

# **Systemidentifikation und Simulation nichtlinearer dynamischer Systeme mit Gaußschen Prozessmodellen mit näherungsweise Rückführung normalverteilter Ausgangsgrößen**

Lars Kistner, Andreas Kroll

Fachgebiet Mess- und Regelungstechnik, Universität Kassel

Mönchebergstr. 7, 34125 Kassel

E-Mail: {lars.kistner, andreas.kroll}@mrt.uni-kassel.de

## **1 Einführung**

In diesem Beitrag werden Gaußsche Prozessmodelle (GPM) zur Systemidentifikation und zur Simulation nichtlinearer dynamischer Systeme vorgestellt. Gaußsche Prozessmodelle sind in Standardform für deterministische Regressoren definiert und liefern eine Normalverteilung als Ausgangsgröße. Durch die Varianz einer Prädiktion lässt sich, im Gegensatz zu vielen anderen Methoden aus dem Bereich des maschinellen Lernens und der Systemidentifikation, ihre Vertrauenswürdigkeit abschätzen. Im Falle einer Simulation von dynamischen Systemen in Output-Error-Anordnung mit Gaußschen Prozessmodellen müssen daher Normalverteilungen der Ausgangsgröße verzögert als Eingangsgröße zurückgeführt werden. In diesem Beitrag werden Verfahren aus der Literatur vorgestellt, um bei Modellen mit stochastischen Eingangsgrößen zu arbeiten und diese Konstellation auf die Eignung für die Systemidentifikation hin zu untersuchen. Die Untersuchung erfolgt dabei an einem künstlichen System und einem realen Eintank-Laborsystem mit zwei Eingangsgrößen und einer Ausgangsgröße.

DOI: 10.58895/ksp/1000138532-9 erschienen in:

**Proceedings - 31. Workshop Computational Intelligence : Berlin, 25. - 26. November 2021**

DOI: 10.58895/ksp/1000138532 | <https://www.ksp.kit.edu/site/books/m/10.58895/ksp/1000138532/>

## 2 Gaußsche Prozessmodelle

Gaußsche Prozessmodelle gehören zur Klasse der kernelbasierten, nichtparametrischen Modelle und sind besonders für hochdimensionale Probleme bei verhältnismäßig wenig Daten geeignet. Mit GPM lassen sich beliebige statische Nichtlinearitäten der Form  $y = f(\mathbf{x})$  darstellen. Die Annahme dabei ist, dass Ähnlichkeiten im Eingangsraum  $\mathbf{x}$  sich auch im Ausgangsraum  $y$  wiederfinden. Um diese Ähnlichkeit zu beschreiben, wird eine Kernel- oder Kovarianzfunktion verwendet.

Bei GPM wird angenommen, dass jede endliche Menge von  $N$  Auswertungen einer Zufallsfunktion  $[f(\mathbf{x}_1), f(\mathbf{x}_2), \dots, f(\mathbf{x}_N)]$  einer multivariaten Gaußverteilung folgt und als Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion geschrieben werden kann [3]:

$$p(\mathbf{f}(\mathbf{X})|\mathbf{X}) = \mathcal{N}(\mathbf{m}_f, \mathbf{\Sigma}_f) \quad (1)$$

$\mathbf{X}$  ist die Matrix bestehend aus allen Vektoren der Eingangsgrößen ( $\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N]^T$ ).  $\mathbf{f}(\mathbf{X})$  ist der Vektor der ungestörten Beobachtungen.  $\mathbf{m}_f$  sind die Erwartungswerte und  $\mathbf{\Sigma}_f$  die Kovarianzmatrix des GPM. Eine Funktion, die einen Gauß-Prozess darstellt, wird geschrieben als:

$$\mathbf{f}(\mathbf{X}) \sim \mathcal{GP}(\mathbf{m}_f, \mathbf{\Sigma}_f) \quad (2)$$

Da meistens keine Informationen über den Erwartungswert eines Gauß-Prozesses vorliegen, wird  $\mathbf{m}_f \equiv \mathbf{0}$  angenommen. Die Kovarianzmatrix  $\mathbf{\Sigma}_f$  wird über die Kernelfunktion  $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$  erzeugt und dann Kernelmatrix  $\mathbf{K}$  genannt. Da im Kernel ein normalverteilte Rauschannahme getroffen wird, wird im Zusammenhang mit der Kernelmatrix  $\mathbf{K}$  im Folgenden  $\mathbf{y}$  verwendet. Die getroffene Annahme ist  $\mathbf{y} = \mathbf{f}(\mathbf{X}) + \mathcal{N}(\mathbf{0}, \sigma_n)$ . Die einzelnen Beobachtungen werden als  $y_1$  bis  $y_N$  notiert. Unter Beachtung von (2) ergibt sich so:

$$\mathbf{y} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{K}) \quad (3)$$

Der gebräuchlichste Kernel ist der Squared-Exponential (SE)-Kernel. Wird er mit einem freien Parameter pro Eingangsdimension  $d \in 1 \dots D$  ausgestattet, so

wird er als Automatic-Relevance-Determination Squared-Exponential (ARD-SE) Kernel bezeichnet und wird beschrieben durch:

$$k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \sigma_f^2 \cdot \exp \left( -\frac{1}{2} \sum_{d=1}^D \frac{(x_{i,d} - x_{j,d})^2}{l_d^2} \right) + \sigma_n^2 \delta_{ij} \quad (4)$$

$\sigma_f$ ,  $l_d$  und  $\sigma_n$  sind freie Hyperparameter.  $\sigma_f$  ist ein Skalierungsfaktor für den Kernel,  $l_d$  ein Skalierungsfaktor pro Eingangsdimension und  $\sigma_n^2$  beschreibt die geschätzte Varianz, welche auf den Beobachtungen erwartet wird. Ein GPM wird durch Anpassung seiner Hyperparameter trainiert, sodass die Beobachtungen  $(\mathbf{X}, \mathbf{y})$  bestmöglich erklärt werden. Eine Vorgehensweise dazu ist die Hyperparameter über Maximierung der Marginal-Log-Likelihood:

$$\ln p(\mathbf{y}|\mathbf{X}) = -\frac{N}{2} \ln(2\pi) - \frac{1}{2} \ln(\det \mathbf{K}) - \frac{1}{2} \mathbf{y}^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{y} \quad (5)$$

auszulegen. Da alle Beobachtungen und auch die Vorhersage eines GPM als normalverteilte Zufallsvariable aufgefasst werden, gilt folgende Verbundverteilung der Zufallsvariablen  $\mathbf{y}$  und  $\mathbf{y}_*$ :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{y}_* \end{pmatrix} \sim \mathcal{N} \left( \mathbf{0}, \begin{bmatrix} k(\mathbf{X}, \mathbf{X}) & k(\mathbf{X}, \mathbf{x}_*) \\ k(\mathbf{x}_*, \mathbf{X}) & k(\mathbf{x}_*, \mathbf{x}_*) \end{bmatrix} \right) \quad (6)$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{y}_* \end{pmatrix} \sim \mathcal{N} \left( \mathbf{0}, \begin{bmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{k}_* \\ \mathbf{k}_*^T & k_{**} \end{bmatrix} \right) \quad (7)$$

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_N \\ y_* \end{pmatrix} \sim \mathcal{N} \left( \mathbf{0}, \begin{bmatrix} k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1) & k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) & \dots & k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_N) & k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_*) \\ k(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) & k(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_2) & \dots & k(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_N) & k(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_*) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ k(\mathbf{x}_N, \mathbf{x}_1) & k(\mathbf{x}_N, \mathbf{x}_2) & \dots & k(\mathbf{x}_N, \mathbf{x}_N) & k(\mathbf{x}_N, \mathbf{x}_*) \\ k(\mathbf{x}_*, \mathbf{x}_1) & k(\mathbf{x}_*, \mathbf{x}_2) & \dots & k(\mathbf{x}_*, \mathbf{x}_N) & k(\mathbf{x}_*, \mathbf{x}_*) \end{bmatrix} \right) \quad (8)$$

Dabei ist  $\mathbf{x}_*$  der Vektor der Eingangsgrößen für den zu prädizierenden Wert  $y_*$ . Die bedingte Wahrscheinlichkeitsverteilung für  $y_*$  gegeben  $\mathbf{x}_*$ ,  $\mathbf{X}$  und  $\mathbf{y}$  wird

damit zu:

$$p(y_* | \mathbf{x}_*, \mathbf{X}, \mathbf{y}) \sim \mathcal{N}(k(\mathbf{x}_*, \mathbf{X})k(\mathbf{X}, \mathbf{X})^{-1}\mathbf{y},$$

$$k(\mathbf{x}_*, \mathbf{x}_*) - k(\mathbf{x}_*, \mathbf{X})k(\mathbf{X}, \mathbf{X})^{-1}k(\mathbf{X}, \mathbf{x}_*)) \quad (9)$$

$$\sim \mathcal{N}(\mathbf{k}_* \mathbf{K}^{-1} \mathbf{y}, k_{**} - \mathbf{k}_* \mathbf{K}^{-1} \mathbf{k}_*^T) \quad (10)$$

Für einen beliebigen Regressorenvektor  $\mathbf{x}_*$  ist der Erwartungswert der Prädiktion  $y_*$  somit gegeben durch:

$$E(y_*) = \mu(\mathbf{x}_*) = \mathbf{k}_* \mathbf{K}^{-1} \mathbf{y} \quad (11)$$

und die Varianz durch:

$$\text{Var}(y_*) = \sigma^2(\mathbf{x}_*) = k_{**} - \mathbf{k}_* \mathbf{K}^{-1} \mathbf{k}_*^T \quad (12)$$

Für eine detaillierte Herleitung und weitreichendere Erklärungen sei auf die Literatur verwiesen [1, 18, 3].

### 3 Systemidentifikation mit Gaußschen Prozessmodellen

Gaußsche Prozessmodelle sind in Standardform für deterministische Regressoren definiert (vgl. Bild 1 links). Für Eingangsgrößen, welche beim Training mit einem mittelwertfreien Rauschen behaftet sind, kann diese Anforderung verletzt werden ohne größere Auswirkungen auf die Unsicherheitsabschätzung der Ausgangsgröße zu haben. Im Falle einer Simulation oder beim Training in Output-Error (OE)-Anordnung von dynamischen Systemen mit Gaußschen Prozessmodellen müssen jedoch Normalverteilungen der Ausgangsgröße verzögert als Eingangsgröße zurückgeführt werden (vgl. Bild 1 rechts). Eine Vernachlässigung der Unsicherheit durch Einschränkung auf den Erwartungswert als Eingangsgröße führt zu unrealistisch kleinen Unsicherheiten der Prädiktion mit fortschreitender Simulationszeit.

In [6] wurde erstmals eine Taylorreihenentwicklung und eine Monte-Carlo-Integration vorgestellt, um GPM mit normalverteilten Eingängen zu realisie-

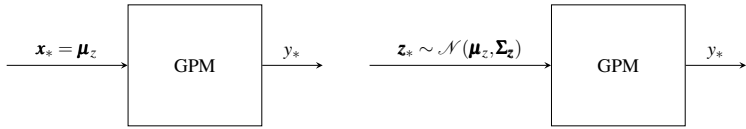


Bild 1: GPM mit **links**: deterministischem Regressor **rechts**: normalverteilter Zufallsgröße als Regressor (stochastisch)

ren. In der Arbeit [5] wurde darüber hinaus eine näherungsweise Lösung mit exakten Momenten vorgestellt. Stochastische Eingänge werden dabei über das Lösen des Integrals:

$$p(y_* | \mathbf{X}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\mu}_z, \boldsymbol{\Sigma}_z) = \int p(y_* | \mathbf{X}, \mathbf{y}, \mathbf{z}_*) p(\mathbf{z}_* | \boldsymbol{\mu}_z, \boldsymbol{\Sigma}_z) d\mathbf{z}_* \quad (13)$$

$$\text{mit: } p(y_* | \mathbf{X}, \mathbf{y}, \mathbf{z}_*) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2(\mathbf{z}_*)}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(y_* - \mu(\mathbf{z}_*))^2}{\sigma^2(\mathbf{z}_*)}\right) \quad (14)$$

realisiert (vgl. (10) für den Fall eines deterministischen Regressors). Um den Unterschied zum deterministischen Regressor  $\mathbf{x}_*$  zu verdeutlichen, wird der Zufallsvektor im Folgenden als  $\mathbf{z}_*$  mit den Erwartungswerten  $\boldsymbol{\mu}_z$  und der Kovarianzmatrix  $\boldsymbol{\Sigma}_z$  bezeichnet.  $\mu(\mathbf{z}_*)$  bezeichnet dabei die Funktion für den Erwartungswert eines GPM gegeben durch (11) und  $\sigma^2(\mathbf{z}_*)$  die Varianz gegeben durch (12).

Durch die Berechnung des Integrals (13) lässt sich die Information über die Unsicherheit der Prädiktion auch bei der Simulation mittels Einschrittprädiktor näherungsweise erhalten. In Bild 2 wird das Vorgehen für die ersten drei Simulationsschritte im Blockschaltbild gezeigt.

Die neue prädiktive Verteilung ist wegen der Integration über den Regressorenvektor nicht mehr gaußverteilt und daher nur noch approximativ lösbar [5]. Im Folgenden werden drei Verfahren vorgestellt, um (13) zu lösen.

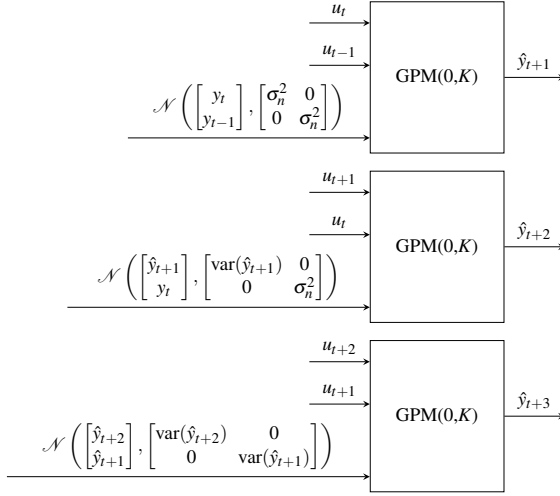


Bild 2: Vorgehen für Propagation der Unsicherheit bei der Simulation eines dynamischen Modells mit zwei verzögerten Ein- und Ausgangsgrößen als Regressoren mittels Einschrittprädiktor für die ersten drei Simulationsschritte

### 3.1 Näherung mittels Monte-Carlo-Integration

Mittels Monte-Carlo-Integration [8] können hochdimensionale Integrale der Form:

$$\mathcal{A} = \int_{\mathbf{x} \in \Omega} p(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (15)$$

approximativ gelöst werden. Wobei  $p(\mathbf{x})$  das statistische Gewicht und  $f(\mathbf{x})$  den Wert zum Zustand  $\mathbf{x}$  aus dem Zustandsraum  $\Omega$  beschreibt. Im Fall einer Stichprobe  $[\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \dots, \mathbf{s}_S] \in \Omega$ , welche die Häufigkeitsverteilung von  $p(\mathbf{x})$  abbildet, gilt für große  $S$ :

$$\mathcal{A} \approx \frac{1}{S} \sum_{i=1}^S f(\mathbf{s}_i) \quad (16)$$

Übertragen auf GPM wird eine Stichprobe  $S$  benötigt, welche die Verteilung der Regressoren näherungsweise abbildet:

$$[\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \dots, \mathbf{s}_S] \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_z, \boldsymbol{\Sigma}_z) \quad (17)$$

damit kann (13) näherungsweise durch:

$$p(y_* | \mathbf{X}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\mu}_z, \boldsymbol{\Sigma}_z) \approx \frac{1}{S} \sum_{i=1}^S p(y_* | \mathbf{X}, \mathbf{y}, \mathbf{s}_i) = \frac{1}{S} \sum_{i=1}^S \mathcal{N}(\mu(\mathbf{s}_i), \sigma^2(\mathbf{s}_i)) \quad (18)$$

gelöst werden.  $\mu(\mathbf{s}_i)$  bezeichnet dabei die Formel für den Erwartungswert eines GPM gegeben durch (11) und  $\sigma^2(\mathbf{s}_i)$  die Varianz gegeben durch (12).

### 3.2 Näherung mittels Taylorreihenentwicklung

Auch eine Taylorreihenentwicklung kann zur Approximation des Integrals genutzt werden. Wie in [6] gezeigt wird, liefert ein Taylorpolynom erster Ordnung für den Erwartungswert keine zusätzliche Korrektur über der nullten Ordnung, da die Funktionsableitungen zu Null werden. Daher bleibt der Erwartungswert näherungsweise bei:

$$E(y_*) = \mu(\mathbf{z}_*) \approx k(\boldsymbol{\mu}_z, \mathbf{X}) \mathbf{K}^{-1} \mathbf{y} \quad (19)$$

Für die Varianz wird in [6] ein Taylorpolynom zweiter Ordnung gewählt:

$$\begin{aligned} \text{Var}(y_*) = \sigma^2(\mathbf{z}_*) \approx & \sigma^2(\boldsymbol{\mu}_z) + \frac{1}{2} \text{tr} \left( \left. \frac{\partial^2 \sigma^2(\mathbf{z}_*)}{\partial \mathbf{z}_* \partial \mathbf{z}_*^T} \right|_{\mathbf{z}_* = \boldsymbol{\mu}_z} \boldsymbol{\Sigma}_z \right) \\ & + \left. \frac{\partial \mu(\mathbf{z}_*)}{\partial \mathbf{z}_*} \right|_{\mathbf{z}_* = \boldsymbol{\mu}_z}^T \boldsymbol{\Sigma}_z \left. \frac{\partial \mu(\mathbf{z}_*)}{\partial \mathbf{z}_*} \right|_{\mathbf{z}_* = \boldsymbol{\mu}_z} \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \text{mit: } \frac{\partial \mu(\mathbf{z}_*)}{\partial z_{*d}} &= \frac{\partial \mathbf{k}(\mathbf{z}_*)}{\partial z_{*d}} \mathbf{K}^{-1} \mathbf{y} \\ \frac{\partial^2 \sigma^2(\mathbf{z}_*)}{\partial z_{*d} \partial z_{*e}} &= \frac{\partial^2 k(\mathbf{z}_*, \mathbf{z}_*)}{\partial z_{*d} \partial z_{*e}} - 2 \frac{\partial \mathbf{k}(\mathbf{z}_*, \mathbf{K})}{\partial z_{*d}} \mathbf{K}^{-1} \frac{\partial \mathbf{k}(\mathbf{K}, \mathbf{z}_*)}{\partial z_{*e}} \\ &\quad - 2 \frac{\partial^2 \mathbf{k}(\mathbf{z}_*, \mathbf{K})}{\partial z_{*d} \partial z_{*e}} \mathbf{K}^{-1} \mathbf{k}(\mathbf{K}, \mathbf{z}_*) \end{aligned}$$

Die partiellen Ableitungen müssen nach Regressordimension  $d, e \in 1 \dots D$  erfolgen und sind vom Kernel abhängig. Für eine detaillierte Herleitung sei auf [5] verwiesen.

### 3.3 Näherung mittels exakter Momente

Wie [5] zeigt, ist es für den ARD-SE-Kernel möglich, das Integral (13) für stochastische Regressoren exakt zu bestimmen. Dabei wird das Integral (13) analytisch exakt gelöst, jedoch nicht die Erwartungswert-  $\mu(\mathbf{z}_*)$  und Varianz- funktion  $\sigma^2(\mathbf{z}_*)$ . Der Erwartungswert ist gegeben durch:

$$E(y_*) = \mu(\mathbf{z}_*) = (\mathbf{K}^{-1} \mathbf{y})^T \mathbf{q} \quad (21)$$

$$\begin{aligned} \text{mit: } \mathbf{q}^T &= [q_1, q_2, \dots, q_N], \\ q_i &= \sigma_f^2 \sqrt{|\boldsymbol{\Sigma}_z \boldsymbol{\Lambda}^{-1} + \mathbf{I}|} \exp \left( -\frac{1}{2} (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}_z)^T (\boldsymbol{\Sigma}_z + \boldsymbol{\Lambda})^{-1} (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}_z) \right) \end{aligned}$$

Die Varianz kann mit:

$$\text{Var}(y_*) = \sigma^2(\mathbf{z}_*) = (\mathbf{K}^{-1} \mathbf{y})^T \mathbf{Q} (\mathbf{K}^{-1} \mathbf{y}) - \mu(\mathbf{z}_*) + \sigma_f^2 - \text{tr}(\mathbf{K}^{-1} \mathbf{Q}) + \sigma_n^2 \quad (22)$$

$$\begin{aligned} \text{mit: } Q_{ij} &= \frac{k(\mathbf{z}_i, \boldsymbol{\mu}_z) k(\boldsymbol{\mu}_z, \mathbf{z}_j)}{\sqrt{|\mathbf{2} \boldsymbol{\Sigma}_z \boldsymbol{\Lambda}^{-1} + \mathbf{I}|}} \exp \left( -\frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} (\mathbf{z}_i + \mathbf{z}_j) - \boldsymbol{\mu}_z \right)^T \right. \\ &\quad \cdot \left( \boldsymbol{\Sigma}_z + \frac{1}{2} \boldsymbol{\Lambda}^2 \right)^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_z \boldsymbol{\Lambda}^{-1} \left. \left( \frac{1}{2} (\mathbf{z}_i + \mathbf{z}_j) - \boldsymbol{\mu}_z \right) \right) \end{aligned}$$



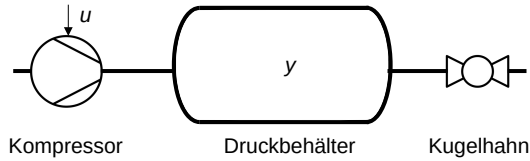


Bild 3: Schematischer Aufbau als Rohrleitungs- und Instrumentierungsschema

$$\text{mit: } \mathbf{\Lambda}^{-1} = \begin{bmatrix} l_1^{-2} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & l_D^{-2} \end{bmatrix}$$

bestimmt werden. Für die vollständige Prädiktion, welche Erwartungswert und Varianz beinhaltet, müssen  $\mathbf{q} \in \mathbb{R}_{N \times 1}$  und  $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}_{N \times N}$  bestimmt werden.  $\mathbf{\Lambda}^{-1}$  ist der „Parametervektor“ der Längenparameter des ARD-SE Kernels in Form einer Diagonalmatrix.

### 3.4 Naive Einschrittprädiktion

Bei der naiven Einschrittprädiktion wird ein GPM, wie bei der klassischen Regression, nur mit deterministischen Regressoren verwendet. Die prädizierten Ausgangsgrößen, welche verzögert als Eingangsgrößen verwendet werden, werden ausschließlich durch ihren Erwartungswert beschrieben.

## 4 Fallstudie: Kompressor-Druckbehälter-System

Im ersten akademischen Fallbeispiel (Simulationsstudie) wird ein System betrachtet, welches sich an einem Kompressor orientiert, der einen Druckbehälter befüllt. Außerdem befindet sich am Druckbehälter ein teilgeöffneter Kugelhahn. Der Aufbau ist als Rohrleitungs- und Instrumentierungsschema in Bild 3 dargestellt. Die Leistung des Kompressors wird über das Steuersignal  $u$  reguliert. Die abhängige Variable ist der Druck  $y$  im Druckbehälter. Das folgende Modell hat keinen Anspruch physikalisch akkurat zu sein und ist durch

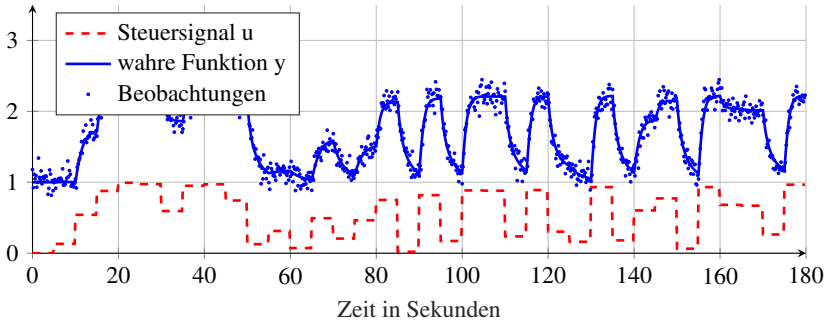


Bild 4: Trainingsdatensatz A,  $u \in [0, 1]$

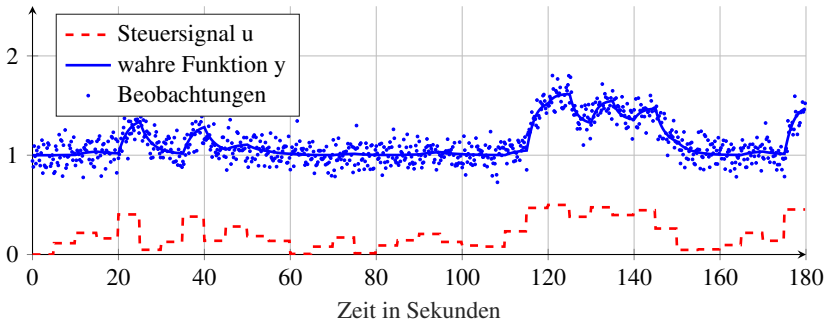


Bild 5: Trainingsdatensatz B,  $u \in [0, 0,5]$

folgende Differentialgleichung gegeben, die bekannte Phänomene beschreiben sollen:

$$\begin{aligned} \dot{y}(t) &= 1 - \exp(-2\pi u(t)^4) - 0,1(y(t)^3 - 1) \\ \dot{y}(t) + 0,1y(t)^3 &= 1,1 - \exp(-2\pi u(t)^4) \end{aligned} \quad (23)$$

Nach der Festlegung auf 6 verzögerte Eingangsgrößen ( $y_t, \dots, y_{t-6}, u_t, \dots, u_{t-6}$ ) zur Prädiktion von  $y_{t+1}$ , Auswahl des ARD-SE-Kernels und des Downhill-Simplex-Suchverfahren zur Optimierung der Kernelparameter werden nun Simulationen anhand von zwei verschiedenen Trainingsdatensätzen verglichen. Die Trainingsdaten wurden erzeugt in dem die Differentialgleichung mit einer Simulationsschrittweite von 0,001 s mit dem expliziten Euler-Verfahren simu-

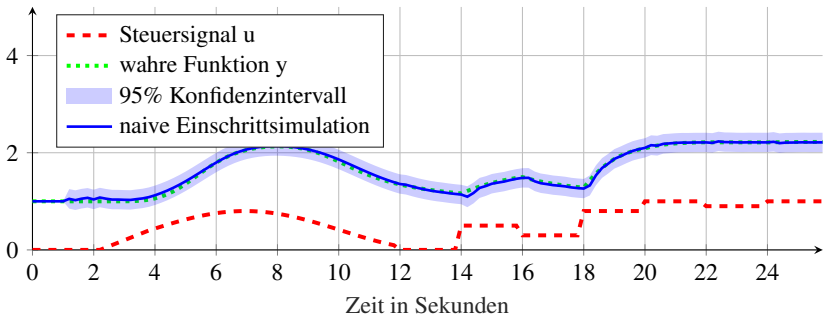


Bild 6: Simulation einer Steuerfolge bei naiver Einschrittsimulation unter Verwendung von Trainingsdatensatz A

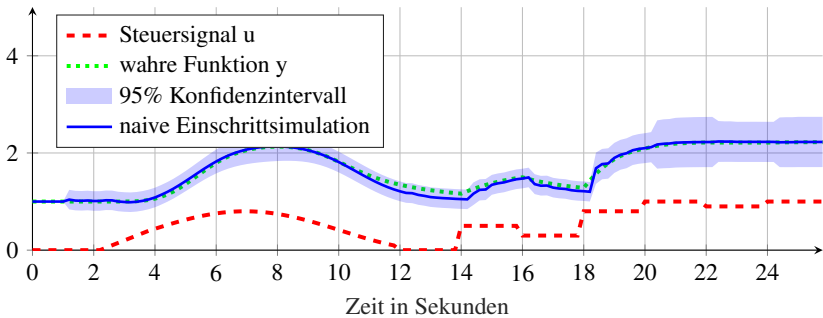


Bild 7: Simulation einer Steuerfolge bei naiver Einschrittsimulation unter Verwendung von Trainingsdatensatz B

liert wurde. Die Datensätze haben eine Länge von 180 s bei einer zeitlichen Auflösung von 0,1 s, die mit einem APRBS-Signal mit einer Haltezeit von 5 s erzeugt wurden. Trainingsdatensatz A (siehe Bild 4) deckt einen Wertebereich von  $u \in [0, 1]$  und Trainingsdatensatz B (siehe Bild 5) von  $u \in [0, 0,5]$  ab. Die Testsignale liegen immer im Bereich von  $u \in [0, 1]$ , sodass beim Trainingsdatensatz B extrapoliert werden muss. Die Simulation für eine gegebene Steuerfolge bei Reduzierung auf den Erwartungswert ist für Datensatz A in Bild 6 und für Datensatz B in Bild 7 zu sehen. Die Modelle verwenden bei allen Betrachtungen die gleichen Kernel-Parameter. Die Erwartungswerte bei den verschiedenen Simulationsverfahren lassen sich rein qualitativ nicht unterscheiden (vgl. Bild 8). Theoretisch sollten die Erwartungswerte von nai-

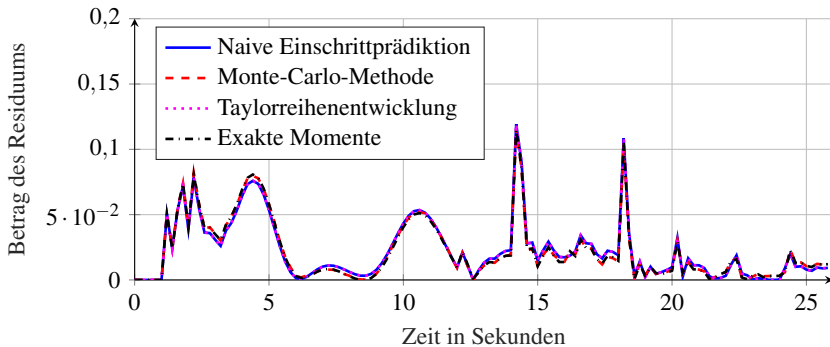


Bild 8: Beträge der Residuen für die verschiedenen Verfahren für die Steuerfolge mit Trainingsdatensatz A aus Bild 6

ver Simulation und Taylor-Approximation einerseits, und exakter Momente- und Monte-Carlo-Methode andererseits die gleichen Ergebnisse liefern, da im ersten Fall dieselben Formeln zugrunde liegen oder wie im zweiten Fall die Monte-Carlo-Methode die Lösung der exakten Momente annähert. Die Verfahren gruppieren sich genauso für beide Trainingsdatensätze, auch wenn die Unterschiede sehr gering sind.

Für einen besseren Vergleich der Auswirkung der Weitergabe der Unsicherheit werden nun vom Datensatz A in Bild 9 und Datensatz B in Bild 10 die  $3\sigma$ -Unsicherheitsabschätzungen verglichen. Die Bewertung der Unsicherheit gestaltet sich schwieriger. Theoretisch sollte die naive Simulation die geringste Unsicherheit schätzen, dagegen Monte-Carlo-, exakte Momente- und Taylorreihen-Methode näherungsweise die Gleiche, aber immer eine höhere als die naive Simulation. In der Fallstudie schätzt die naive Simulation immer die geringste Unsicherheit, jedoch sind die Unterschiede minimal und stehen in keinem Verhältnis zum Aufwand. Wie klein die Unterschiede sind wird beim Vergleich von Bild 9 und 10 deutlich. Bei der Simulation mit Datensatz B werden bei der Rückführung die Unsicherheiten der Eingangsgrößen besonders groß. Genau in diesem Fall werden die Unterschiede in den Unsicherheiten zwischen den Verfahren besonders klein. Erst bei Betrachtung des Datensatzes A separieren sich die Verfahren wie erwartet (vgl. Abb. 9).

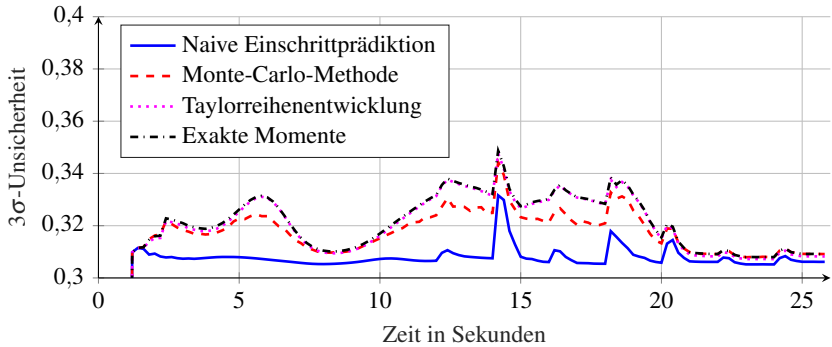


Bild 9:  $3\sigma$ -Unsicherheitsabschätzung für die verschiedenen Verfahren für die Steuerfolge mit Trainingsdatensatz A aus Bild 6

## 5 Fallstudie: Eintank-Laborsystem

Für die zweite Fallstudie an einem realen System wurde ein Eintank-System der Modellfabrik  $\mu$ Plant des Fachgebiets Mess- und Regelungstechnik verwendet, welches dem Schema in Bild 11 folgt. Das Wasser wird aus dem Zentraltank mit einer Pumpe in den Tank gefördert. Dabei wird der Durchfluss mit einem magnetisch-induktiven Durchflussmesser (MID) gemessen. Am Ausfluss befindet sich ein Proportionalventil (PV) mit dem der Wasserstrom, welcher zurück in den Zentraltank läuft, eingestellt wird. Der Öffnungsgrad des PV und die Leistung der Pumpe werden über einen Sollwert im Bereich von 0 % bis 100 % angesteuert. Das MID misst den Durchfluss in Litern pro Minute. Die Ansteuerung des PV  $u_{ventil}$  und die der Pumpe  $u_{pumpe}$  werden als Eingangsgrößen des Eintank-Systems behandelt. Der Zustand des Tanks wird als Volumen des Inventars in Litern erfasst. Die zu prädizierende Größe ist das Volumen des Tankinventars  $\hat{y}_{volumen,t+1}$ . Untersuchungen haben gezeigt, dass bei dem gewählten Modellansatz (vgl. Bild 12) eine Abtastzeit von  $T_0 = 0,7$  s und  $p = q = 5$  verzögerte Eingänge gemäß Bild 12 einen guten Kompromiss zwischen der zeitlichen Auflösung, dem Rechenaufwand und der Modellgüte liefern. Bei den Untersuchungen wurde ebenfalls der ARD-SE-Kernel und das Downhill-Simplex-Suchverfahren zur Optimierung der Kernelparameter verwendet. Der

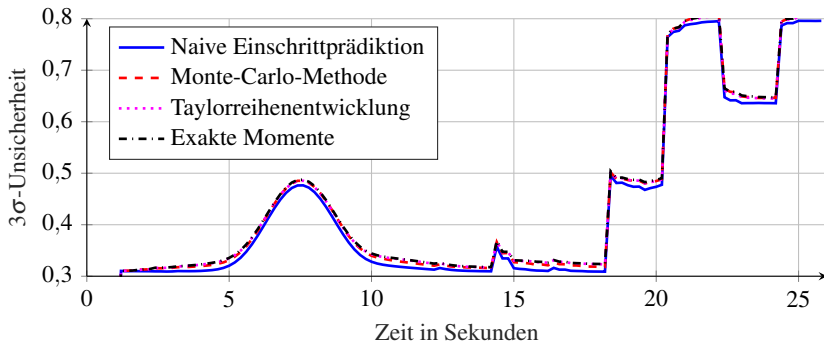


Bild 10:  $3\sigma$ -Unsicherheitsabschätzung für die verschiedenen Verfahren für die Steuerfolge mit Trainingsdatensatz B aus Bild 7

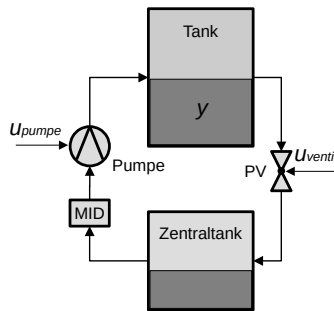


Bild 11: Schematischer Aufbau des Eintank-Systems

Trainingsdatensatz ist 2400 s lang und wurde mittels APRBS-Testsignal mit einer Haltezeit von 10 s erzeugt (vgl. Bild 13).

Als Validierungsdatensatz wurde die Steuerfolge aus Bild 14 verwendet. Die Simulation mit dem 95 % Konfidenzintervall mit einer Rückführung der Unsicherheit mittels Taylorapproximation ist in Bild 15 zu sehen. Die Taylorapproximation ist das einzige Verfahren, bei dem die Beobachtungen im  $3\sigma$ -Konfidenzintervall bleiben. Die anderen Verfahren unterschätzen die Unsicherheit. Im Gegensatz zur ersten Fallstudie, bei der alle Verfahren plausible Ergebnisse liefern, wird das Verfahren mit den exakten Momenten (auch mit anderen Datensätzen von dem Versuchsaufbau) nach wenigen Schritten numerisch in-

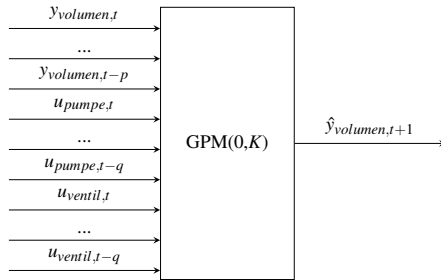


Bild 12: ARX-Modellansatz mit Eingangsgrößen Pumpen-Sollgröße und Ventilöffnung

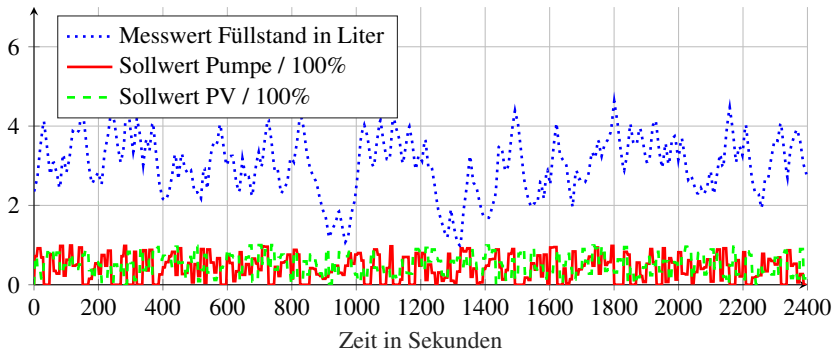


Bild 13: 2400 s Trainingsdatensatz

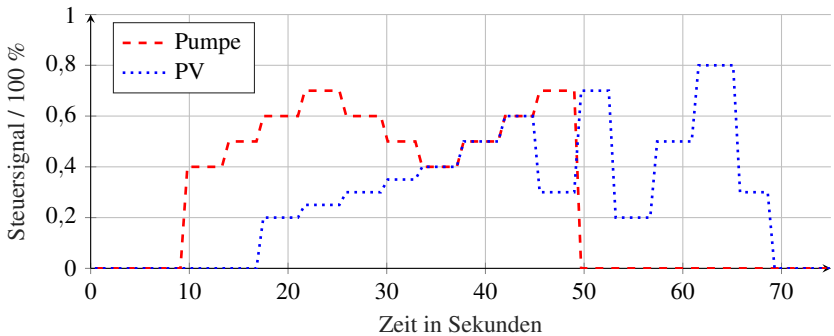


Bild 14: Steuerfolge des Validierungsdatensatzes

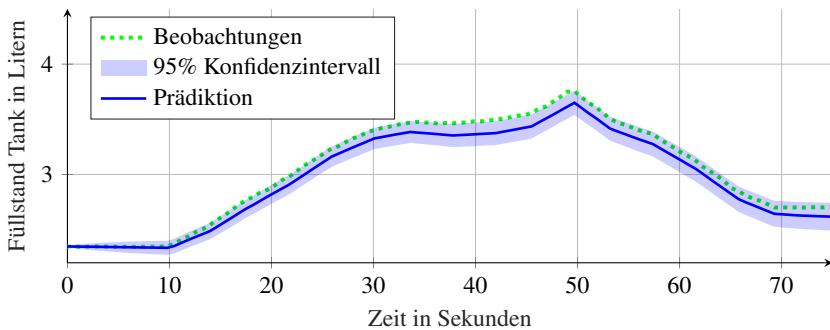


Bild 15: Simulation der Steuerfolge aus Bild 14 bei Rückführung der Unsicherheit mittels Taylorapproximation sowie Messwerte des Füllstands

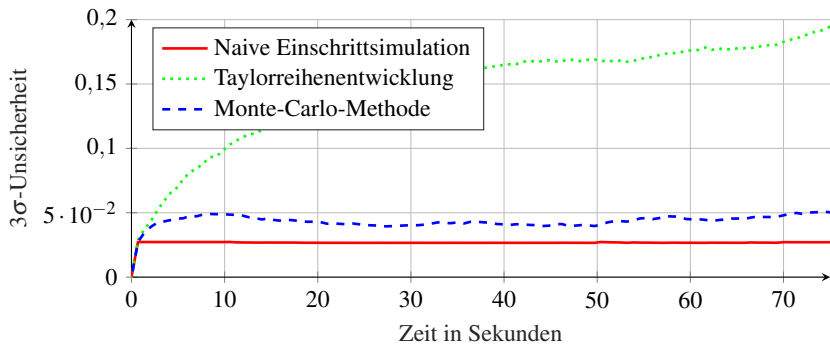


Bild 16: Unsicherheit der verschiedenen Verfahren beim Validierungsdatensatz

stabil. Die  $3\sigma$ -Unsicherheitsabschätzung der drei anderen Verfahren ist in Bild 16 zu sehen.

## 6 Zusammenfassung und Ausblick

Im Beitrag wurde in zwei Fallstudien gezeigt, dass Gaußsche Prozessmodelle sich für die nichtlineare Systemidentifikation bei Angabe der Prädiktions-Unsicherheit eignen. Bei der Simulation durch wiederholte Prädiktionen mittels Einschrittprädiktion verliert jedoch die Unsicherheitsabschätzung an Aussagekraft. Die vorgestellten Methoden, die eine Berücksichtigung von Ein-



gangsgrößen mit normalverteilten Unsicherheiten ermöglichen, vergrößern die Unsicherheiten im zweiten Fallbeispiel sehr unterschiedlich, sodass belastbare Aussagen bei der Erkenntnislage nicht möglich sind.

In weiterführenden Arbeiten sollte untersucht werden, ob mit der Rückführung beliebiger Verteilungen (nicht normalverteilte Verteilungsfunktionen), wie sie in [7] vorgeschlagen werden, bessere Ergebnisse erzielt werden können, oder ob die Hyperparameteroptimierung in Output-Error (OE)-Anordnung für die Simulation geeigneter Parameter findet und damit die Aussagefähigkeit der berechneten Unsicherheit verbessert. Aufgrund des Rechenaufwands von GPM und des komplexen Suchraums in OE-Anordnung ist dies ein sehr rechenaufwändiges Problem [4].

## Danksagung

Dieser Beitrag wurde von der Deutschen Forschungsgemeinschaft DFG im Rahmen des Schwerpunktprogramms SPP 2086 (KR 3795/8-1) gefördert. Die Autoren danken der DFG für die finanzielle und technische Unterstützung.

## Literatur

- [1] Carl Edward Rasmussen und Christopher K. I. Williams „Gaussian Processes for Machine Learning (Adaptive Computation and Machine Learning)“. The MIT Press, 2006, isbn: 026218253X.
- [2] Oliver Nelles „Nonlinear System Identification“. 2. Auflage, Berlin Heidelberg: Springer, 2020.
- [3] Juš Kocijan „Modelling and Control of Dynamic Systems Using Gaussian Process Models“. Advances in Industrial Control, Cham: Springer International Publishing, 2016, isbn: 3319210203.
- [4] Juš Kocijan und Dejan Petelin „Output-Error Model Training for Gaussian Process Models“. Adaptive and Natural Computing Algorithms, Berlin, Heidelberg: Springer, 2011, isbn: 978-3-642-20267-4.

- [5] Agathe Girard „Approximate Methods for Propagation of Uncertainty with Gaussian Process“. Dissertation, University of Glasgow, 2004.
- [6] Agathe Girard, Carl Rasmussen und Roderick Murray-Smith „Gaussian Process priors with Uncertain Inputs: Multiple-Step-Ahead Prediction“. Advances in neural information processing systems: Proceedings of the 2002 Neural Information Processing Systems Conference, 2002.
- [7] Maxim Dolgov und Uwe D. Hanebeck „A Distance-based Framework for Gaussian Processes over Probability Distributions“. arXiv preprint, 2018, doi: arXiv:1809.09193.
- [8] Christian P. Robert „Monte Carlo Statistical Methods“. 2. Ausgabe, Springer Texts in Statistics, New York: Springer, 2004, isbn: 9781441919397.