

Zuverlässigkeitsanalyse nichtlinearer Black-Box-Modelle für verfahrenstechnische Prozesse

Zur Erlangung des akademischen Grades eines
Dr.-Ing.
vom Fachbereich Bio- und Chemieingenieurwesen
der Universität Dortmund
genehmigte Dissertation

vorgelegt von

Dipl.-Ing. Kai Dadhe

aus

Stuttgart

Tag der mündlichen Prüfung: 1. Dezember 2006

1. Gutachter: Prof. Dr.-Ing. S. Engell
2. Gutachter: Prof. Dr. C. Weihs

Dortmund 2007

Schriftenreihe des Lehrstuhls für Anlagensteuerungstechnik
der Universität Dortmund (Prof.-Dr. Sebastian Engell)

Band 3/2007

Kai Dadhe

**Zuverlässigkeitsanalyse nichtlinearer
Black-Box-Modelle für verfahrenstechnische Prozesse**

D 290 (Diss. Universität Dortmund)

Shaker Verlag
Aachen 2007

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Zugl.: Dortmund, Univ., Diss., 2006

Copyright Shaker Verlag 2007

Alle Rechte, auch das des auszugsweisen Nachdruckes, der auszugsweisen oder vollständigen Wiedergabe, der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen und der Übersetzung, vorbehalten.

Printed in Germany.

ISBN 978-3-8322-6776-6

ISSN 0948-7018

Shaker Verlag GmbH • Postfach 101818 • 52018 Aachen

Telefon: 02407 / 95 96 - 0 • Telefax: 02407 / 95 96 - 9

Internet: www.shaker.de • E-Mail: info@shaker.de

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Angestellter am Lehrstuhl Anlagensteuerungstechnik des Fachbereichs Bio- und Chemieingenieurwesens der Universität Dortmund.

Ich möchte dem Inhaber des Lehrstuhls, Herrn Prof. Dr.-Ing. Sebastian Engell, für die Unterstützung, die Anregungen und die Diskussionen rund um diese Arbeit ganz besonders danken. Weiterhin gilt mein herzlicher Dank Herrn Prof. Dr. Claus Weihs für sein Engagement, das Koreferat zu übernehmen.

In meiner Zeit am Lehrstuhl hatte ich die Gelegenheit, mit vielen interessanten Menschen zusammen zu arbeiten und zu diskutieren, Probleme zu erörtern und Lösungen zu finden. All denen, die mich begleitet und unterstützt haben, meinen aufrichtigen Dank.

Für den Rückhalt, die Unterstützung und die Entbehrungen in arbeitsreicher Zeit möchte ich ganz besonders meiner Frau Susanne und meinen beiden Kindern Fynn und Lining danken. Euch möchte ich diese Arbeit widmen.

Kurzfassung

Verfahrenstechnische Prozesse weisen häufig stark nichtlineares Verhalten und Nichtidealitäten auf. Die rigorose Modellbildung basierend auf physikalischen und chemischen Phänomenen ist deswegen zeitaufwendig, und die resultierenden Modelle besitzen eine hohe Komplexität. Kommen zusätzlich nicht genau bekannte oder nicht messbare interne Zusammenhänge hinzu, werden durch Messdaten bestimmte Black-Box-Modelle eingesetzt. Das Hauptproblem der Black-Box-Modelle ist jedoch die Zuverlässigkeit der Prädiktion, die sich auf Bereiche mit hinreichend vielen Messdaten beschränkt.

Diese Arbeit hat daher die Zielsetzung, die Zuverlässigkeit nichtlinearer stationärer und dynamischer Modelle, die aus Messdaten identifiziert werden, zu analysieren. Unter Verwendung statistischer Methoden wird ein Vertrauensbereich errechnet, in welchem der wahre Wert der durch das Modell vorhergesagten Größe mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit liegt. Je enger dieser ist, desto zuverlässiger ist die Modellprädiktion. Zum Einsatz kommen dabei sowohl auf Linearisierung basierende asymptotische als auch verschiedene Bootstrap-Verfahren der computergestützten Statistik mit den Vorteilen, dass für die Anwendung nur wenige einschränkende Annahmen getroffen werden müssen und sie mit moderner Rechenleistung effizient auszuführen sind.

Die in dieser Arbeit verwendeten nichtlinearen stationären und dynamischen Modelle gehören zur Klasse der vorwärts gerichteten Neuronalen Netze. Um die Anwendung der Zuverlässigkeitsanalyse auch auf andere nichtlineare Modellklassen aufzuzeigen, wird die Beschreibung, Herleitung und Beweisführung der Verfahren zu einem Großteil unabhängig von der gewählten Parametrierung durchgeführt. Zur Veranschaulichung der Methoden für stationäre Modelle werden neben bekannten Beispielen aus der Literatur zwei reale Anwendungen aus der Chemometrie behandelt.

Für die Analyse der Zuverlässigkeit von Mehrschrittprädiktionen nichtlinearer dynamischer Modelle sind nur wenige Ansätze bekannt. Die vorhandenen Bootstrap-Methoden berücksichtigen keine exogenen Variablen und sind deswegen im Kontext der Regelungstechnik ungeeignet. Ein wesentlicher Beitrag dieser Arbeit ist die Einführung entsprechender Methoden, deren Eigenschaften theoretisch bewiesen werden. Zwei Simulationsstudien illustrieren die praktische Anwendbarkeit. Es handelt sich um ein einfaches Benchmark-Beispiel und um ein komplexes Modell eines Bioreaktors. Die dabei erzielten Ergebnisse belegen die Güte der Methoden und zeigen die Richtung für weitere Entwicklungen auf: die Integration der Zuverlässigkeitsanalyse in die nichtlineare modellprädiktive Regelung.

Das Problem der Robustheit nichtlinearer modellprädiktiver Regelungen ist in der Literatur beschrieben, die dazu vorhandenen Methoden können jedoch lediglich für lineare Modelle implementiert werden. Durch die Integration der Zuverlässigkeitsanalyse in eine in dieser Arbeit neu eingeführten Synthesvorschrift zur nichtlinearen modellprädiktiven Regelung kann robustes Verhalten erzielt werden. Die Eigenschaften werden unter Zuhilfenahme der Theorie invarianter Mengen gezeigt, die Regelgüte wird mit umfangreichen Studien am Modell des Bioreaktors veranschaulicht.

Die Ergebnisse dieser Arbeit belegen den Nutzen der Zuverlässigkeitsanalysen im Rahmen der Black-Box-Modellierung und der nichtlinearen modellprädiktiven Regelung.

Abstract

As chemical processes exhibit frequently strong nonlinearities and non-idealities first principles modeling based on physical and chemical laws is difficult and time consuming, and the resulting models are often mathematically complex. If there are unknown inner relations which are difficult to identify black-box-models are often used and fitted to measurement data. The main problem of black-box-models is the prediction reliability which decreases in areas where the data set is sparse.

It is the aim of this thesis to analyze the prediction reliability of nonlinear stationary and dynamic models which are identified from measurement data. Using statistical methods, a confidence range is calculated in which the true prediction lies with a certain probability. A smaller range indicates a more reliable prediction. Asymptotic methods based on model linearization and bootstrap methods from computational statistics are applied. For the latter only limited restrictions are necessary and modern computational power leads to effective realizations.

The nonlinear stationary and dynamic models used here belong to the class of feed-forward neural networks. Most of the descriptions, derivations and proofs are independent of the chosen model parameterization. Therefore the methods described here can be applied to other classes of nonlinear models. Well-known examples from the literature and two real-world applications from the field of chemometrics illustrate the methods for stationary models.

Only few approaches are known for the analysis of the multi-step prediction reliability of nonlinear dynamic models. As the available bootstrap methods do not explicitly consider exogenous variables, they are inappropriate in the context of control applications. A major contribution of this thesis is to fill this gap and to provide methods which are theoretically sound and are illustrated with two simulation studies. The first one is a simple yet demanding benchmark example and the second one is a complex bioreactor model. The results demonstrate the performance of the methods and motivate the next step: the integration of the analysis of the prediction reliability into a nonlinear model predictive control scheme.

The issue of robustness in nonlinear model predictive control has been addressed in the literature but there is still a need for methods which are easy to apply in practice. Integrating the prediction reliability analysis leads to a new controller formulation with guaranteed robustness properties. The theory of invariant sets helps to show the controller features while the controller performance is evaluated with comprehensive bioreactor simulation studies.

The results of this thesis show the usefulness of the analysis of the prediction reliability in data-based modeling and model predictive control.

Inhaltsverzeichnis

I	Stationäre Modelle	1
1	Einleitung	3
2	Nichtlineare Black-Box-Modelle	7
2.1	Neuronale Netze	8
2.2	Support Vector Machines	12
3	Methoden zur Berechnung der Prädiktionsunsicherheit	15
3.1	Delta-Methode	15
3.1.1	Krümmung zur Falsifikation der Delta-Methode	18
3.2	Das Bootstrap-Verfahren	21
3.2.1	Das Bootstrap-Pairs-Verfahren und das Bootstrap-Residuals-Verfahren	21
3.2.2	Konfidenz- und Prädiktionsintervalle	24
3.3	Literaturüberblick	25
3.3.1	Prädiktionsunsicherheiten Neuronaler Netze	25
3.3.2	Bootstrap-Methoden	26
3.4	Zusammenfassung	27
4	Anwendung auf stationäre Prozessmodelle	29
4.1	Simulationsmodell	30
4.2	Chemometrische Modelle	35
4.2.1	PCR und PLS	36
4.2.2	Nichtlineare Modifikationen des PLS-Algorithmus	38
4.3	Schätzung der Gemischzusammensetzungen aus Nah-Infrarot-Spektren	39
4.3.1	Prozessbeschreibung	40
4.3.2	Schätzung des Methylacetat-Molenbruchs	40
4.3.3	Diskussion	44
4.4	Schätzung der Monomerkonzentrationen aus Raman-Spektren	44
4.4.1	Prozessbeschreibung	44
4.4.2	Lineare Modelle	47

4.4.3	Detektion von Nichtlinearitäten	48
4.4.4	Nichtlineare Modelle	49
4.4.5	Diskussion	50
4.5	Zusammenfassung	51
II	Dynamische Modelle	53
5	Methoden zur Berechnung der Unsicherheiten von Mehrschritt-Prädiktionen	55
5.1	Nichtlineare dynamische Black-Box-Modelle	56
5.1.1	Systemdarstellung nichtlinearer dynamischer Modelle	56
5.1.2	Identifikation nichtlinearer dynamischer Modelle	57
5.2	Methoden für lineare oder linearisierte Modelle	58
5.3	Bootstrap-Methoden für nichtlineare Modelle	60
5.3.1	Literaturüberblick: Bootstrap-Methoden für dynamische Modelle	60
5.3.2	Überprüfung der i.i.d.-Hypothese	62
5.3.3	Beschreibung und Erweiterung der Verfahren	69
5.3.4	Additive Fehlermodelle	79
5.3.5	Wild-Bootstrap	83
5.3.6	Wild-Bootstrap für die Prädiktion	85
5.4	Zusammenfassung	89
6	Anwendung auf dynamische Prozessmodelle	91
6.1	Nichtlineares Benchmark-Modell	91
6.1.1	Identifikation der nichtlinearen Modelle	92
6.1.2	Überprüfung der i.i.d.-Hypothese	94
6.1.3	Abschätzung der Prädiktionsunsicherheit	96
6.2	Kontinuierlicher Bioreaktor	103
6.2.1	Identifikation	104
6.2.2	Überprüfung der i.i.d.-Hypothese	106
6.2.3	Abschätzung der Prädiktionsunsicherheit	107
6.3	Zusammenfassung	114
7	Einbeziehung der Unsicherheiten in die prädiktive Regelung	115
7.1	Nichtlineare modellprädiktive Regelung	116
7.1.1	Stabilität der nichtlinearen modellprädiktiven Regelung	118
7.2	Robuste nichtlineare modellprädiktive Regelung	120
7.2.1	Literaturüberblick	120
7.2.2	Grundlegende Mengenoperationen	122
7.2.3	Synthese einer robusten nichtlinearen modellprädiktiven Regelung	123
7.2.4	Robuste Stabilität unter Betrachtung invarianter Mengen	126

7.3	Zusammenfassung	133
8	Anwendung der nichtlinearen modellprädiktiven Regelung mit unsicheren Prozessmodellen	135
8.1	Nichtlineare Regelung des Bioreaktors	135
8.2	Nominelle modellprädiktive Regelung	136
8.2.1	Bestimmung der Parameter	136
8.2.2	Robustheit des nominellen NMP-Reglers	141
8.3	Robuste modellprädiktive Regelung	145
8.3.1	Anwendung eines festen Zielgebietes	145
8.3.2	Anwendung der Methode aus 7.2.3	147
8.4	Kommentare zur Implementierung	149
8.4.1	Verwendung einer kontinuierlichen Prädiktionsverteilung	150
8.4.2	Verwendung eines mittleren Regelfehlers	150
8.5	Zusammenfassung	151
9	Zusammenfassung	153
9.1	Schlussfolgerungen	153
9.2	Ausblick	154
A	Liste verwendeter Symbole	155
B	Beweis von Theorem 5.1 und 5.2	159
C	Mathematischer Anhang	163
C.1	Schätzung von Wahrscheinlichkeitsdichten mittels Kernfunktionen	163
C.2	Permutationstest	167
C.3	Ableitungen und geometrische Eigenschaften vorwärts gerichteter Neuronaler Netze	170
C.3.1	Analytische Berechnung von J_θ und H_θ	170
C.3.2	Extremwerte der nichtlinearen Abbildung	171
D	Zur Implementierung des nichtlinearen modellprädiktiven Regelungsalgorithmus	173
E	Tabellen	177
E.1	i.i.d.-Teststatistiken des Benchmark-Modells aus Abschnitt 6.1	178
E.2	Prädiktionsintervalle des Benchmark-Modells aus Abschnitt 6.1	187
E.3	i.i.d.-Teststatistiken des Bioreaktor-Modells aus Abschnitt 6.2	201
E.4	Prädiktionsintervalle des Bioreaktor-Modells aus Abschnitt 6.2	208
	Literaturverzeichnis	217