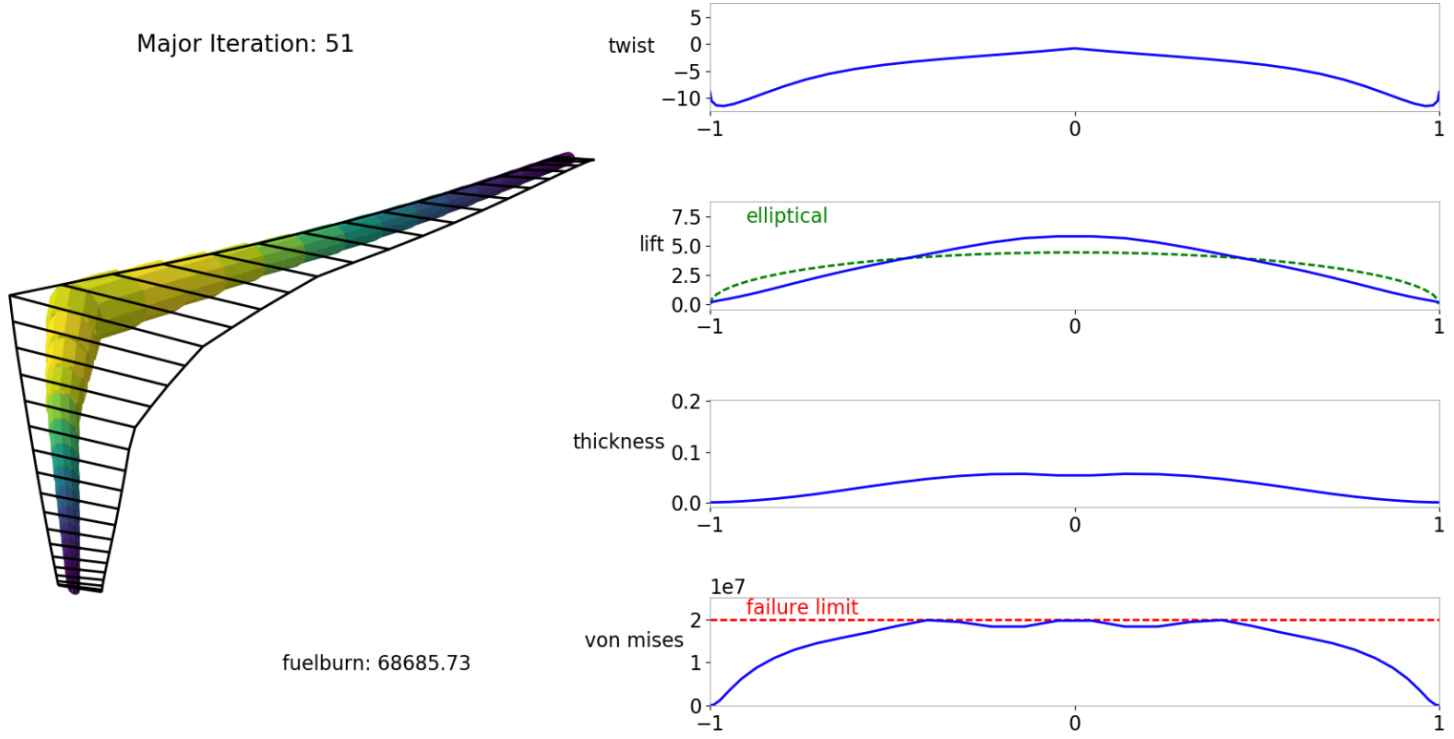
1. OpenMDAOの概要と理論

2. OpenMDAOを用いたオープンソースライブラリの紹介

3. 実践編

# OpenAeroStruct：翼の空力・構造連成解析と最適化

- Vortex lattice method (VLM) + 1D beam FEM



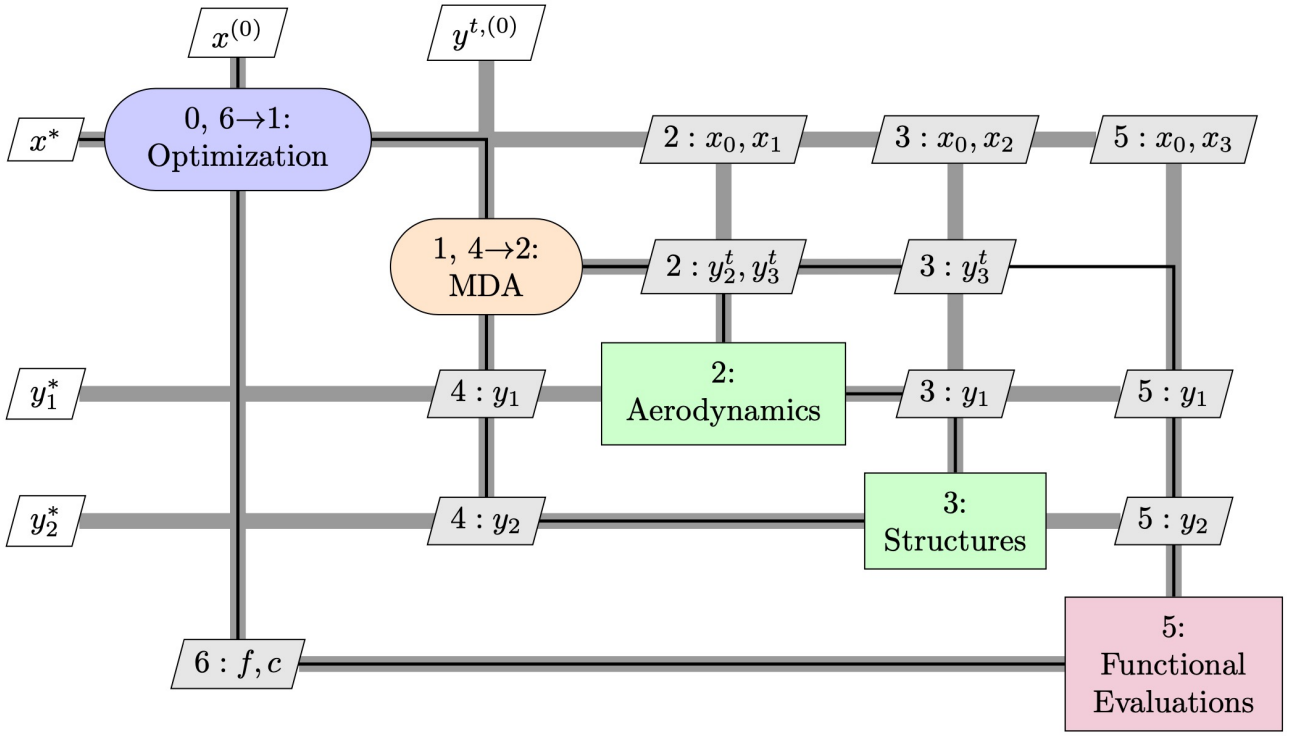

https://github.com/mdolab/OpenAeroStruct

AEROSPACE ENGINEERING
UNIVERSITY of MICHIGAN

MDO Lab

# OpenAeroStructの実装

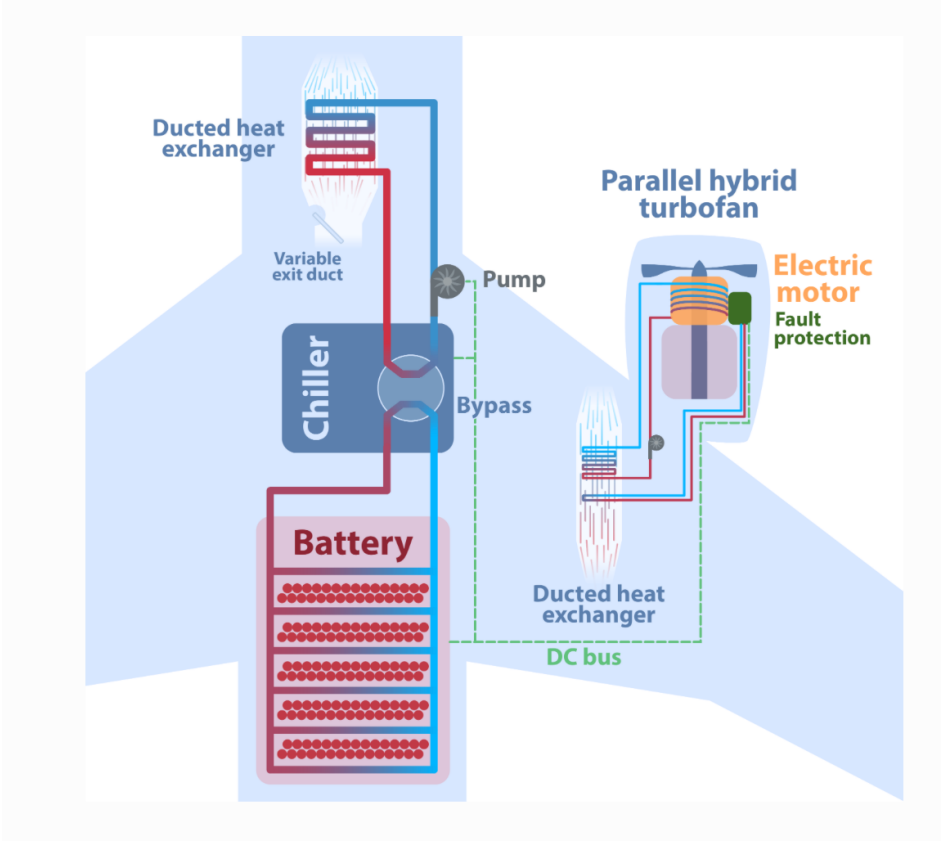
- 各コンポーネントの関数・偏微分を実装する
- コンポーネントを組み立てる
- 残りの連成微分(coupled derivative) 計算は自動

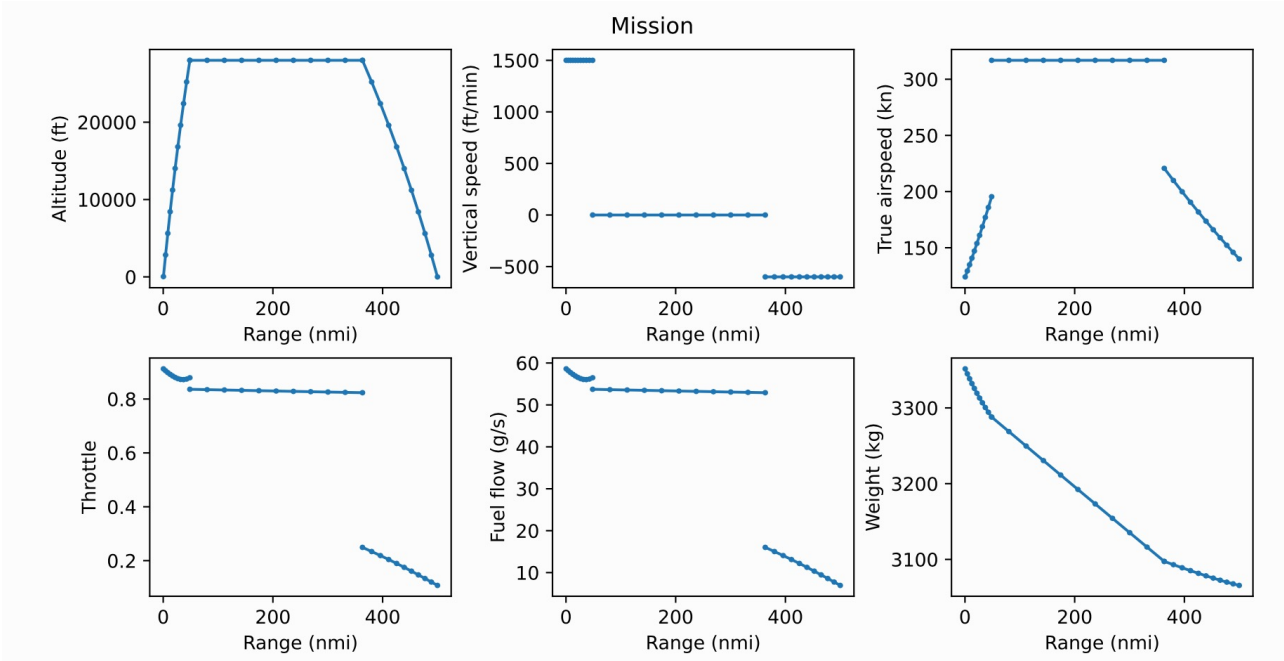



| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| root | prob_vars | | | |
| | wing | indep_vars | twist_cp | |
| | | | thickness_cp | |
| | | thickness_bsp | thickness | |
| | | twist_bsp | twist | |
| | | mesh | mesh | |
| | | | radius | |
| | | tube | | |
| | | struct_setup | nodes | nodes |
| | | | assembly | K |
| | coupled | wing | struct_states | create_rhs forces |
| | | | | fem disp_aug |
| | | | | disp disp |
| | | | def_mesh | def_mesh |
| | | | aero_geom | |
| | | aero_states | assembly | AIC |
| | | | | rhs |
| | | | circulations | circulations |
| | | | forces | wing_sec_forces |
| | | wing_loads | loads | |
| | wing_perf | aero_funcs | liftcoeff | Cl |
| | | | viscousdrag | CDv |
| | | | liftdrag | L |
| | | | | D |
| | | | coeffs | CL1 |
| | | | | CDi |
| | | | CD | CD |
| | | | CL | CL |
| | | struct_funcs | thicknessconstraint | thickness_intersects |
| | | | structural_weight | structural_weight |
| | | | | cg_location |
| | | | vonmises | vonmises |
| | | | failure | failure |
| | total_perf | CL_CD | CL | |
| | | | CD | |
| | | fuelburn | fuelburn | |
| | | | weighted_obj | |
| | | L_equals_W | L_equals_W | |
| | | | total_weight | |
| | | CG | cg | |
| | | moment | CM | |

https://github.com/mdolab/OpenAeroStruct

# OpenConcept：航空機ミッション解析、電動航空機設計



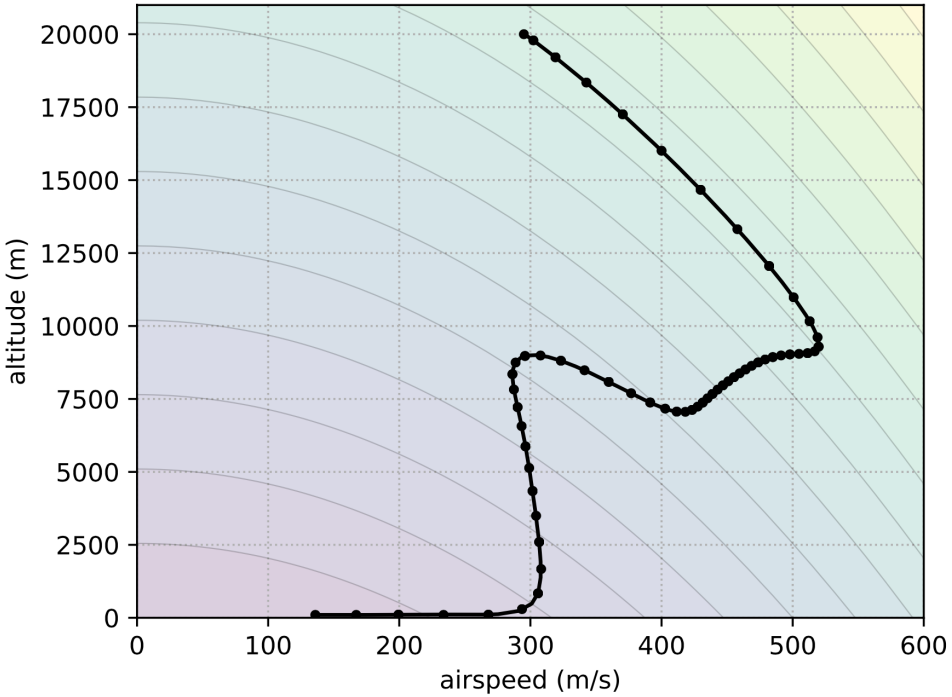




https://github.com/mdolab/openconcept

AEROSPACE ENGINEERING
UNIVERSITY of MICHIGAN

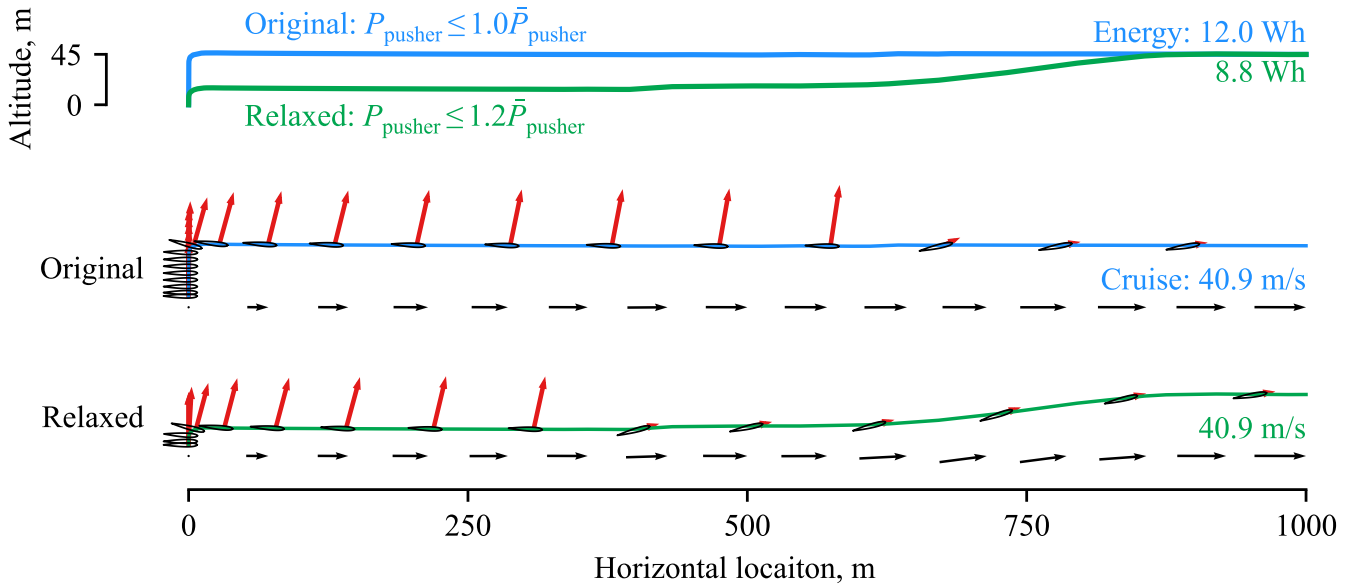
MDO Lab

# Dymos：軌道最適化ライブラリ




例1. 超音速機の最短時間上昇

Falck et al., AIAA 2019-0976

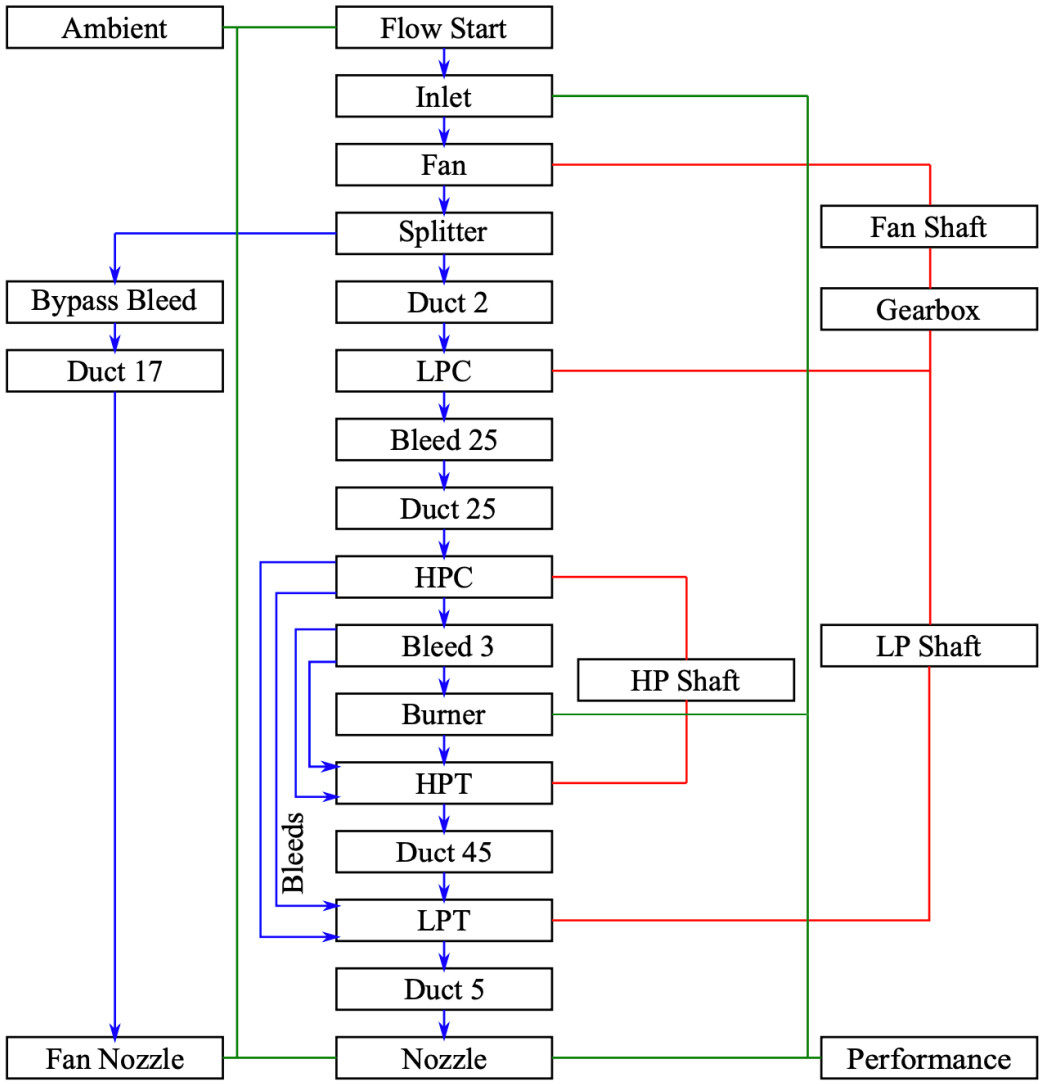



例2. UAVの概念設計・離陸軌道の同時最適化

Kaneko et al., 10th Autonomous VTOL Technical Meeting, 2023

https://github.com/OpenMDAO/dymos

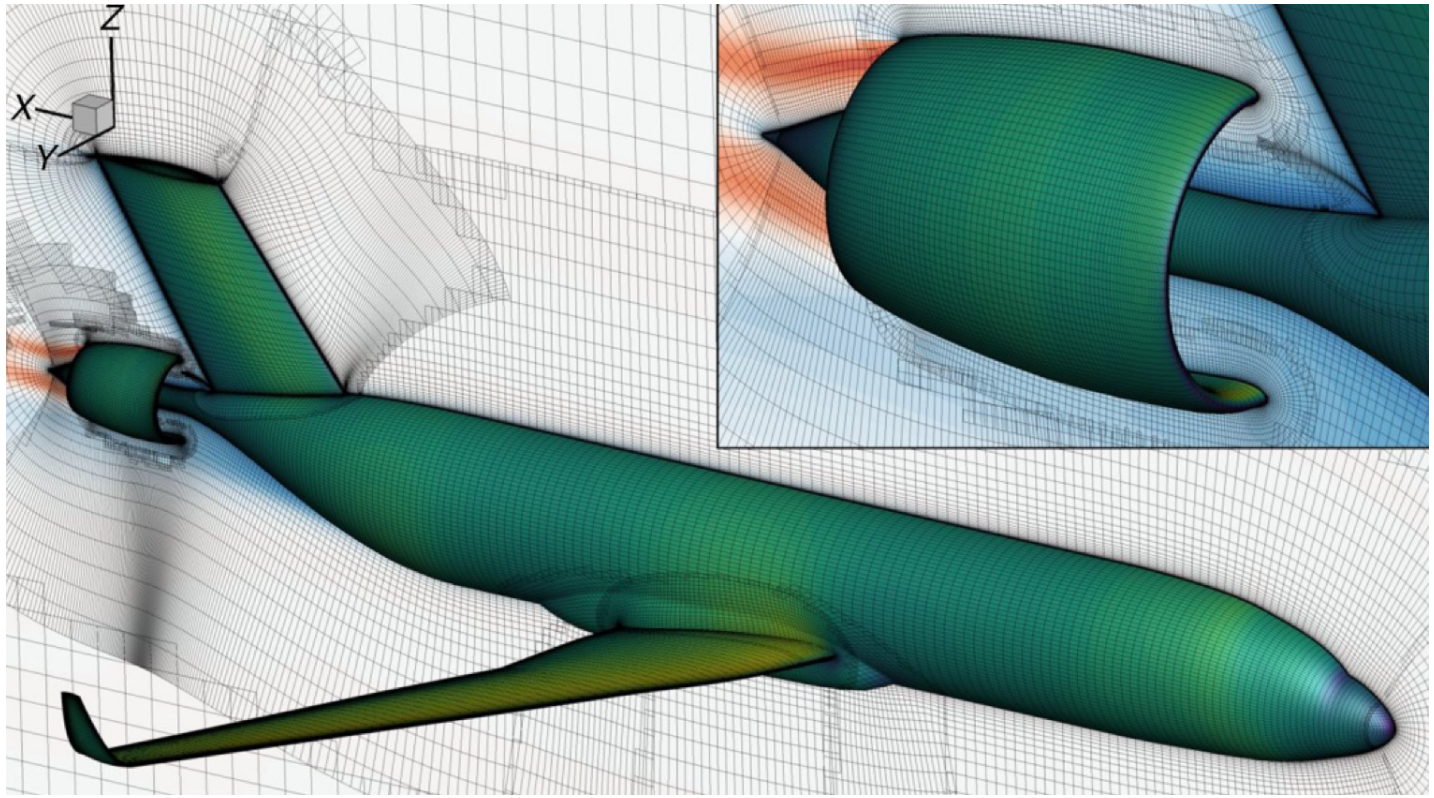
# pyCycle：熱力学サイクルモデリング




https://github.com/OpenMDAO/pyCycle

Hendricks et al., *Aerospace*, 2019, 6, 7

# MPhys：High-fidelity multiphysics




例. 境界層吸い込み(BLI)航空機の最適設計

Yildirim et al., *Journal of Aircraft*, 2022, 59, 4

https://github.com/OpenMDAO/mphys

AEROSPACE ENGINEERING
UNIVERSITY of MICHIGAN

# 本日の流れ

1. OpenMDAOの概要と理論

2. OpenMDAOを用いたオープンソースライブラリの紹介

3. 実践編
    1. Paraboloid 問題
    2. Sellar 問題

# インストール

- Python 3 のインストール
- OpenMDAOのインストール

```
$ pip install openmdao
```

- サンプルコードのダウンロード

```
$ git clone git@github.com:kanekosh/OpenMDAO_workshop_UTokyo.git
```

# 例 1 : Paraboloid 問題

$$
\begin{aligned}
\text{minimize:} \quad & f(x,y) = (x-3)^2 + xy + (y+4)^2 - 3 \\
\text{by varying:} \quad & x, y \\
\text{subject to:} \quad & 0 \leq x + y \leq 10
\end{aligned}
$$

出典：OpenMDAOドキュメント
https://openmdao.org/newdocs/versions/latest/basic_user_guide/single_disciplinary_optimization/first_analysis.html

# 例 1 : f(x,y)の実装

サンプルファイル： paraboloid_1.py

実行： $ python paraboloid_1.py

# 例1：f(x,y)の微分の実装

テンプレファイル： paraboloid_2.py

【タスク】 compute_partials() メソッド内で、偏微分を実装

回答ファイル： paraboloid_2_sol.py

実行(偏微分値のverification)： $ python paraboloid_2.py

# 例 1 : 最適化の実行

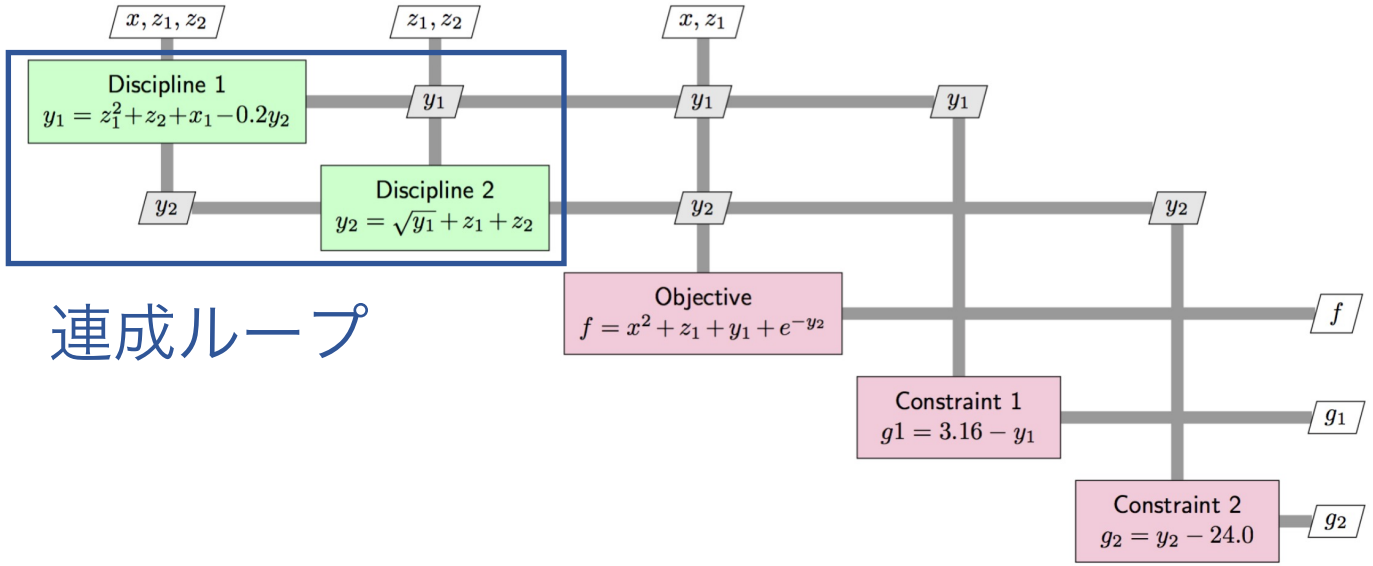
$$
\begin{aligned}
\text{minimize:} \quad & f(x, y) = (x - 3)^2 + xy + (y + 4)^2 - 3 \\
\text{by varying:} \quad & x, y \\
\text{subject to:} \quad & 0 \leq x + y \leq 10
\end{aligned}
$$

サンプルファイル： `paraboloid_optimize.py`

実行： `$ python paraboloid_optimize.py`

# 例２: Sellar 問題（シンプルな連成問題）

$$
\begin{aligned}
\text{minimize:} \quad & f(x, y, z) = x^2 + z_1 + y_1 + e^{-y_2} \\
\text{by varying:} \quad & x, z_1, z_2 \\
\text{subject to:} \quad & 3.16 - y_1 \leq 0 \\
& y_2 - 24 \leq 0 \\
\text{while solving:} \quad & y_1 = z_1^2 + z_2 + x - 0.2y_2 \\
& y_2 = \sqrt{y_1} + z_1 + z_2
\end{aligned}
$$




連成ループ

出典：OpenMDAOドキュメント
https://openmdao.org/newdocs/versions/latest/basic_user_guide/multidisciplinary_optimization/sellar.html

# 例２: Discipline 1 の実装

テンプレファイル： sellar_components.py

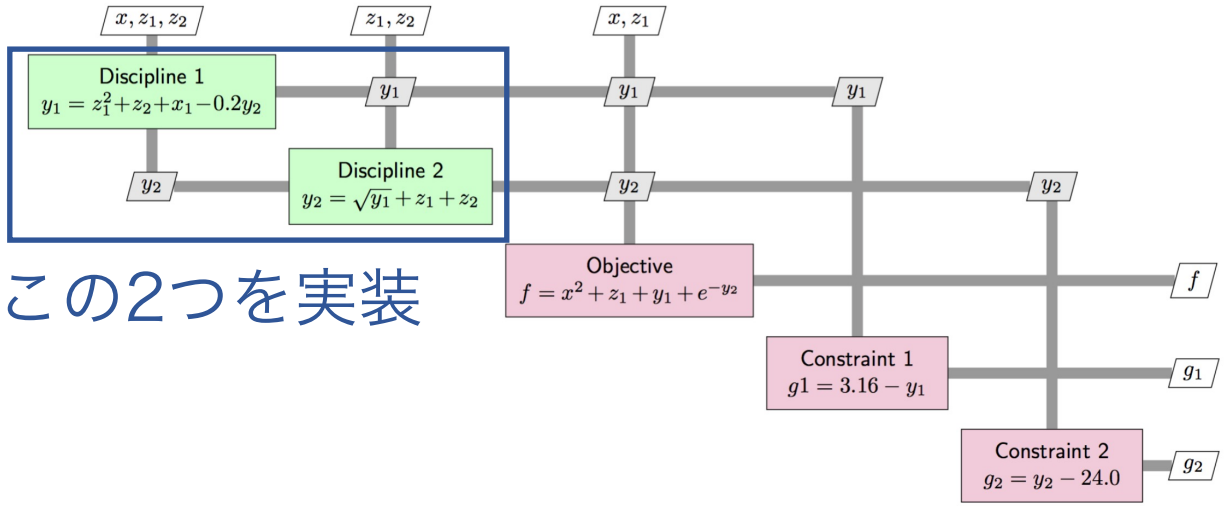
【タスク】 setup()メソッド内に、input/outputを定義する

初期値設定： x=0, z=0, y=1

【タスク】 compute()メソッドに関数計算を実装する

回答ファイル： sellar_components_sol.py

$$
\begin{aligned}
\text{minimize:} \quad & f(x,y,z) = x^2 + z_1 + y_1 + e^{-y_2} \\
\text{by varying:} \quad & x, z_1, z_2 \\
\text{subject to:} \quad & 3.16 - y_1 \leq 0 \\
& y_2 - 24 \leq 0 \\
\text{while solving:} \quad & y_1 = z_1^2 + z_2 + x - 0.2y_2 \\
& y_2 = \sqrt{y_1} + z_1 + z_2
\end{aligned}
$$



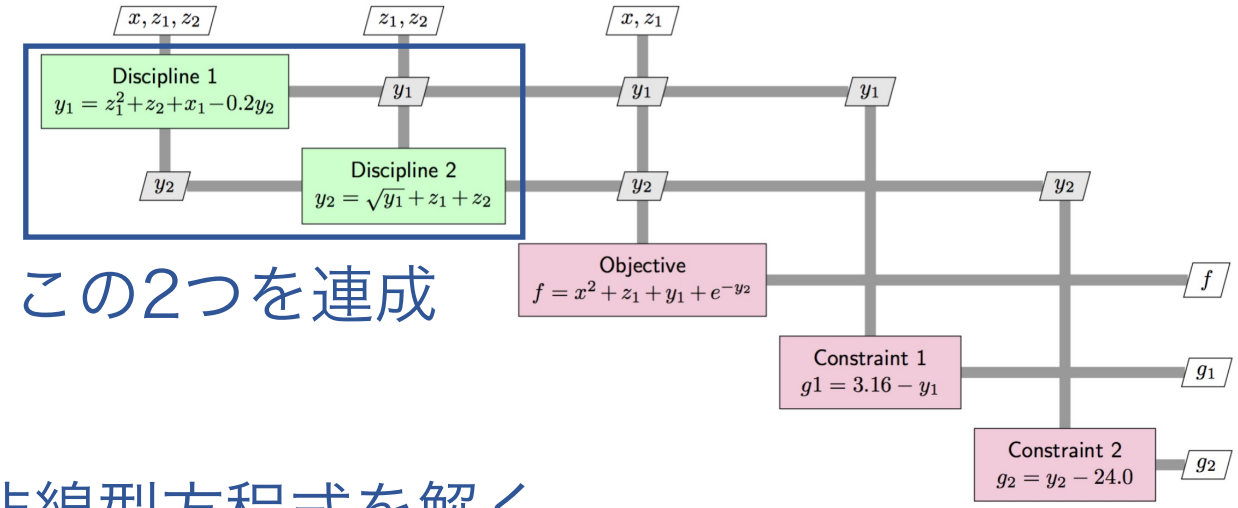

この2つを実装

# 例２: 連成モデルの構築・非線形ソルバの実装

サンプルファイル： `sellar_group.py`

モデルの可視化：　`om.n2(prob)`

$$
\begin{aligned}
\text{minimize:} \quad & f(x, y, z) = x^2 + z_1 + y_1 + e^{-y_2} \\
\text{by varying:} \quad & x, z_1, z_2 \\
\text{subject to:} \quad & 3.16 - y_1 \leq 0 \\
& y_2 - 24 \leq 0 \\
\text{while solving:} \quad & y_1 = z_1^2 + z_2 + x - 0.2y_2 \\
& y_2 = \sqrt{y_1} + z_1 + z_2
\end{aligned}
$$




この2つを連成

この非線型方程式を解く

# OpenMDAOで使用可能な非線形ソルバ

- Nonlinear Block Gauss-Seidel
- Nonlinear Block Jacobi
- Broyden (準Newton)

} 勾配は不要

- Newton　　勾配が必要。
  最も収束が早い(ことが多い)

# 例２：最適化の実行

テンプレファイル： sellar_optimize.py

【タスク】 設計変数、目的関数、制約を定義する

回答ファイル： sellar_optimize_sol.py

```
Optimization terminated successfully    (Exit mode 0)
            Current function value: [3.18339395]
            Iterations: 11
            Function evaluations: 12
            Gradient evaluations: 11
Optimization Complete
---------------------------------
minimum found at
x = 4.4014216287473 86e-15
z = [1.97763888e+00 1.96644286e-14]
minumum objective
f = 3.1833939532752136
```

# 例２：[おまけ] 連成モデルを promotes を使って構築する

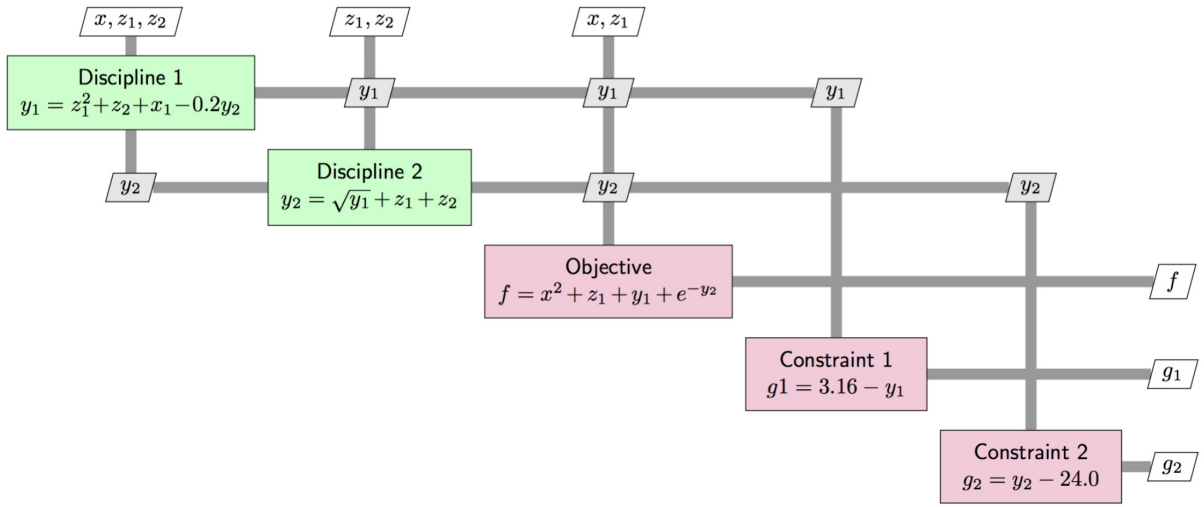
テンプレファイル： sellar_group_via_promotes.py

【タスク】 connect の代わりに、promotes で変数 y1, y2 をリンク

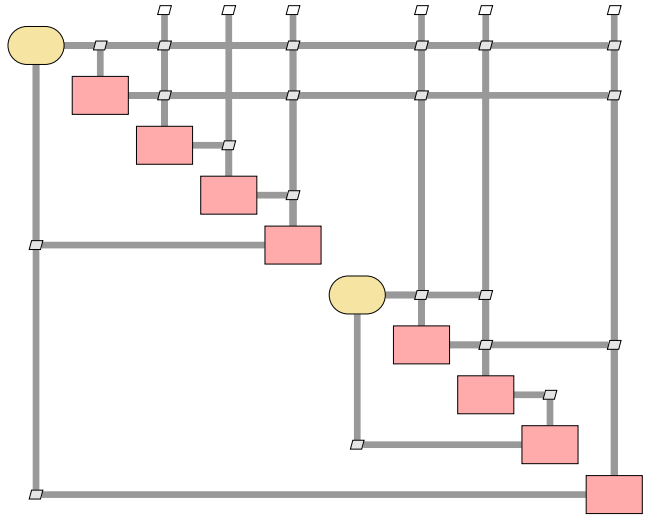
回答ファイル： sellar_group_via_promotes_sol.py

# まとめ

- シンプルな問題なら、自分でスクラッチから実装した方が早い
- 複雑な問題ほど、OpenMDAOが真価を発揮する
  - コンポーネント数が多い場合
  - 連成 (サイクル)がある場合
  - コンポーネントベースの実行 → モデル組替が簡単

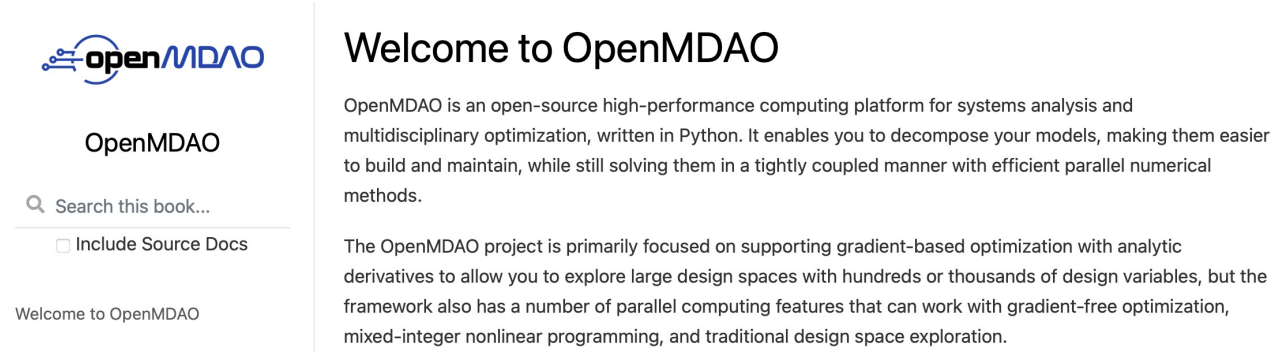



Sellar問題の勾配を、Chain ruleで導出するのはやや複雑



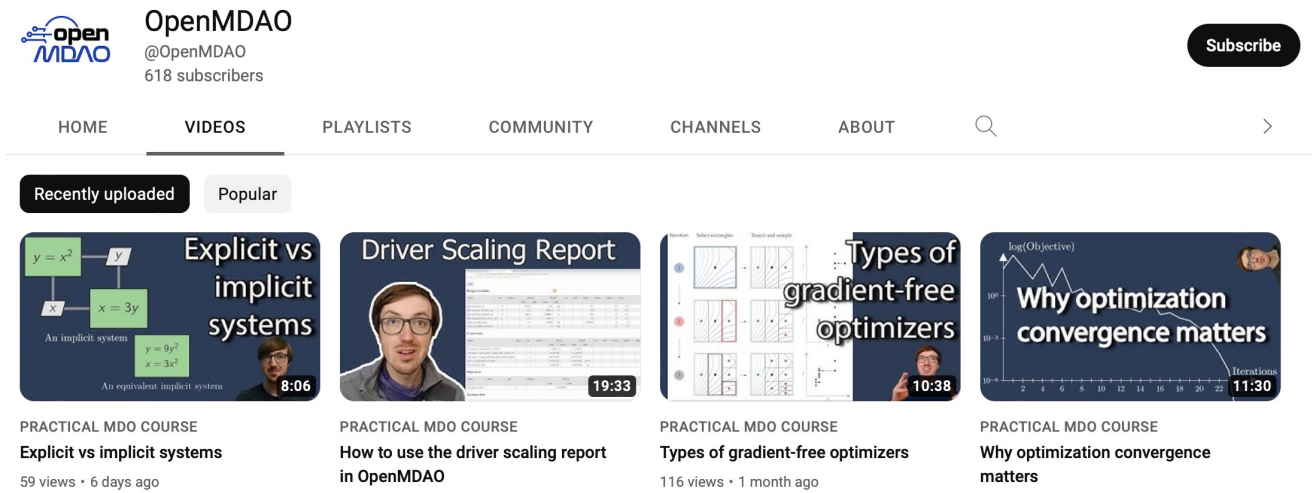
複雑な問題構造の場合、OpenMDAOは強力

# 参考リソース （実践）




OpenMDAO
ドキュメント

https://openmdao.org/newdocs/versions/latest/main.html




OpenMDAO
Youtubeチャンネル

https://www.youtube.com/@OpenMDAO