Automatische Applikation modellbasierter Diesel-Luftsystem-Funktionen in Motorsteuergeräten

Von der Fakultät Konstruktions-, Produktions- und Fahrzeugtechnik der Universität Stuttgart zur Erlangung der Würde eines Doktors der Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.) genehmigte Abhandlung

vorgelegt von
Yijiang Xie
aus Yueyang

Hauptberichter:	Prof. Dr.-Ing. Arnold Kistner, Universität Stuttgart
Mitberichter:	Prof. Dr.-Ing. Michael Bargende, Universität Stuttgart

Tag der mündlichen Prüfung: 21.10.2020

Institut für Nichtlineare Mechanik der Universität Stuttgart
2020

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand im Zeitraum von März 2014 bis Februar 2017 im Rahmen meiner Doktoranden-Anstellung bei der Robert Bosch GmbH in Stuttgart in Zusammenarbeit mit dem Lehrstuhl für Nichtlineare Mechanik der Universität Stuttgart. Bei meiner Arbeit wurde ich von zahlreichen Personen tatkräftig unterstützt, wofür ich mich an dieser Stelle herzlich bedanken möchte.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr.-Ing. Arnold Kistner für die wissenschaftliche Betreuung dieser Arbeit. Sein großes Interesse und seine wertvollen Anregungen haben entscheidend zum Erfolg dieser Arbeit beigetragen.

Bei Herrn Prof. Dr.-Ing. Michael Bargende bedanke ich mich für die freundliche Übernahme des Koreferats und bei Herrn Prof. Dr.-Ing. Thomas Maier für den Vorsitz bei der mündlichen Prüfung.

Des Weiteren danke ich allen Kollegen der Abteilung Diesel- und Gasolinesysteme der Robert Bosch GmbH für die gute Zusammenarbeit und ihre Unterstützung. Stellvertretend für alle Kollegen gilt mein besonderer Dank Herrn Dr.-Ing. Thomas Bleile, welcher die wissenschaftliche Betreuung seitens der Firma Bosch übernahm. Darüber hinaus danke ich Herrn Dr.-Ing. Andreas Walter für die engagierte Unterstützung von Seiten der Korrektur und wissenschaftliche Hinweise. Darüber hinaus möchte ich mich bei Herrn Dr.-Ing. Alexander Henle für seine umfangreiche Unterstützung bedanken. Ebenso danke ich Herrn Dr.-Ing. Horst Müller und Herrn Dipl.-Ing. Thomas Otto für die Unterstützung bei den Experimenten am Prüfstand.

Meinen Eltern und meiner Frau Yicun You danke ich für den Rückhalt und Ihre Unterstützung während der gesamten Zeit.

Shanghai, im Oktober 2020

Yijiang Xie

Zusammenfassung

Die kontinuierliche Weiterentwicklung von Dieselmotoren zur Erfüllung der gesetzlichen und funktionalen Anforderungen, z. B. Verringerung der Emissionen und des Kraftstoffverbrauchs mit Berücksichtigung der Fahrbarkeit, hat zu einer erheblichen Zunahme der Anzahl der notwendigen Sensoren und Aktuatoren am Motor geführt. Für das Diesel-Luftsystem bedeutet es die Einführung eines Aufladungssystems, eines Systems für die Abgasrückführung (AGR), eines Abgasnachbehandlungssystems (AGB), einer variablen Ventilsteuerung, usw. Um das zunehmend komplexere System bei Dieselmotoren zu beherrschen, erfolgte die Entwicklung von ECU-Funktionen durch einen modellbasierten Ansatz. Der Erfolg einer modellbasierten Entwicklungsmethodik beruht auf einer präzisen und effizienten Modellierung des relevanten Motorverhaltens. Wegen der begrenzten Rechenleistung der Engine Control Unit (ECU) wird in der Regel eine Kombination aus physikalischen Modellen und den sogenannten Applikationsparametern für die Motormodellierung bevorzugt. Die Applikationsparameter können Skalare oder ein- oder zweidimensionale empirische Modelle sein und müssen im Regelfall durch Experimente am Motorprüfstand bestimmt (appliziert) werden. Typische Beispiele solcher Applikationsparamter sind Kennfelder/Kennlinien (KF/KL) für die Modellierung der Zylinderfüllung (Liefergrad) und die effektive Fläche des AGR-Ventils.

In der vorliegenden Arbeit wird ein Arbeitsprozess entwickelt, der die ECU-Funktionen für stationäre Zusammenhänge im Diesel-Luftsystem automatisch und mit möglichst geringem Messaufwand hinsichtlich der Anzahl der Messpunkte applizieren kann. Der Algorithmus läuft im Rahmen einer sequentiellen Versuchsplanung, bei der ein Gaußsches Modell (GPM) mit nichtstationärer Kovarianzfunktion angewendet wird, um die interessierenden Beziehungen zu approximieren. Für eine adaptive Versuchsplanung wird eine aktive Abtast-Strategie entwickelt, die auf dem Konzept der Mutual Information (MI) basiert und die optimalen Systemeingaben (Motordrehzahl, Kraftstoffmenge, Luftaktuatoren usw.) aufgrund der Eingangsraumabdeckung, der inhomogenen Eigenschaften der Beziehungen, der Unsicherheit der geschätzten Applikationssparameter und der Realisierbarkeit der resultierenden Betriebspunkte auswählt. Das Verfahren ist in der Lage, das stationäre Motorverhalten, das von den ausgewählten Systemeingaben aufgerufen wird, mit Hilfe der physikalischen Struktur des Luftsystems und datenbasierten Modellen (GPM) der Applikationsparameter vorherzusagen. Auf dieser Grundlage wird die Unsicherheit der Applikationsparameter mithilfe erweiterter Kalman-Filter (EKF) geschätzt. Die Realisierbarkeit eines Arbeitspunkts wird durch Vergleich des vorhergesagten Systemverhaltens mit den Motorgrenzen bewertet.

Zur Validierung wurde der entwickelte Algorithmus an einem Motorprüfstand angewendet, um das Luftsystem eines Dieselmotors zu applizieren, der mit Hoch- und Niederdruck-AGR, Turbolader mit variabler Geometrie (VGT) und variabler Ventilsteuerung (VVT) ausgestattet ist. Unter Verwendung des vorgestellten Ansatzes, der ca. 130 Messpunkten be-

nötigt, wurde eine vergleichbare Applikationsqualität wie bei einem herkömmlichen Verfahren mit mehr als 800 Messpunkten erreicht.

Abstract

The continuous development of diesel engines for meeting the legal and functional requirements, e.g. reducing emissions and fuel consumption while taking drivability into account, has led to a significant increase in the number of sensors and actuators required for the engine. For the diesel-air system it means to introduce a turbocharger, a system for exhaust gas recirculation (EGR), an exhaust gas aftertreatment system, a variable valve control, etc. In order to control such an increasingly complex system in diesel engines, ECU-functions are developed by means of a model-based approach. The success of a model-based development methodology is based on a precise and efficient modeling of the relevant engine behavior. Because of the limited computing power of an ECU, a combination of physical models and so-called calibration parameters is usually preferred for engine modeling. The calibration parameters can be scalar or one or two-dimensional empirical models and usually have to be determined (calibrated) by experiments on an engine test bench. Typical examples for such calibration parameters are lookup-tables for modeling the cylinder charge (volumetric efficiency) and the effective area of the EGR valve.

In this thesis a procedure is proposed which is able to calibrate the ECU functions for stationary relationships, e.g. in the diesel-air system, automatically and with as little measurement effort as possible in terms of the number of measurement points. The algorithm runs within the framework of sequential experimental planning, in which Gaussian models with non-stationary covariance functions are used to approximate the relations of interest. For adaptive experimental planning an active sampling strategy is developed based on the concept of mutual information and optimal system inputs (engine speed, fuel quantity, air actuators, etc.) and which determines the resulting operating points, with respect to the input space coverage, the inhomogeneous properties of the relations, the uncertainty of the estimated calibration parameters and the feasibility of the operating points. The method is able to predict the stationary engine behavior, which results from the selected system inputs, by means of the physical structure of the air system and the data-based models of the calibration parameters. On this basis the uncertainties of the application parameters are estimated using extended Kalman filters. The feasibility of the operating point is checked by comparing the predicted system behavior with the engine limits.

For validation the developed algorithm was implemented on an engine test bench to calibrate the air system of a diesel engine equipped with high and low pressure EGR, a variable geometry turbocharger and variable valve timing. As a result, using the presented approach, using as little as approx. 130 measurement points is enough to obtain a comparable application quality to that achieved by conventional methods with more than 800 measurement points.

Inhaltsverzeichnis

Nomenklatur **viii**

1 Einleitung **1**

1.1 Diesel-Luftsystem 1

1.1.1 Grundlagen des Diesel-Luftsystems 2

1.1.2 Modellbildung und modellbasierte ECU-Funktionen für das Diesel-Luftsystem 2

1.2 Applikation des Diesel-Luftsystems 4

1.2.1 Motorapplikation 6

1.2.2 ECU-Funktionsapplikation 9

1.2.3 Diskussion 14

1.3 Zielsetzung und Aufbau der Arbeit 16

2 Statistische Modellbildung für stationäre Zusammenhänge **19**

2.1 Grundsätzliche Theorie und Funktionsweise 19

2.1.1 Frequentistischer Ansatz 20

2.1.2 Bayesscher Ansatz 24

2.1.3 Zusammenfassung 25

2.2 Modellselektion 25

2.2.1 Overfitting und Underfitting 26

2.2.2 Optimierung der Modellkomplexität 29

2.2.3 Zusammenfassung 35

2.3 Regressionsmodelle 36

2.3.1 Klassifikation der Regressionsmodelle 36

2.3.2 Fixed Basis Function Regression 37

2.3.3 Feedforward Neural Network 38

2.3.4 Radial Basis Function Network 41

2.3.5 Lokale Modellnetze 42

2.3.6 Gaussian Process Regression (GPR) 45

2.3.7 Support und Relevance Vector Machine für Regression 48
2.4 Bewertung der Regressionsmodelle 49
2.4.1 Anforderungen an die Regressionsmodelle 50
2.4.2 Gegenüberstellung der Regressionsmodelle 51

3 Statistische Versuchsplanung für globale Approximation 55
3.1 Klassifikation der statistischen Versuchsplanung 55
3.2 Stufige Versuchsplanung 58
3.3 Raumfüllende Versuchsplanung 60
3.4 Optimal Design 63
3.4.1 Optimale Versuchsplanung für ein lineares Modell 64
3.4.2 Optimal Design für ein nichtlineares Modell 66
3.5 Sequentielle Versuchsplanung 68

4 Algorithmus für optimierte und automatisierte Applikation 70
4.1 Optimale Applikation eines einzelnen *Grey-Box*-Modells 70
4.2 Nichtstationäres Gaußprozessmodell 72
4.2.1 Stationäres Gaußprozessmodell 73
4.2.2 Konstruktion eines nichtstationären Gaußprozessmodells 74
4.2.3 Neuartiges Gaußprozessmodell mit nichtstationärer Kovarianzfunktion 76
4.2.4 Simulative Experimente mit synthetischen Daten 81
4.3 Optimale Versuchsplanung für das Gaußprozessmodell 86
4.3.1 Verwandte Arbeiten 89
4.3.2 Hybride Abtaststrategie 93
4.3.3 Automatisches Stoppen der Vermessung 96
4.4 Optimale Applikation eines Netzwerks von Submodellen 99
4.4.1 Detaillierte Problembeschreibung 99
4.4.2 Applikation eines Netzwerks von Submodellen 102
4.5 Optimale Auswahl der Messpunkte 105

4.5.1 Problemstellung 106
4.5.2 Lösungsansatz und Ergebnisse 107
4.6 Aktive Erzeugung der Messpunkte 112
4.6.1 Problembeschreibung des Anwendungsbeispiels 114
4.6.2 Informationsgehalt für die Applikation der Abgasklappe 119

5 Algorithmus, Experimente und Ergebnisse 134
5.1 Übersicht über den Algorithmus 134
5.1.1 Anfängliche Versuchsplanung 134
5.1.2 Adaptive Versuchsplanung 136
5.2 Experimente und Ergebnisse 139
5.2.1 Versuchsaufbau 139
5.2.2 Ergebnisse und Analyse 142

6 Zusammenfassung und Ausblick 147

Literaturverzeichnis 150

Nomenklatur

Abkürzungsverzeichnis

AGB	Abgasnachbehandlung
AGR	Abgasrückführung
AIC	Akaike Information Criterion
API	Anwendungsprogrammierschnittstelle
ASK	automatisches Stopp-Kriterium
ATL	Abgasturbolader
BIC	Bayesian Information Criterion
CAC	Charge Air Cooler
CV	Cross-Validation
DoE	Design of Experiment
DPF	Dieselrußpartikelfilter
DT	Delaunay Triangulierung
ECU	Engine Control Unit
EKF	erweiterter Kalman-Filter
EM	empirisches Modell
En	Entropieansatz
FIM	Fisher-Informationsmatrix
GP	Gaussian Process
GPR	Gaussian Process Regression
HD	Hochdruck
HFM	Heißfilm-Luftmassenmesser
HHT	Hinging Hyperplane Tree
IG	Informationsgehalt
KF	Kennfeld
KL	Kennlinie
KNN	künstliches neuronales Netzwerk
KQ-Methode	Methode der kleinsten Quadrate
LHD	Latin Hypercube Design
LLK	Ladeluftkühler
LM	lokales Modell
LMN	lokales Modellnetz
LOLIMOT	Local Linear Model Trees
LOOCV	Leave-One-Out-Cross-Validation
LOPOMOT	Local Polynomial Model Tree
MAPE	Mean Absolute Percentage Error
MCMC	Markov Chain Monte Carlo

MI	Mutual Information
ML-Methode	Maximum-Likelihood-Methode
ML-II	Type II Maximum Likelihood
MLP	Multilayer Perceptron Network
MSE	Mean Square Error
MSPE	Mean Square Prediction Error
ND	Niederdruck
NSC	NO_x-Speicherkatalysator
OBD	On-Board-Diagnose
OFAT	One-Factor-At-a-Time
RBF	Radial Basis Function
RVM	Relevance Vector Machine
SCR	selektive katalytische Reduktion (selective catalytic reduction)
SE	Squared Exponential
SM	Submodell
SS	Sobol Sequence
SVM	Support Vector Machine
SVR	Support Vector Regression
TGPRNS	Treed Gaussian Process Regression with Nonstationary Covariance Function
VTG	variable Turbinengeometrie

Symbolverzeichnis

A	Applikationsparameter
$\mathrm{ag}_{\mathrm{ES}}$	Kurbelwinkel des Einlassventilschließens
AirFlt	Signale über Luftfilter
ar	effektive Fläche
Clg	Signale über Kühlmittel
Cmpr	Signale über Verdichter
Cyl	Signale über Zylinder
C_p	Mallow's C_p für Modellauswahl
$\boldsymbol{D}$	Datensatz für Regressionsproblem
$\boldsymbol{D}_{\mathrm{App}}$	Applikationsmesspunkte
D_{KL}	Kullback-Leibler-Divergenz
$\boldsymbol{D}_{\mathrm{Ref}}$	Referenzsatz
Ds	stromabwärts
$\boldsymbol{D}_{\mathrm{Sen}}$	Beobachtungsmesspunkte
$\boldsymbol{D}_{\mathrm{Sen,Pre}}$	prädizierte Beobachtungsmesspunkte
$\boldsymbol{D}_{\mathrm{Tra}}$	Trainingssatz
$d(x)$	Dichtefunktion bei der Raumverformung
E	Erwartung
EGRLP	Signale über ND-AGR-Ventil
EGRHP	Signale über HD-AGR-Ventil
EGT	Signale über Abgasnachbehandlung
ExhFlp	Signale über Abgasklappe
$\mathcal{F}$	Fisher-Informationsmatrix
f	bei Regressionsproblem gesuchter Zusammenhang
$\hat{f}$	bei Regressionsproblem geschätzter Zusammenhang
$\mathcal{GP}$	Gaußprozess
$\mathcal{H}$	Hyperparametersatz
$\mathcal{H}_{\mathrm{NS}}$	Hyperparametersatz für nichtstationäre Kovarianzfunktion
I	Trägheitsmoment
$K(\mathbf{x}, \mathbf{x})$	Kovarianzmatrix
$k(x, x')$	Kovarianzfunktion
$L(\boldsymbol{D})$	Likelihood
$L(\hat{f}(x), y)$	Verlustfunktion
l	Characteristic Length
mf	Massenstrom
$\mathrm{mf}_{\mathrm{Air}}$	Massenstrom der Frischluft
$\mathrm{mf}_{\mathrm{Cyl}}$	Zylinderfüllung
$\mathrm{mf}_{\mathrm{EGR}}$	Massenstrom über das AGR-Ventil

$\mathcal{N}$	Normalverteilung
n_{Eng}	Motordrehzahl
p	Druck
$\mathrm{pos}_{\mathrm{EGR}}$	Tastverhältnis des AGR-Ventils
$\boldsymbol{Q}$	Umgebungsgröße
q	Einspritzmenge
$\mathrm{R}_{\mathrm{Exh}}$	Gaskonstante des Abgases
$\mathrm{R}_{\mathrm{Air}}$	Gaskonstante der Frischluft
RSS	Residuenquadratsumme
r	AGR-Rate
Sil	Signale über Schalldämpfer
$t(x)$	Transformationsfunktion bei der Raumverformung
T	Temperatur
Trbn	Signale über Turbine
TVA	Signale über Drosselklappe
$\boldsymbol{U}$	Versuchsplan bzw. Eingangsvektor
$U(\xi, \Theta)$	Nutzungsfunktion für optimale Versuchsplanung
Us	stromaufwärts
η	Wirkungsgrad
Θ	bei Regressionsproblem zu schätzender Parametersatz
$\hat{\Theta}$	geschätzter Parametersatz
Θ^*	wahrer Parametersatz
κ	Isentropenexponent
λ	Verbrennungsluftverhältnis
$\lambda(q, n_{\mathrm{Eng}})$	Kennfeld für den Luftaufwand
$\mu_i(\mathbf{u})$	Zugehörigkeitsfunktion
π	Druckverhältnis
σ^2	Varianz des Messrauschens
σ_f	Standardabweichung des Signals
σ^2_{Post}	A-posteriori-Schätzung der Varianz
σ^2_{Pri}	A-priori-Schätzung der Varianz
ξ	Versuchsplan
$\Phi_i(\mathbf{u})$	Gültigkeitsfunktion
$\phi(x)$	Basisfunktion
Ψ	Durchflussfunktion
ω	Winkelgeschwindigkeit

1 Einleitung

Der Dieselmotor zeichnet sich durch einen hohen Wirkungsgrad aus, der bei Fahrzeugen in der Regel 40% beträgt und bei Schiffen sogar 50% ([Rei12]) erreichen kann. Die kontinuierliche Entwicklung der gesetzlichen und funktionalen Anforderungen an die Dieselmotoren, z. B. Verringerung der Emissionen und des Kraftstoffverbrauchs ohne Einbuße bei der Fahrbarkeit, hat zu einer deutlichen Zunahme der Anzahl der benötigten Sensoren und Aktuatoren am Motor geführt. Für das Diesel-Luftsystem bedeutete es u.a. die Einführung eines Aufladungssystems, eines Systems für die Abgasrückführung (AGR), eines Abgasnachbehandlungssystems (AGB) und einer variablen Ventilsteuerung. Außerdem haben Industrie und Forschungsinstitute daran gearbeitet, solche Technologien weiter zu verfeinern. Als Beispiele können die Entwicklung des elektrischen Verdichters und des zweistufigen Turboladers sowie die Einführung der Niederdruck-AGR und der Technik der selektiven katalytischen Reduktion (SCR) dienen. Um das zunehmend komplexere System in Dieselmotoren in den Griff zu bekommen, erfolgte die Entwicklung eines Regelungssystems und eines Systems für On-Board-Diagnose (OBD) u.a. durch einen modellbasierten Ansatz ([Ise14]). Der Erfolg der modellbasierten Entwicklung beruht auf einer präzisen und effizienten Modellierung des relevanten Motorverhaltens. Wegen der begrenzten Rechenleistung der *Engine Control Unit* (ECU) wird in der Regel eine Kombination aus den physikalischen Modellen und den sogenannten Applikationsparametern für die Motormodellierung bevorzugt. Die Applikationsparameter können Skalare, ein- oder zweidimensionale empirische Modelle wie z. B. Kennfelder/Kennlinien (KF/KL) sein und müssen im Regelfall durch Experimente bestimmt (appliziert) werden. In der vorliegenden Arbeit wird ein neuartiger Algorithmus vorgeschlagen, um automatisch die KF/KL, welche die stationären Funktionsbeziehungen in der ECU-Funktion des Luftsystems eines Dieselmotors charakterisieren, mit möglichst geringem Messaufwand zu applizieren.

In diesem Kapitel wird versucht, den benötigten Hintergrund für weitere Erklärungen und Analysen bereitzustellen. Zuerst wird in Abschnitt 1.1 die grundlegende Struktur und Funktionsweise des Diesel-Luftsystems vorgestellt. Zusätzlich werden die dazugehörigen ECU-Funktionen geschildert. Anschließend beschäftigt sich der Abschnitt 1.2 mit der Erläuterung der Applikation des Diesel-Luftsystems. Zuletzt werden in Abschnitt 1.3 das Ziel und der Aufbau der Arbeit dargestellt.

1.1 Diesel-Luftsystem

In diesem Abschnitt werden zunächst in Abschnitt 1.1.1 die Komponenten und die Funktionsweise des Diesel-Luftsystems kurz vorgestellt. Anschließend wird in Abschnitt 1.1.2 auf das Prinzip der Modellierung des Diesel-Luftsystems in der ECU eingegangen. Schließlich werden die ECU-Funktionen für das Diesel-Luftsystem veranschaulicht.

1.1.1 Grundlagen des Diesel-Luftsystems

Dieser Abschnitt befasst sich mit den Komponenten des Luftsystems von Dieselmotoren. Abbildung 1.1 gibt eine exemplarische Übersicht der Komponenten eines Diesel-Luftsystems. Wie gezeigt, setzt sich das Luftsystem aus Aufladungssystem und AGR-System zusammen. Die Frischluft strömt zuerst durch ein Luftfilter bis zur Einleitstelle der Niederdruck-AGR, wo die Luft dem gekühlten Abgas zugemischt wird. Ein Verdichter komprimiert das Gemisch, das danach durch den Ladeluftkühler gekühlt wird. Auf der anderen Seite des Motors strömt das Abgas durch den Abgaskrümmer bis zu einer Turbine mit variabler Turbinengeometrie (VTG), wo das Abgas dekomprimiert wird. Gleichzeitig wird dabei dem Abgas Enthalpie entzogen. Stromabwärts der Turbine fließt das Abgas anschließend durch ein Abgasnachbehandlungssystem, das z.B. mit Hilfe eines NOx-Speicherkatalysators (NSC) und eines Dieselrußpartikelfilters (DPF) die im Abgas verbleibenden Stickstoffoxide und den Ruß reduziert. Danach verzweigt sich das Abgas jeweils in die Richtung der Abgasklappe und des ND-AGR-Ventils. Stromabwärts der Abgasklappe sorgt die Technik der SCR für eine weitere Reduzierung der Stickstoffoxide. Zum Schluss fließt das Abgas durch den Schalldämpfer, der den Lärm reduzieren soll, in die Umgebung.

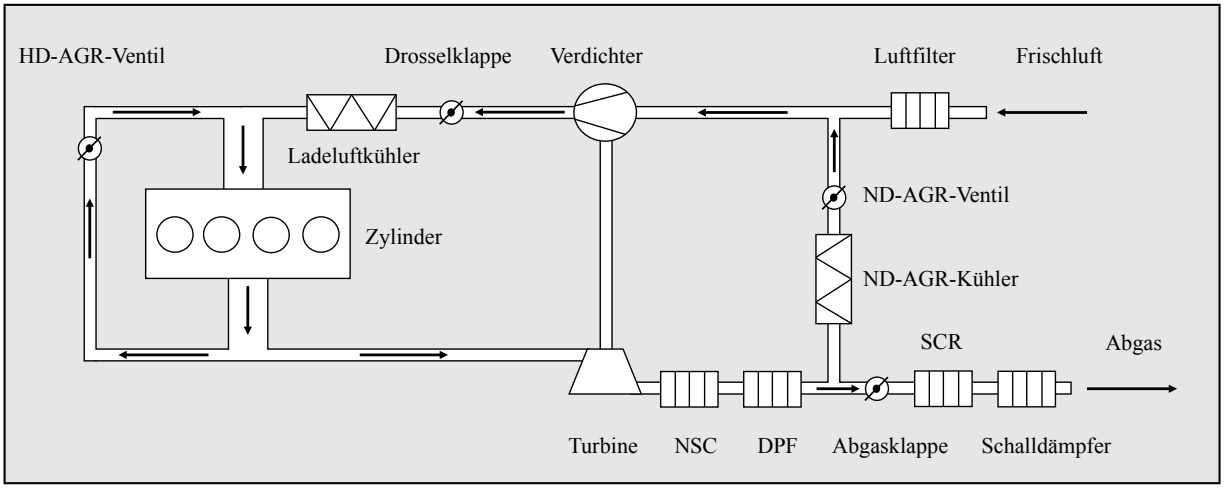


Abbildung 1.1: Schematische Darstellung der Bestandteile eines beispielhaften Diesel-Luftsystems; die schwarzen Pfeile zeigen die Strömungsrichtung der Frischluft und des Abgases.

1.1.2 Modellbildung und modellbasierte ECU-Funktionen für das Diesel-Luftsystem

Die erfolgreiche Implementierung und Umsetzung der oben genannten technischen Fortschritte verlangt eine genaue und umfangreiche mathematische Modellierung des dynamischen und stationären Motorverhaltens.

Unter dynamischem Motorverhalten versteht man die dynamischen physikalischen Prozesse, z. B. die Erwärmung des Zylinderkopfs beim Kaltstart und die Beschleunigung des

Turboladers beim Gasgeben. Bei der Modellierung des dynamischen Motorverhaltens liegt der Schwerpunkt auf der Darstellung der *zeitlichen* und *räumlichen* Verläufe der physikalischen Größen (Systemausgänge), die von den Eingangssignalen angeregt werden. Hingegen ist in den meisten Fällen für die Motorentwicklung nicht das dynamische Systemverhalten, sondern der eingeschwungene Systemzustand von Interesse. Diese Art von Motorverhalten wird dann im weiteren Verlauf der vorliegenden Arbeit als stationäres Motorverhalten bezeichnet. Die Modellierung des stationären Motorverhaltens zielt darauf ab, die Zusammenhänge zwischen den Eingangssignalen und den dadurch angeregten und schon eingeschwungenen Ausgangssignalen abzubilden. Ein gutes Beispiel dafür ist die Modellierung der Abgastemperatur abhängig von der Drehzahl, der Einspritzmenge und der Temperatur vor dem Einlassventil. Durch die Abbildung 1.2 wird der Unterschied zwischen stationärem und dynamischem Motorverhalten verdeutlicht. Zu beachten ist, dass die Modellierung des dynamischen Motorverhaltens nicht Bestandteil der Arbeit ist und daher nicht weiter diskutiert wird. Für mehr Informationen zur Modellbildung des dynamischen Motorverhaltens siehe [Def11]. In dieser Abhandlung konzentrieren wir uns auf die Untersuchung des stationären Motorverhaltens.

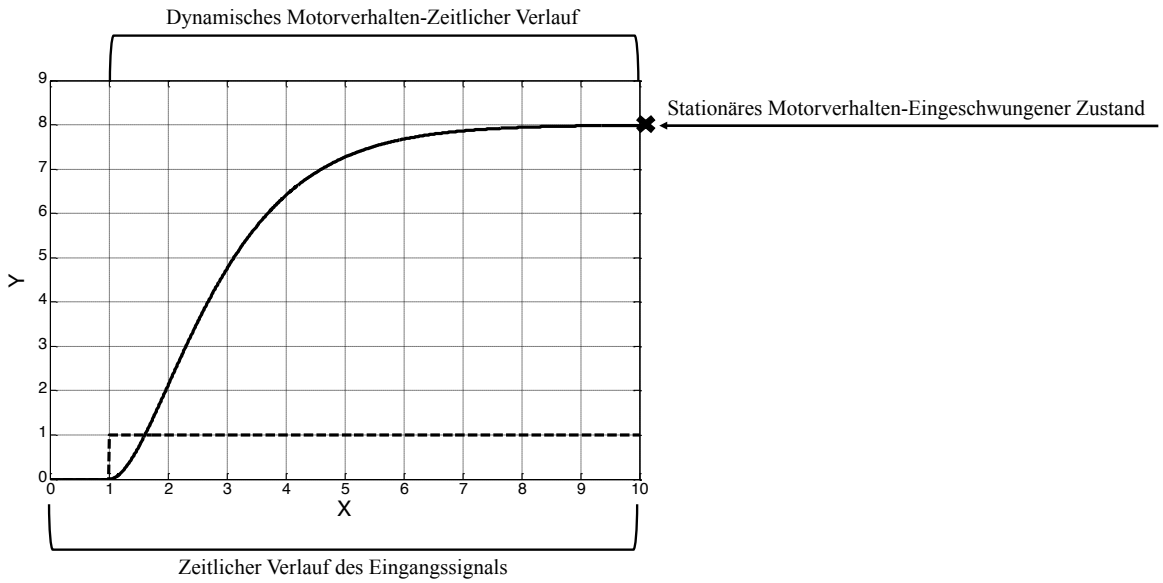


Abbildung 1.2: Dynamisches Motorverhalten vs. Stationäres Motorverhalten; als Beispiel wird der zeitliche Verlauf des Ausgangssignals Y (dicke Linie) genommen, das vom Eingangssignal X (gestrichelte Linie) angeregt wird. Während das dynamische Motorverhalten durch den zeitlichen Verlauf des Ausgangssignals dargestellt wird, bezieht sich das stationäre Motorverhalten auf das eingeschwungene Ausgangssignal, das mit einem Kreuz markiert ist.

Von der Modellstruktur her wird bei der Modellierung des Motorverhaltens von *White-Box*-Modell, *Grey-Box*-Modell und *Black-Box*-Modell gesprochen ([Ise14]). Am einen Ende des Spektrums steht das *White-Box*-Modell, das die physikalischen Zusammenhänge vollkommen mittels der entsprechenden Differentialgleichungen beschreibt, z. B. die Modellierung

der Gasvermischung der Frischluft und des Abgases durch den Massen- und Enthalpie-Erhaltungssatz. Am anderen Ende des Spektrums ist das *Black-Box*-Modell. Wegen der komplexen Wirkungszusammenhänge des Systems werden dabei keine physikalischen Gesetze angewendet. In diesem Fall bleibt die Methode der datenbasierten Modellierung, die lediglich das Eingangs-Ausgangs-Verhalten berücksichtigt, der einzige zielführende Ansatz, beispielsweise die Modellierung der Rußbildung. Was dazwischen im Spektrum steht (das *Grey-Box*-Modell), lässt sich normalerweise mit der Kombination von physikalischen Gleichungen und datenbasierten Modellen darstellen. Die datenbasierten Modelle dabei können skalare Parameter (nulldimensional) oder multidimensionale Kennfelder sein. Zur besseren Lesbarkeit werden solche datenbasierten Modelle bzw. Teile in *Grey-Box*-Modellen und *Black-Box*-Modellen in der vorliegenden Arbeit als empirische Modelle (EM) bezeichnet.

In der ECU wird das gesamte Diesel-Luftsystem in Subsysteme unterteilt und mittels der Füll- und Entleermethode modelliert, um genaue und robuste Signale für das Regelungssystem und OBD-System vorzubereiten. Abbildung 1.3 stellt eine Übersicht über die Subsysteme dar. Neben der Berechnung der gewöhnlichen Messgrößen wie z. B. Temperaturen, Drücke etc. werden auch nicht-messbare Größen wie Luftzahl, AGR-Massenstrom etc. durch die ECU-Funktionen geliefert. Außerdem sind die ECU-Funktionen für die Bereitstellung hochwertiger Signale verantwortlich, die auch als Ersatzwerte für entsprechende fehlende Sensorsignale eingesetzt werden können. Wie schon erwähnt, werden bei den ECU-Funktionen häufig *Grey-Box*-Modelle verwendet, um einen Kompromiss zwischen Modellgenauigkeit und Berechnungskomplexität zu erlangen. Dabei werden die EM normalerweise durch KF/KL dargestellt. Als Beispiel ist das Kennfeld für den Luftaufwand in Abbildung 1.4 zu sehen, das für die Modellierung der Zylinderfüllung verwendet wird.

1.2 Applikation des Diesel-Luftsystems

In der Motorentwicklung besteht die Aufgabe darin, nachdem die Struktur und die Funktionalitäten der ECU-Funktionen festgelegt sind, die vorhandenen ECU-Funktionen zu applizieren. Der Begriff *Applikation* kann mehrdeutig sein, da er sich in den meisten Fällen auf Aktivitäten bezieht, die darauf abzielen, den Motor anzupassen, damit er ein Optimum hinsichtlich der Emission, der Leistung und des Kraftstoffverbrauchs etc. erreicht, was in dieser Arbeit als *Motorapplikation* bezeichnet wird. Hier bedeutet Applikation die Bedatung der KF/KL in den ECU-Funktionen, so dass die funktionale Beziehung mit ausreichender Genauigkeit angenähert wird, was genau Gegenstand dieser Arbeit ist und im weiteren Verlauf als *ECU-Funktionsapplikation* bezeichnet wird. Darüber hinaus ist zu beachten, dass in dieser Arbeit nur die Applikation der KF/KL behandelt wird, die das stationäre Motorverhalten repräsentieren. Die KF/KL dieser Art werden als *stationäre* KF/KL bezeichnet. In den folgenden zwei Abschnitten werden die Motorapplikation und die ECU-Funktionsapplikation erklärt.

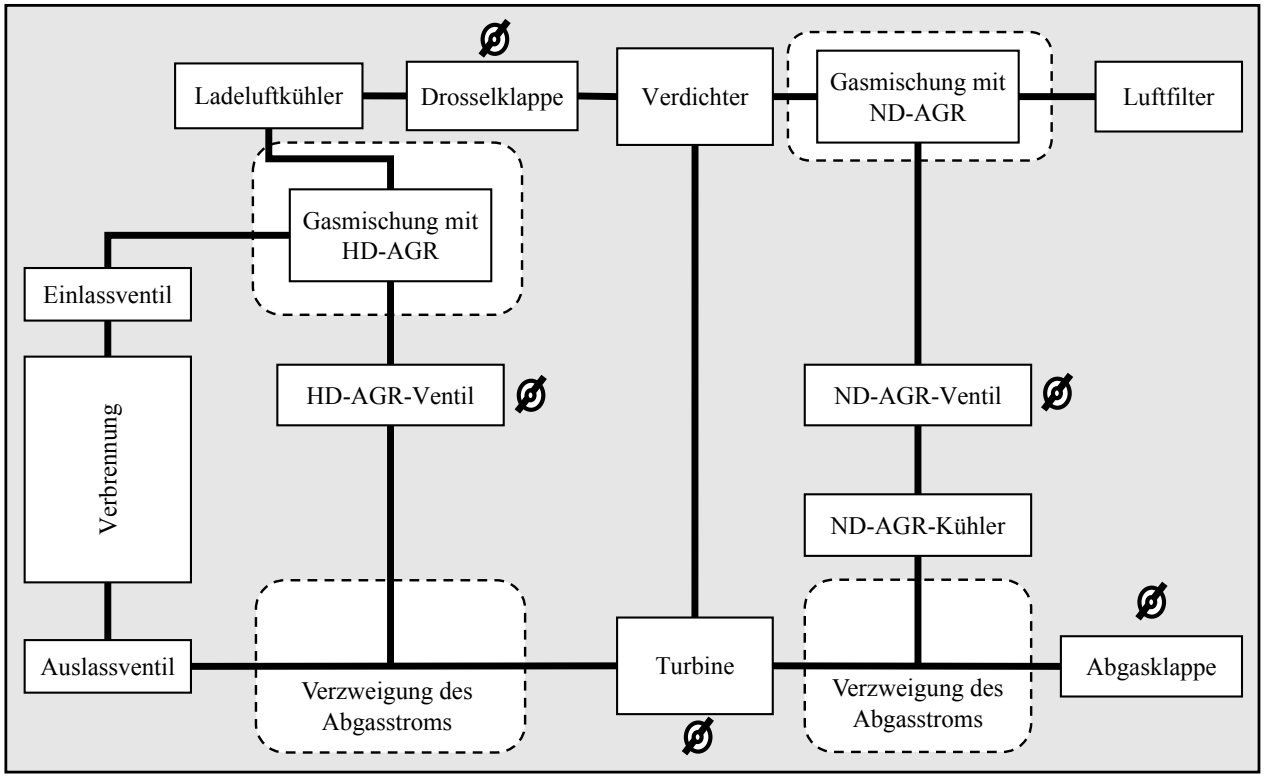


Abbildung 1.3: Schematische Darstellung der Subsysteme im Diesel-Luftsystem; in der Füll- und Entleermethode besteht das System aus Behältern und Klappen; auf dem Bild werden die Behälter mit gestrichelten Linien umrahmt; Klappen werden durch ein kleines Ventil-Zeichen darüber bezeichnet.

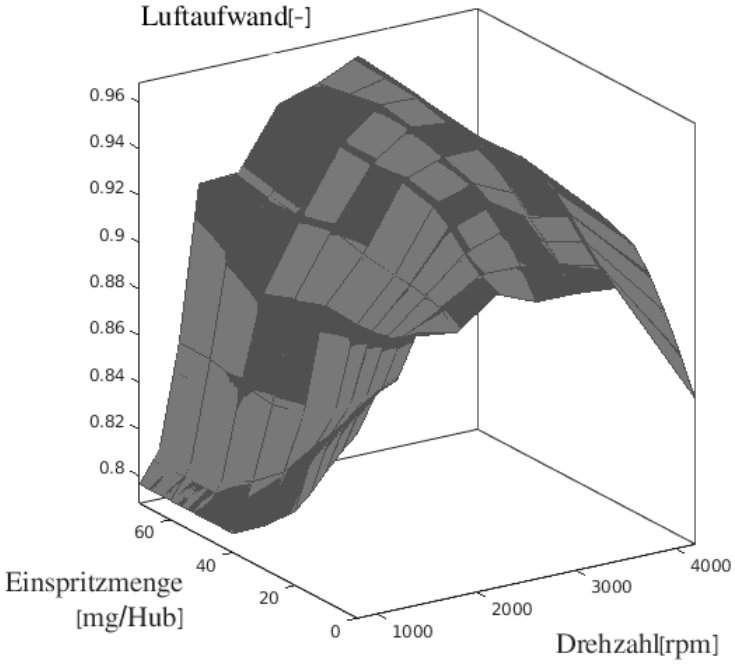


Abbildung 1.4: Typisches Kennfeld für die Darstellung eines empirischen Zusammenhangs.

1.2.1 Motorapplikation

Auch wenn die Motorapplikation nicht das Hauptthema dieser Abhandlung ist, können die Techniken, die in der Motorapplikation verwendet werden, hilfreich für die Untersuchung der ECU-Funktionsapplikation sein. Deswegen lohnt es sich auf jeden Fall, einen Einblick in den Arbeitsprozess und die dabei eingesetzten Techniken zu gewinnen. Bei der Motorapplikation geht es im Prinzip um einen Arbeitsprozess für die Erstellung der sogenannten Sollwertkennfelder für die Verstellparameter des Motors. Im Normalfall wird das Sollwertkennfeld arbeitspunktabhängig aufgestellt und die Einträge davon sind entweder Verstellparameter, die durch *Open-loop*-Systeme angesteuert werden, z. B. die Einspritzdauer und das Timing der Einspritzung ([Ise14]), oder Regelgrößen, die von *Closed-loop*-Systemen eingeregelt werden sollen, beispielsweise der Ladedruck, die Zylinderfüllung und die AGR-Rate. In Abbildung 1.5 wird die Anwendungsszene der Motorapplikation schematisch dargestellt. Im Verlauf der Motorapplikation wird an jedem Arbeitspunkt des Motors durch Einstellen der oben genannten Verstellparameter so appliziert, dass ein bestimmtes Ziel bezüglich z. B. der Emissionen, des Kraftstoffverbrauchs, der Fahrbarkeit etc. erreicht werden kann. In der Regel müssen sogar mehrere Ziele gleichzeitig berücksichtigt werden ([Ber12], [Kaj08] und [Zag14]). Zum Schluss ergeben sich die Sollwertkennfelder für die oben genannten Verstellparameter als die Endprodukte der Motorapplikation, normalerweise abhängig von der Motordrehzahl und der Last ([Lan+08]). Der gängige Arbeitsprozess für die Motorapplikation setzt sich aus fünf Schritten zusammen ([Cas+08]) und wird in Abbildung 1.6 geschildert.

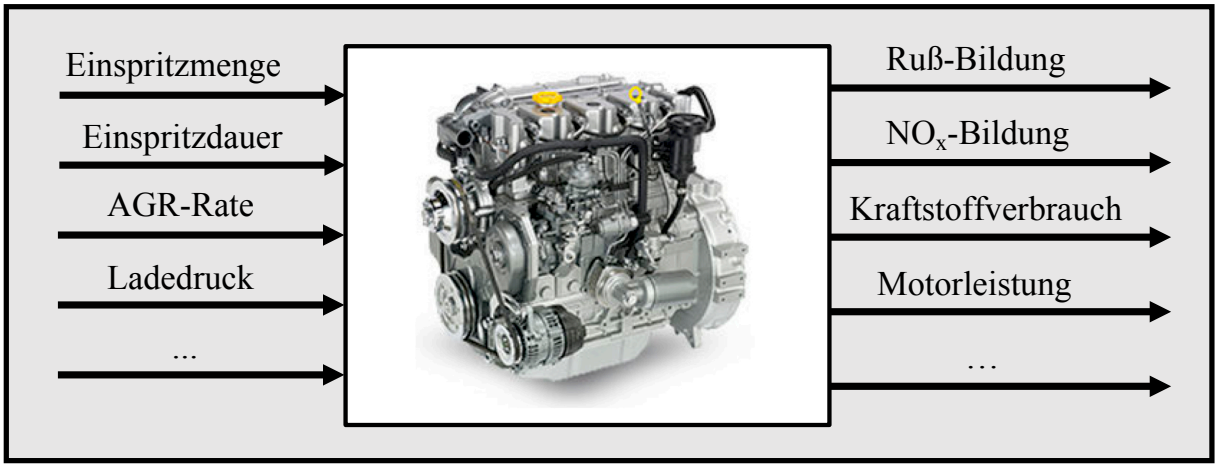


Abbildung 1.5: Schematische Darstellung der Motorapplikation; auf der linken Seite werden beispielhafte Verstellparameter aufgelistet und auf der rechten Seite die üblichen Zielgrößen in der Motorapplikation.

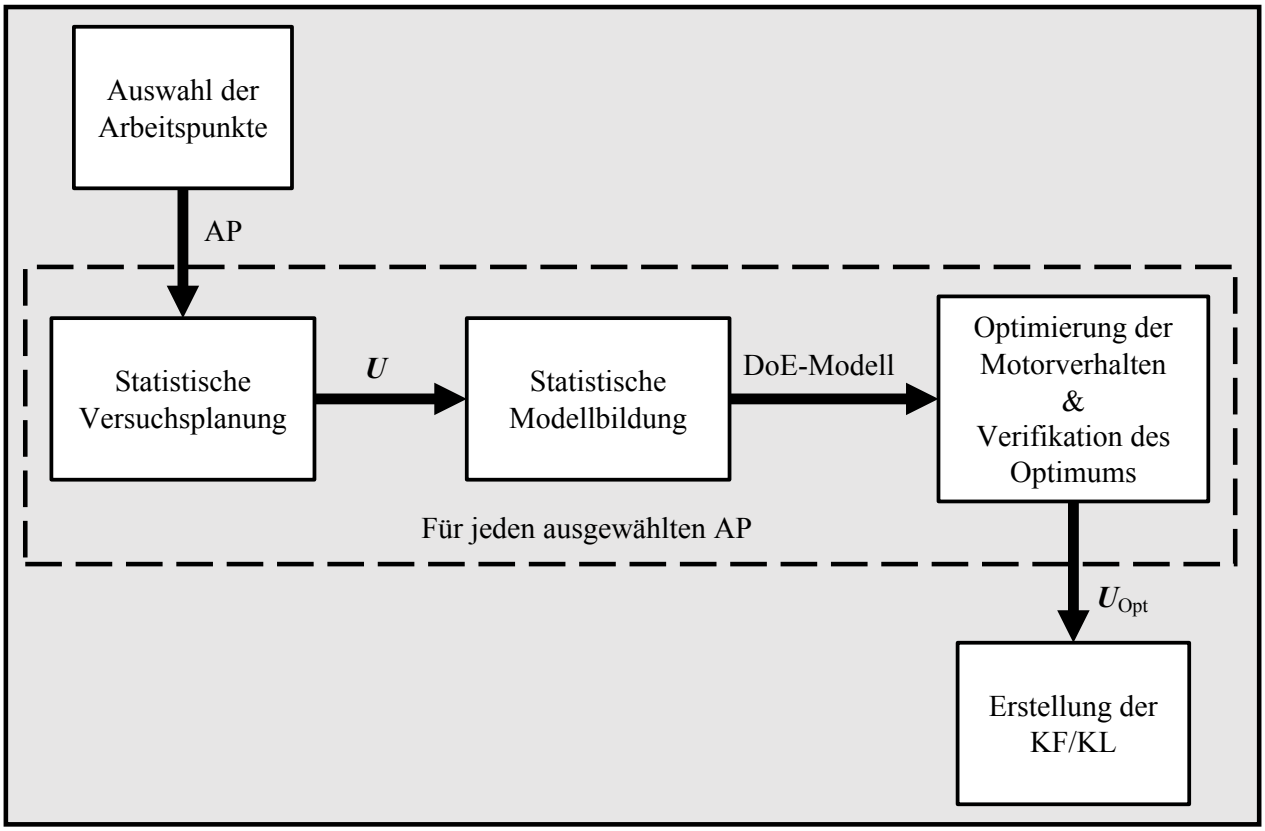


Abbildung 1.6: Arbeitsprozess der Motorapplikation; AP steht für den im ersten Arbeitsschritt ausgewählten Motorarbeitspunkt. $\boldsymbol{U}$ steht für den erstellten Versuchsplan bezüglich der Verstellparameter für die Konstruktion des DoE-Modells, und $\boldsymbol{U}_{\text{Opt}}$ ist die Kombination der optimalen Verstellparameter, die zum optimalen Motorverhalten führen; die drei Arbeitsschritte, die mit einem gestrichelten Viereck umrahmt sind, werden für jeden ausgewählten Arbeitspunkt durchführt.

1. ***Auswahl der relevanten Arbeitspunkte***

   In diesem Schritt geht es um die Bereitstellung der Grundvoraussetzung für eine erfolgreiche Motorapplikation, wobei die Ziele und der Fahrzyklus der Motorapplikation festgelegt werden. Aufgrund des ausgewählten Fahrzyklus werden die betroffenen Arbeitspunkte erkannt und analysiert. Die weiteren Arbeitsschritte der Motorapplikation beziehen sich auf die hier ausgewählten Arbeitspunkte.

2. ***Statistische Versuchsplanung und Durchführung der Experimente***

   Mit der Zunahme der verfügbaren Möglichkeiten für die Motorsteuerung ist der Einsatz statistischer Versuchsplanung, *Design of Experiment* (DoE), bei der Motorapplikation unabdingbar. Unter DoE wird eine statistische Methode verstanden, die versucht, den Zusammenhang zwischen den Einflussfaktoren und den entsprechenden Zielgrößen mit möglichst geringem Messaufwand abzubilden ([Bit+04], [Lum+04], [PM12] und [Haa04]). Typische DoE-Techniken in der Motorentwicklung sind die D-optimale Versuchsplanung und die raumfüllende Versuchsplanung ([Ise10]), die in

den Abschnitten 3.4 und 3.3 vorgestellt werden. Zu beachten ist, dass die Optimalität der optimalen Versuchsplanung ausgewählte Modellannahmen voraussetzt, die normalerweise erfahrungsgemäß zu treffen sind. Außerdem spielt die DoE-Technik eine wichtige Rolle in der Automatisierung der Applikation der Motorsteuergeräte ([KCR13]). Auf die Theorie und die Anwendungen von DoE wird in Kapitel 3 näher eingegangen.

Für jeden ausgewählten Arbeitspunkt wird mittels der DoE-Technik ein Versuchsplan erstellt, nach dem die entsprechenden Verstellparameter am Motorprüfstand variiert werden. Die Definition und die Festlegung des Umfangs der Verstellparameter stellen einen schwierigen und kritischen Punkt während der Erstellung des Versuchsplans dar. Dabei müssen die Grenzen der Verstellparameter für jeden Arbeitspunkt ermittelt werden, sonst gibt es die Gefahr von Motorschäden ([Gsc+01]). Letztendlich werden die daraus resultierenden Messdaten abgespeichert und stehen für die weitere Verarbeitung zur Verfügung.

3. ***Modellierung des Motorverhaltens***

   Basierend auf den Messdaten wird ein sogenanntes DoE-Modell gebildet, um den Zusammenhang zwischen den Verstellparametern und den Zielgrößen abzubilden, z. B. Emissionen, Motormoment etc. Potenzielle Kandidaten für die statistische Modellbildung sind die klassische *Polynomial Regression* (Poly), *Local Linear Model Trees* (LOLIMOT) ([Har14] und [M+03]), *Radial Basis Function Networks* (RBF) ([MA09] und [SLK05]), *MultiLayer Perceptron Networks* (MLP) ([Mar+12] und [EC14]), Gaussian Process Regression (GPR) ([Kol+14] und [The+15]) etc. In den Abschnitten 2.3 und 2.4 werden die Modellierungsmethoden im Detail behandelt und miteinander verglichen, um die geeignetste Methode für unsere Anwendung zu finden.

4. ***Optimierung des Motorverhaltens***

   Mit Hilfe der DoE-Modelle soll das Motorverhalten abhängig von den Verstellparametern optimiert werden. Um Motorschäden zu vermeiden, geht es in der Regel um ein Optimierungsproblem mit Begrenzungen. Dabei soll für jeden Arbeitspunkt aufgrund der im vorherigen Schritt gebildeten Modelle eine Kombination von Verstellparametern gefunden werden, welche die gewünschten Kriterien hinsichtlich Emission, Leistung etc. erfüllen ([Cas+12] und [MAP08] und [Jan08]). Außerdem besteht normalerweise bei der Motorapplikation die Aufgabe darin, mehrere Ziele gleichzeitig zu optimieren, d.h. bei der Motorapplikation sind multikriterielle Optimierungsprobleme zu lösen. Anschließend wird überprüft, ob das gefundene Optimum tatsächlich erreichbar ist oder nicht. Falls nicht, müssen noch Anpassungen an den entsprechenden DoE-Modellen vorgenommen werden ([Cas+08]).

5. ***Erstellung der Sollwertkennfelder für Verstellparameter***

   Nach den vorherigen vier Arbeitsschritten steht für jeden ausgewählten Arbeitspunkt eine optimale Kombination von Verstellparametern zur Verfügung. Jetzt besteht die Aufgabe darin, für jeden Verstellparameter ein Kennfeld im gesamten Arbeitsbereich des Motors zu bilden. Da es in der Praxis durchaus vorkommt, dass der Unterschied der gefundenen optimalen Verstellparameter zwischen zwei nahe beieinanderliegenden Arbeitspunkten sehr groß ist, muss das Kennfeld geglättet werden ([Cas+08]). Während der Glättung des Sollwertkennfelds muss auf der einen Seite beachtet werden, dass bestimmte Randbedingungen wie z. B. ein maximaler Gradient des Verstellparameters berücksichtigt werden. Auf der anderen Seite muss auch gewährleistet werden, dass die realen optimalen Verstellparameter möglichst nah am geglätteten Kennfeld liegen. Um dieses Problem zu lösen, wird in [Cas+08] versucht, schon in der Glättung die optimalen Verstellparameter mit einzuziehen.

Local Approach vs. Global Approach

In der Regel sollen die Arbeitsschritte 2, 3, 4 für jeden ausgewählten Arbeitspunkt durchgeführt werden und wird für jeden ausgewählten Arbeitspunkt ein DoE-Modell gebildet; dieser Ansatz wird als *Local Approach* ([Cas+08]) bezeichnet. Diese Methode hat den Nachteil, dass für jeden Arbeitspunkt ein spezifischer Versuchsplan erstellt werden muss, was den Applikationsaufwand erheblich erhöht. Außerdem gehört es zu den Nachteilen des Ansatzes, dass die Optimalität bezüglich der Zielgrößen bei lokalen DoE-Modellen durch die Glättung der Kennfelder verloren gehen kann. Im Gegensatz dazu wird beim *Global Approach* ([Cas+08]) versucht, das Motorverhalten direkt abhängig von allen möglichen Eingängen zu modellieren, und zwar allen Verstellparameter zusammen mit der Motordrehzahl und der Last. Auf diese Art und Weise reicht ein einheitlicher Versuchsplan für die Gewinnung der Messdaten aus und ist die Glättung der Kennfelder für die optimalen Verstellparameter zu vermeiden.

1.2.2 ECU-Funktionsapplikation

Bei der ECU-Funktionsapplikation handelt es sich u.a. um die experimentelle Identifikation der empirischen Zusammenhänge in den *Grey-Box*-Modellen und den *Black-Box*-Modellen der ECU-Funktionen, die physikalisch sehr schwer zu ermitteln sind. Eine andere wichtige Eigenschaft des empirischen Modells im *Grey-Box*-Modell ist die Nichtmessbarkeit des Ausgangssignals, das in den meisten Fällen einen physikalischen Parameter oder sogar einen künstlich erzeugten Korrekturfaktor darstellt. Im Folgenden wird die ECU-Funktion für die Berechnung des AGR-Massenstroms als Beispiel genommen, um den Arbeitsprozess der ECU-Funktionsapplikation zu verdeutlichen. Bei der ECU-Funktion für das Diesel-Luftsystem kann der AGR-Massenstrom durch die Drosselgleichung mit folgender Formel beschrieben werden([Ise14]):

$$\mathrm{mf}_{\mathrm{EGR}} = \sqrt{\frac{2}{R_{\mathrm{Exh}} T_{\mathrm{Us}}}} \mathrm{ar}_{\mathrm{EGR}} p_{\mathrm{Us}} \Psi(\frac{p_{\mathrm{Ds}}}{p_{\mathrm{Us}}}) \tag{1.1}$$

wobei R_{Exh} für die spezifische Gaskonstante des über das AGR-Ventil strömenden Abgases steht, T_{Us} und p_{Us} für die Temperatur und den Druck stromaufwärts des AGR-Ventils und p_{Ds} für den Druck stromabwärts des AGR-Ventils. Mit der Definition des Druckverhältnisses über das AGR-Ventil, $\pi = \frac{p_{\mathrm{Ds}}}{p_{\mathrm{Us}}}$, lässt sich die sogenannte Durchflussfunktion $\Psi(\pi)$ ([Ise14]) durch folgende Formel beschreiben:

$$\Psi(\pi) \equiv \begin{cases} \pi^{\frac{1}{\kappa}} \cdot \sqrt{\frac{1-\pi^{1-\frac{1}{\kappa}}}{1-\frac{1}{\kappa}}} & \text{für } \pi > \pi_c \\ \Psi_c & \text{für } \pi \leq \pi_c \end{cases} \tag{1.2}$$

wobei κ für den Isentropenexponenten des Abgases steht. Das kritische Druckverhältnis π_c und die Durchflussfunktion beim überkritischen Druckverhältnis Ψ_c lassen sich durch folgende Formeln berechnen:

$$\pi_c \equiv \left(\frac{2}{\kappa+1}\right)^{\frac{1}{1-\frac{1}{\kappa}}} \tag{1.3}$$

$$\Psi_c \equiv \frac{1}{\sqrt{1+\frac{1}{\kappa}}} \cdot \left(\frac{2}{\kappa+1}\right)^{\frac{1}{\kappa-1}} \tag{1.4}$$

In Abbildung 1.7 wird die Durchflussfunktion dargestellt.

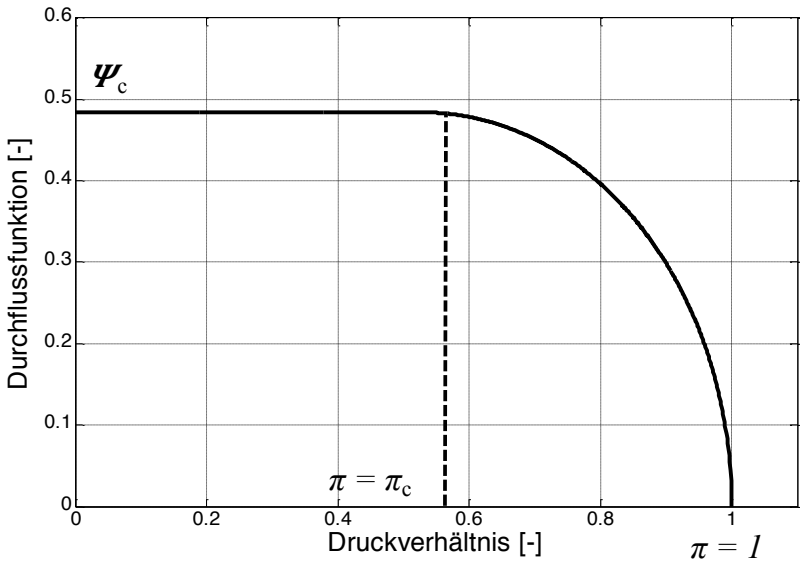


Abbildung 1.7: Verlauf der Durchflussfunktion $\Psi(\pi)$, abhängig vom Druckverhältnis π über das AGR-Ventil.

In Formel (1.1) bleibt außer den von anderen Modellen berechenbaren Signalen, z. B. Temperatur und Druck am AGR-Ventil und der Konstante R_{Exh}, die effektive Fläche $\mathrm{ar}_{\mathrm{EGR}}$ des AGR-Ventils als das einzige unbestimmte Element übrig. Es ist in der Regel davon auszugehen, dass die effektive Fläche nur vom Tastverhältnis des AGR-Ventils abhängt; damit gilt die folgende Beziehung:

$$\mathrm{ar}_{\mathrm{EGR}} = f(\mathrm{pos}_{\mathrm{EGR}}) \tag{1.5}$$

In der Praxis stellt sich die Darstellung der Beziehung in Formel (1.5) durch nur ein reines geometrisches Modell als nicht ausreichend heraus, da ein paar andere Einflussfaktoren, z. B. Verwirbelung und Turbulenz etc., nicht berücksichtigt werden. Um den AGR-Massenstrom mit hoher Genauigkeit zu modellieren, ist die Beziehung in Formel (1.5) experimentell zu identifizieren. Im Folgenden wird der allgemeine Arbeitsprozess, der sich aus vier Arbeitsschritten zusammensetzt, für die Applikation eines EM im *Grey-Box*-Modell erklärt.

1. ***Versuchsplanung und Versuchsdurchführung***

   Oft wird der Motor in der ECU-Funktionsapplikation mit der sogenannten Rastermessung vermessen, bei der die Messpunkte äquidistant bezogen auf die Motordrehzahl und die Einspritzmenge über den Arbeitsbereich verteilt sind. Zum Beispiel kann ein Dieselmotor exemplarisch mit einem Versuchsplan, der in Abbildung 1.8 gezeigt ist, mit und ohne AGR vermessen werden, um die notwendigen Messdaten für die ECU-Funktionsapplikation des Luftsystems zur Verfügung zu stellen. Beispielsweise für die Applikation des empirischen Modells in Formel (1.5) ergeben sich mit Variation des Tastverhältnisses $\mathrm{pos}_{\mathrm{EGR}}$ des AGR-Ventils N Messpunkte in der Form $\boldsymbol{D}_{\mathrm{Sen}} = \{T_{\mathrm{Us},i}, p_{\mathrm{Us},i}, p_{\mathrm{Ds},i}, \mathrm{mf}_{\mathrm{EGR},i} | i \in \{1 \ldots N\}\}$. Der Index *Sen* deutet darauf hin, dass die Messgrößen durch physikalische Sensoren erfasst werden.

   Hinter diesem Ansatz steckt die Idee, dass die Messbereiche aller empirischen Modelle für die Modellierung von beispielsweise Füllung, Druck stromaufwärts der Drosselklappe etc. im Luftsystem ausreichend abgedeckt werden, was manchmal nicht realistisch ist. Außerdem ergibt die Rastermessung keine optimale Verteilung der Messpunkte, und eine Reduzierung des Messaufwands ist mit dem Einsatz der DoE-Technik absehbar. Zusammengefasst ist die Versuchsplanung mit Rastermessung für die ECU-Funktionsapplikation suboptimal, was die Möglichkeit für den Einsatz von DoE-Technik eröffnet.

2. ***Schätzung der Applikationsparameter***

   Weil normalerweise der Ausgang des zu applizierenden empirischen Modells nicht direkt messbar ist, wie die effektive Fläche des AGR-Ventils, muss der gewünschte Applikationsparameter geschätzt oder identifiziert werden, bevor weitere Verarbeitungen vorgenommen werden. Im konkreten Fall für das obige Beispiel handelt es sich

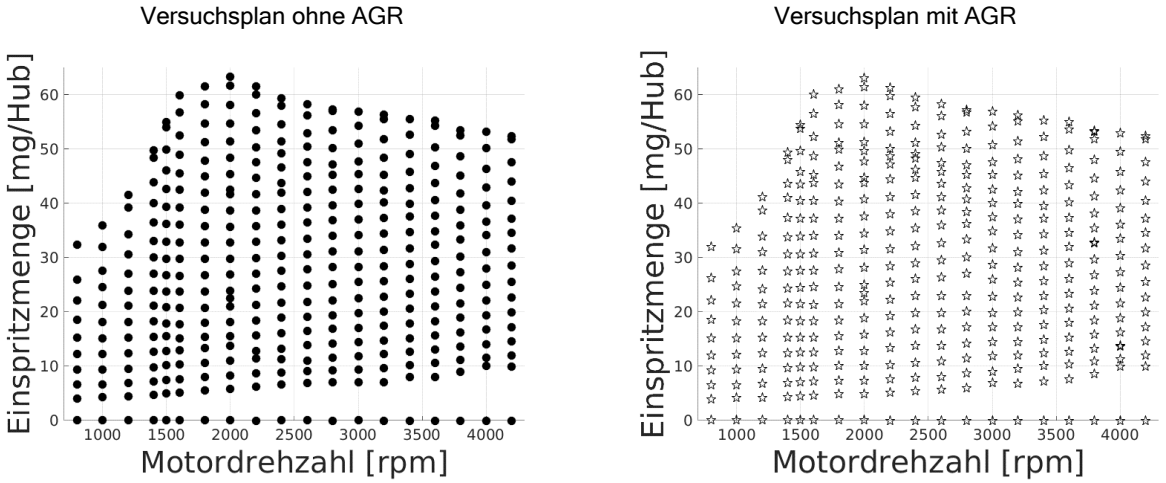


Abbildung 1.8: links: Rastermessung ohne AGR, Messpunkte werden durch Punkte dargestellt; rechts: Rastermessung mit AGR, Messpunkte werden durch Sterne dargestellt; bei beiden Versuchsplänen werden Messpunkte in einer (in den meisten Fällen) äquidistanten Weise auf dem Motorbetriebsbereich verteilt.

darum, eine probabilistische Aussage über den Applikationsparameter anhand der verrauschten Messdaten $\boldsymbol{D}_{\text{Sen}}$ der Toleranz der Sensoren und der Drosselgleichung in Formel (1.2) zu treffen. Die probabilistische Aussage enthält den geschätzten Mittelwert und die geschätzte Varianz des Applikationsparameters ar_{EGR} und der daraus resultierende Datensatz kann als $\boldsymbol{D}_{\text{App}} = \{\text{pos}_{\text{EGR},i}, \text{ar}_{\text{EGR},i}, \sigma^2_{\text{ar}_{\text{EGR}},i} | i \in \{1 \dots N\}\}$ formuliert werden. Der Grund, warum die Unsicherheit des Applikationsparameters mitgeschätzt wird, liegt darin, dass sie im Wesentlichen das Konfidenzintervall des geschätzten Mittelwerts reflektiert und deshalb als ein bedeutendes Kriterium für die Bewertung des Informationsgehalts im Applikationsmesspunkt benutzt werden kann.

Um Messdaten wie Temperaturen, Drücke und Massenströme (in diesem Fall $\boldsymbol{D}_{\text{Sen}}$), die tatsächlich mit physikalischen Sensoren gemessen werden, von dem Satz der geschätzten Applikationsparameter zu unterscheiden (wie oben erwähnter $\boldsymbol{D}_{\text{App}}$), die üblicherweise nicht direkt messbar sind und ebenfalls als Messpunkte zur Erstellung der entsprechenden KF/KL verwendet werden können, werden im weiteren Verlauf dieser Arbeit erstere als Beobachtungsmesspunkte bezeichnet und letztere als Applikationsmesspunkte.

3. ***Statistische Modellbildung***

   Ähnlich wie bei der Motorapplikation werden aufgrund der Messdaten $\boldsymbol{D}_{\text{App}}$ statistische Modellierungsmethoden verwendet, um das gewünschte empirische Modell zu ermitteln, was in Abbildung 1.9 gezeigt wird. Da davon ausgegangen wird, dass vor der Messung keine Information außer angenommener Differenzierbarkeit für die Form des zu ermittelnden Zusammenhangs zur Verfügung steht, kann nicht

ausgeschlossen werden, dass dieser Zusammenhang eine hohe Nichtlinearität aufweist. Mit dieser Nichtlinearität muss die verwendete Modellierungsmethode umgehen können. Darüber hinaus soll der Modellierungsprozess automatisch erfolgen, nämlich ohne irgendwelche Prozessparameter im Vorfeld einzustellen. Zu den wichtigen Anforderungen an die Modellierungsmethoden gehört auch die Fähigkeit, die eingangsabhängige Varianz von Applikationsmesspunkten beim Modelltraining zu berücksichtigen, damit die bereitgestellte Information voll und ganz ausgenutzt wird.

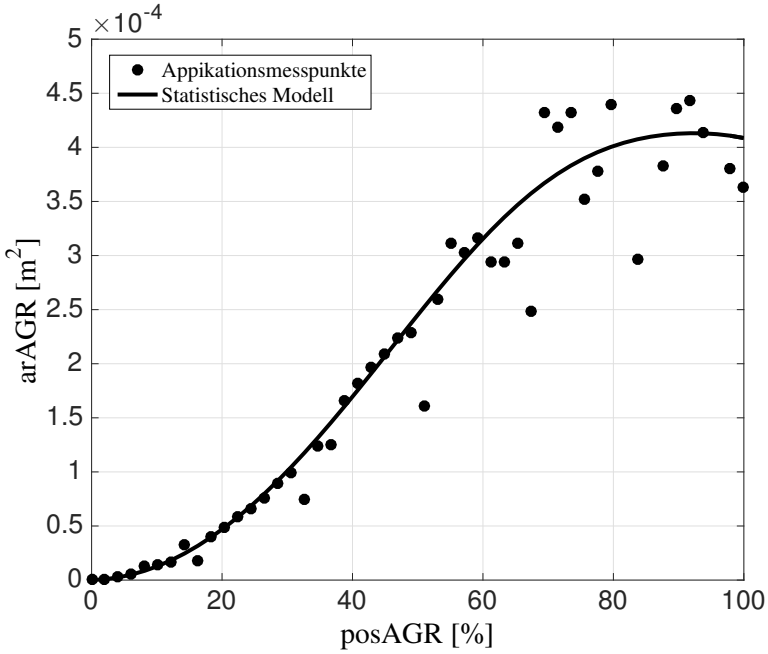


Abbildung 1.9: Modellbildung für das empirische Modell, das den Zusammenhang $\mathrm{ar}_{\mathrm{EGR}} = f(\mathrm{pos}_{\mathrm{EGR}})$ zwischen der effektiven Fläche und dem Tastverhältnis des AGR-Ventils beschreibt; die Punkte stehen für die Applikationsmesspunkte $\boldsymbol{D}_{\mathrm{App}}$ für die Modellbildung, die schwarze Linie ist das gebildete statistische Modell für $\mathrm{ar}_{\mathrm{EGR}}$; es ist auffallend, dass die Streuung der Applikationsmesspunkte im Bereich, wo das AGR-Ventil nahezu geschlossen ist, geringer ist als im Bereich, wo das AGR-Ventil weit geöffnet ist. Dadurch wird die Anforderung an die Modellierungsmethode gut erklärt, die eingangsabhängige Varianz der Applikationsmesspunkte beim Modelltraining zu berücksichtigen.

Die derzeit in der Industrie gebräuchlichste Technik für die statistische Modellierung bei der ECU-Funktionsapplikation ist der kennfeldbasierte Ansatz. Dabei wird das Kennfeld direkt aus den verrauschten Applikationsmesspunkten $\boldsymbol{D}_{\mathrm{App}}$ erzeugt. Erst in den letzten Jahren gab es Versuche, fortgeschrittene Modellierungstechniken für die Modellbildung einzusetzen, z. B. künstliche neuronale Netze (KNN) ([Mal+10] und [El +13]), GPR ([The+15]) etc.

4. ***Erstellung der KF/KL***

Neben limitierter Speicherkapazität war die Anforderung echtzeitfähiger Berechnung der ECU-Funktionen in der Vergangenheit ein ausschlaggebender Einwand gegen

den direkten Einsatz fortschrittlicher statistischer Modelle im Motorsteuergerät ([Ise10]). Der Ansatz der KF/KL zeichnet sich durch den geringen Anspruch an die Ressourcen für die Abspeicherung und Berechnung aus und hat stets in der Entwicklung von ECU-Funktionen eine breite Anwendung gefunden. Die KF/KL können aus statistischen Modellen oder sogar unmittelbar aus verrauschten Messpunkten durch die Methode der kleinsten Quadrate (KQ-Methode) erzeugt werden und setzen sich aus Stützstellen und den entsprechenden Funktionswerten zusammen. Zwischen den Stützstellen werden die Funktionswerte linear interpoliert. Während der Weg, die KF/KL direkt aus den verrauschten Messpunkten zu erstellen, ziemlich anfällig gegen das Messrauschen ist ([PM07]), zeigt die Variante der statistischen Modellbildung eine deutlich bessere Robustheit und wird in dieser Arbeit bevorzugt.

In Abbildung 1.10 wird der Gesamtarbeitsprozess der ECU-Funktionsapplikation graphisch zusammengefasst.

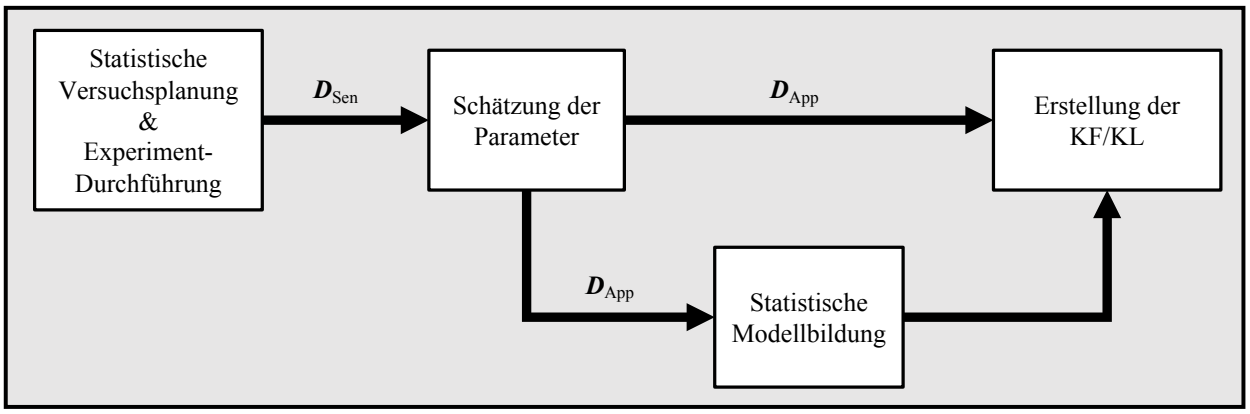


Abbildung 1.10: Arbeitsprozess der ECU-Funktionsapplikation; dabei werden verschiedene Ansätze für die Erstellung der KF/KL aus $\boldsymbol{D}_{\text{App}}$ dargestellt.

1.2.3 Diskussion

Nachdem die Funktionsweisen der zwei Arten von Applikationen im Feld der Motorentwicklung im Detail vorgestellt wurden, lohnt es sich, sich noch kurz mit folgenden Themen zu beschäftigen, um eine Übersicht zu erlangen.

Offline-DoE vs. Online-DoE

Sowohl bei der Motorapplikation als auch bei der ECU-Funktionsapplikation spielt die Versuchsplanung eine entscheidende Rolle, was die Verringerung des Applikationsaufwands angeht. In der Regel wird der *vollständige* Versuchsplan, z. B. bei der Rastermessung, dem raumfüllenden Design und dem D-optimal Design, bereits festgelegt, bevor die Experimente durchgeführt werden. Während des Messvorgangs wird die Möglichkeit der Intervention und Anpassung ausgeschlossen, egal wie die Messdaten aussehen. Dieser Ansatz lässt

sich im Allgemeinen als Offline-DoE bezeichnen. Im Gegensatz dazu kann der Arbeitsprozess der Applikation im Rahmen eines sogenannten Online-DoE organisiert werden, wobei die Versuchsplanung iterativ erfolgt, und zwar beruhend auf den bisher gesammelten Messdaten. Das Online-DoE beschäftigt sich mit der *aktiven* Suche nach den Messpunkten (*Active Learning*), die maximale Informationsgehalte für die Applikation aufweisen. Die Idee des aktiven Lernens ist nicht neu und wird bereits in vielen Bereichen erfolgreich umgesetzt, siehe Details in [KCR13], [Klö09], [KT14] und [XC11]. In Abbildung 1.11 werden die Arbeitsprozesse von Offline-DoE und Online-DoE dargestellt. Die Theorie und die Anwendbarkeit des aktiven Verfahrens wird in Kapitel 3 erläutert.

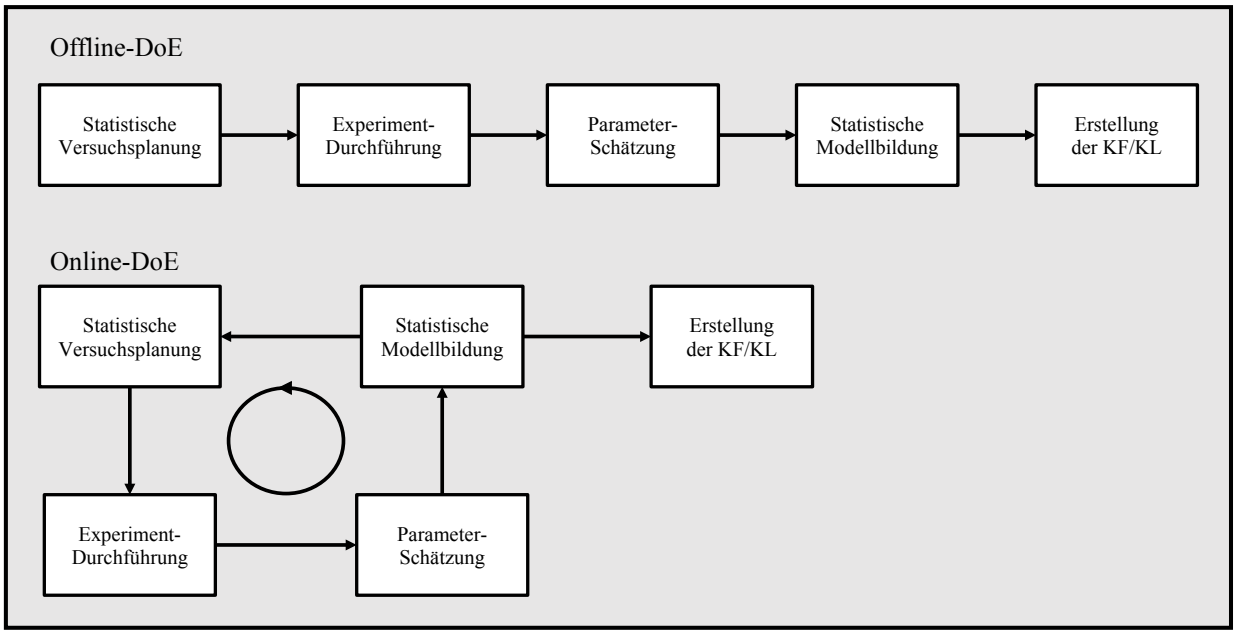


Abbildung 1.11: Vergleich der Arbeitsprozesse von Offline-DoE und Online-DoE.

Unterschiede zwischen Motorapplikation und ECU-Funktionsapplikation

Der erste große Unterschied zwischen den beiden Arten von Applikation ist die Zielsetzung. Bei der Motorapplikation handelt es sich im Prinzip um ein Optimierungsproblem, bei dem die Anforderung an die Qualität der DoE-Modelle, die im Optimierungsproblem verwendet werden, inhomogen ist, und zwar ist der Anspruch an die Modellgenauigkeit umso höher, je näher sie an den Optima liegen. Während der Versuchsplanung müssen demnach die Bereiche in der Nähe von den eventuellen Optima intensiver abgetastet werden als anderswo im Suchraum, was zur Effizienzsteigerung des Suchverfahrens deutlich beitragen könnte. Im Rahmen der Online-DoE ist also eine höhere Effizienz zu erwarten. Die ECU-Funktionsapplikation strebt eine möglichst hohe Genauigkeit der Approximation im gesamten Eingangsraum des Modells an und stellt daher unterschiedliche bzw. höhere Ansprüche an die Versuchsplanung als die Motorapplikation. In Abschnitt 4.3.2 wird dies eingehender diskutiert.

Ein weiterer wichtiger Unterschied ist folgender: Bei der Motorapplikation werden die zu optimierenden Zielgrößen unmittelbar von physikalischen Sensoren gemessen. Die Unsi-

cherheit des gemessenen Messpunkts wird durch die Charakteristik der eingesetzten Sensoren bestimmt und bleibt während des Vermessungsvorgangs bekannt und konstant. Bei der ECU-Funktionsapplikation sind die Ausgänge der EM, die appliziert werden sollen, zumeist nicht direkt messbar, wie z.B. die effektive Fläche des AGR-Ventils, und müssen mit Hilfe der erfassten Sensorwerte und der relevanten Gleichungen geschätzt werden. Die Unsicherheit des geschätzten Messpunkts wird signifikant von der Nichtlinearität des involvierten Prozesses beeinflusst, was bei der Versuchsplanung in Betracht gezogen werden muss. Zum Beispiel ist in Abbildung 1.7 zu erkennen, dass die Durchflussfunktion eine starke Nichtlinearität aufweist, insbesondere wenn sich das Druckverhältnis an den Arbeitspunkt $\pi = 1$ annähert. Diese Eigenschaft wird Schwierigkeiten bei dem Versuch bereiten, die effektive Fläche des AGR-Ventils genau zu schätzen, wenn das Druckgefälle darüber gering ist. Dies wird in Abschnitt 4.1 ausführlich erläutert.

1.3 Zielsetzung und Aufbau der Arbeit

Diese Abhandlung beschäftigt sich mit der Entwicklung eines Verfahrens, das die ECU-Funktionsapplikation optimal hinsichtlich der Anzahl der benötigten Messpunkte und der erreichten Applikationsqualität und automatisiert durchführen kann.

Im Speziellen besteht die Aufgabe darin, die EM in *Grey-Box*-Modellen und *Black-Box*-Modellen der ECU-Funktionen, die das stationäre Motorverhalten darstellen, mit dem geringsten experimentellen Aufwand und einem hohen Automatisierungsgrad zu identifizieren. Da die Entwicklung der Versuchsplanung weitgehend von der ausgewählten Modellierungsmethode geprägt wird, was auch in Abschnitt 3 erläutert wird, soll als Erstes versucht werden, eine geeignete Modellierungsmethode für unseren Anwendungsfall zu finden. Statt KF/KL werden alternative Modellierungsmethoden genutzt, um eine bessere Qualität bei der globalen Approximation von Zusammenhängen zu bekommen. Als potenzielle Kandidaten kommen existierende Ansätze, z. B. KNN, GPR, *Relevance Vector Machine* (RVM) etc., und eine in dieser Arbeit neu entwickelte Methode in Frage. Eine zielführende Versuchsplanung, die für eine effiziente und intelligente Verteilung der Messpunkte sorgen soll, muss ebenfalls entworfen und implementiert werden.

Zu beachten ist, dass bisher in der Literatur und in Forschungsinstituten lediglich die Applikation eines einzelnen EM als Untersuchungsobjekt betrachtet wurde, was der Realität des aktuellen Entwicklungsprozesses nicht hundertprozentig entspricht. Tatsächlich sind in den ECU-Funktionen für z.B. das Diesel-Luftsystem zahlreiche EM zu applizieren, und diese sind physikalisch miteinander verbunden. Wenn alle EM als ein Netzwerk betrachtet werden, kann eine Anpassung des Versuchsplans, die sich für die Applikation eines EM verbessernd auswirkt, einen eher negativen Effekt für die Applikation eines anderen EM hinterlassen. Daher muss die physikalische Struktur des Systems bei der Entwicklung der Versuchsplanung in Betracht gezogen werden, wenn es sich um die Applikation von

mehreren EM als ein Netzwerk handelt.

Um die Ziele zu erreichen, wird die Arbeit folgendermaßen organisiert:

- Kapitel 2: In diesem Kapitel werden zunächst die Grundlagen statistischer Modellierung erläutert. Anschließend werden *State-of-the-Art* Regressionsmodelle vorgestellt. Für die Auswahl der Regressionsmodelle werden ausführlich Anforderungen aus der Zielsetzung abgeleitet. Basierend auf den detaillierten Anforderungen werden die vorgestellten Regressionsmodelle miteinander verglichen und bewertet. Zum Schluss wird das Gaußprozessmodell als das geeignetste Regressionsmodell für unseren Anwendungsfall identifiziert.

- Kapitel 3: Dieses Kapitel beschäftigt sich mit der statistischen Versuchsplanung. Zunächst werden die Ansätze der statistischen Versuchsplanung klassifiziert, um eine Übersicht zur Verfügung zu stellen. Dann werden die Funktionsweisen der klassischen stufigen Versuchsplanung, der raumfüllenden Versuchsplanung, der optimalen Versuchsplanung und der sequentiellen Versuchsplanung erklärt.

- Kapitel 4: Dieses Kapitel befasst sich mit der Entwicklung eines Algorithmus für einen automatischen Applikationsprozess mit möglichst geringem Messaufwand und besteht aus vier Teilen. Im ersten Teil wird der Algorithmus für die Applikation eines einzelnen *Grey-Box*-Modells vorgestellt. Dafür wird zunächst ein neuartiges Gaußprozessmodell entwickelt, das die eventuelle Nichtstationarität im zu applizierenden Zusammenhang automatisch erkennen und modellieren kann. Daraufhin wird eine Hybride Abtaststrategie vorgeschlagen, die bei der adaptiven Versuchsplanung die Abdeckung des Versuchsraums, das Modellverhalten und die Unsicherheit der Abtastpunkte berücksichtigt. Darüber hinaus wird ein heuristisches automatisches Stopp-Kriterium für den automatischen Abbruch des Vermessungsvorgangs entwickelt.

  Der zweite Teil setzt sich mit der Erweiterung des Algorithmus aus dem ersten Teil auseinander, um ein Netzwerk von *Grey-Box*-Modellen applizieren zu können. Dieser Teil fokussiert auf die Darstellung der Besonderheit bei der Applikation eines Netzwerks von *Grey-Box*-Modellen und die Herangehensweise, diese Besonderheit zu behandeln.

  Der dritte Teil beschreibt den Einsatz des entwickelten Algorithmus an einem Anwendungsbeispiel: aus einem bestehenden Datensatz wird die informativste Teilmenge von Messpunkten für die Aufgabe der Applikation ausgewählt.

  Der vierte Teil schildert den Einsatz des entwickelten Algorithmus an einem Anwendungsbeispiel: Messpunkte werden aktiv und unabhängig erzeugt, um die hauptsächlichen KF/KL im Diesel-Luftsystem zu applizieren.

- Kapitel 5: In diesem Kapitel werden durchgeführte Experimente mit dem neu entwickelten Algorithmus beschrieben und deren Ergebnisse diskutiert.
- Kapitel 6: Dieses Kapitel gibt eine kurze Zusammenfassung und eröffnet einen Ausblick auf weitere mögliche Entwicklungen.

2 Statistische Modellbildung für stationäre Zusammenhänge

Wie eingangs in Abschnitt 1.2 beschrieben wurde, ist die statistische Modellbildung ein unerlässlicher Bestandteil in der Applikation von Motorsteuergeräten, sowohl in der Motorapplikation als auch in der ECU-Funktionsapplikation. Außerdem wird die Versuchsplanung für die Applikation teilweise auch von der verwendeten Modellierungsmethode bestimmt. Deswegen ergibt es mehr Sinn, zunächst die relevanten und aktuellen Techniken für die statistische Modellbildung ausführlich zu erläutern und ihre Anwendbarkeit für das Thema dieser Arbeit zu bewerten.

Dieses Kapitel ist wie folgt gegliedert: In Abschnitt 2.1 wird als Erstes die grundlegende Theorie und Funktionsweise der statistischen oder datenbasierten Modellbildung vorgestellt. Anschließend setzt sich der Abschnitt 2.2 mit der Modellselektion in der statistischen Modellbildung auseinander, die eine Voraussetzung sowohl für die Erhöhung der Modellgenauigkeit als auch für die Automatisierung des Modelltrainings darstellt. In Abschnitt 2.3 werden die relevanten Modellierungsmethoden für die statistische Modellbildung klassifiziert und erläutert. Zudem ist die Diskussion über die Anwendbarkeit der vorgestellten Modellierungsmethoden für die ECU-Funktionsapplikation ein Schwerpunkt dieses Abschnitts. Schließlich beschäftigt sich Abschnitt 2.4 mit der Gegenüberstellung und Bewertung der in Abschnitt 2.3 genannten Modellierungsmethoden, um die geeignetste Methode für die Anwendung in dieser Arbeit zu identifizieren.

2.1 Grundsätzliche Theorie und Funktionsweise

Im Allgemeinen findet die statistische Modellierung ihre Anwendung dabei, einen physikalisch schwer oder unmöglich abbildbaren Zusammenhang zu approximieren. Wie Abbildung 2.1 zeigt, versucht man dabei durch einen aus Experimenten erzeugten Datensatz $\boldsymbol{D} = \{\boldsymbol{X}_i, \boldsymbol{y}_i | i \in \{1 \dots N\}\}$ den Zusammenhang zwischen $\boldsymbol{X}$ und $\boldsymbol{y}$ (in der ECU-Funktionsapplikation werden die Applikationsmesspunkte $\boldsymbol{D}_{\text{App}}$ verwendet, siehe Abschnitt 1.2.2) zu ermitteln, wobei der Vektor $\boldsymbol{X} = [x_1, x_2, \dots, x_j]$ der Eingangsvektor und j die Dimension des Eingangs ist. Außerdem ist $\boldsymbol{y}$ der Ausgangsvektor und N steht für die Anzahl der Messpunkte in $\boldsymbol{D}$.

Für dieses Regressionsproblem existieren in der Literatur zwei fundamental unterschiedliche Lösungszugänge: der frequentistische Ansatz und der bayessche Ansatz. In der frequentistischen Ansicht herrscht die Meinung, dass der Datensatz von einem wahren und festen Prozess oder Zusammenhang generiert wird und die Lösung des Regressionsproblems darin besteht, die Wahrheit aufgrund der verrauschten Messdaten zu finden bzw. zu schätzen. Im Gegensatz dazu glaubt man in der bayesschen Ansicht nicht an eine einzige richtige Wahrheit, sondern versucht aufgrund der a-priori-Information darüber und der

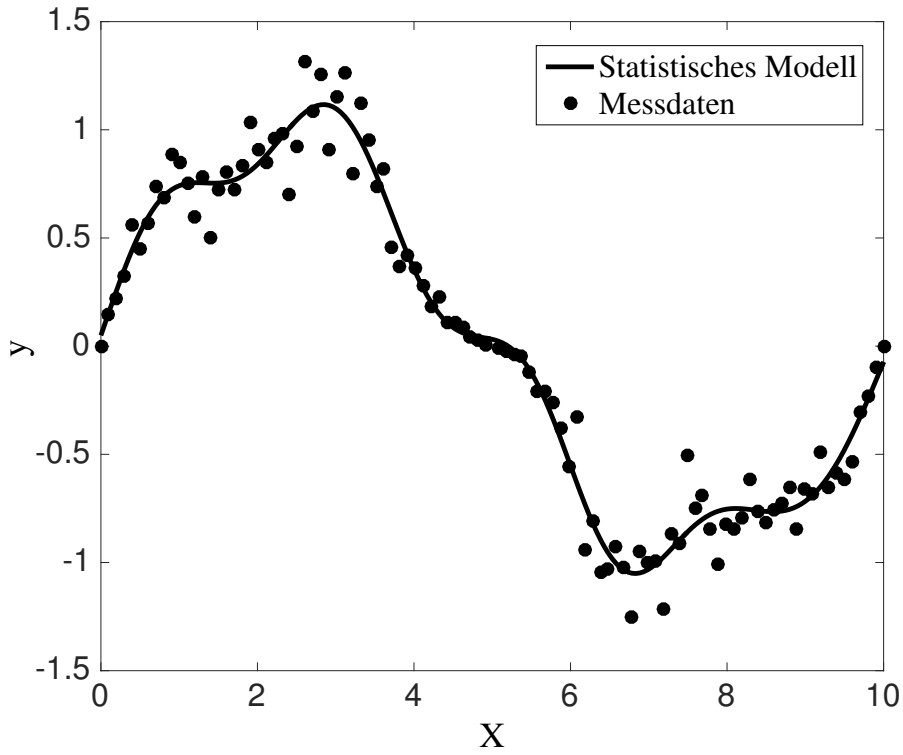


Abbildung 2.1: Darstellung eines Regressionsproblems; die schwarzen Punkte stehen für die Menge $\boldsymbol{D}$ der gesammelten Messpunkte; im Rahmen eines Regressionsproblems wird versucht, mittels $\boldsymbol{D}$ den Zusammenhang $\boldsymbol{y} = f(\boldsymbol{X})$ zwischen dem Eingang $\boldsymbol{X}$ und dem Ausgang $\boldsymbol{y}$ zu ermitteln. Die Zielsetzung dabei ist normalerweise eine genaue Approximation des Zusammenhangs $\boldsymbol{y} = f(\boldsymbol{X})$ durch ein statistisches Modell $\boldsymbol{y} = \hat{f}(\boldsymbol{X})$, das durch die durchgezogene Kurve dargestellt wird.

beobachteten Messdaten Aussagen über die a-posteriori-Wahrscheinlichkeitsverteilung des gesuchten Objekts, z. B. Parameters und stochastischen Prozesses, zu finden.

2.1.1 Frequentistischer Ansatz

Methode der kleinsten Quadrate

Wenn man von einem wahren Zusammenhang $\boldsymbol{y} = f(\boldsymbol{X})$ ausgeht und versucht, ein Modell zu bilden bzw. zu fitten, das zu den Messdaten $\boldsymbol{D}$ am besten passt, kann im frequentistischen Paradigma das Regressionsproblem wie folgt formuliert werden:

$$\boldsymbol{y} = f(\boldsymbol{X}) + \epsilon \tag{2.1}$$

wobei das Messrauschen mit ϵ bezeichnet wird. Es wird normalerweise angenommen, dass das Messrauschen unabhängige normalverteilte Werte aufweist, was in Praxis nicht ganz zutrifft, siehe [Bay+13], [KZL13] und [GWB97]. Tatsächlich kann die Varianz des Messrauschens in vielen Fällen vom Eingangsvektor des Messpunkts abhängen, manchmal kann es

sogar sein, dass das Messrauschen statt einer Normalverteilung eine studentsche t-Verteilung aufweist ([BR12]).

In der Literatur wird üblicherweise $\boldsymbol{X}$ als unabhängige Variable und $\boldsymbol{y}$ als abhängige Variable bezeichnet ([Mur12]). In dieser Arbeit wird zur Vereinfachung $\boldsymbol{X}$ als Eingang und $\boldsymbol{y}$ als Ausgang bezeichnet. Zu vermerken ist, dass es in dieser Abhandlung nur um zahlenmäßige Eingänge und Ausgänge geht. Darüber hinaus beschränkt sich die Dimension des Ausgangs und Eingangs in den weiteren theoretischen Formulierungen und Herleitungen der Arbeit auf 1, ohne die allgemeine Gültigkeit zu verlieren.

Im Rahmen der Regression besteht die Aufgabe darin, den Ausgang des modellierten Prozesses mit möglichst hoher Genauigkeit zu prädizieren. Diese Anforderung lässt sich wie folgt mathematisch formulieren:

- Die Zielsetzung der statistischen Modellbildung ist, einen Schätzer $\hat{f}(x)$ von y zu erhalten, der eine vorgegebene Verlustfunktion $L(\hat{f}(x), y)$ für die Beschreibung des Modellfehlers minimieren kann ([FHT01]).

Da der Ausgang immer von einem Messrauschen überlagert wird, wird die Verlustfunktion $L(\hat{f}(x), y)$ in der Regel in der Form eines Erwartungswerts angegeben. Die am häufigsten verwendete Verlustfunktion ist der Erwartungswert des Quadratfehlers, und unsere Problemformulierung ergibt sich zu ([FHT01])

$$\hat{f}_{\text{opt}}(x) = \min_{\hat{f}(x)} \int \int (\hat{f}(x) - y)^2 p(x, y) \mathrm{d}x \mathrm{d}y \tag{2.2}$$

wobei $p(x, y)$ die multivariate Verteilung des Eingangsvektors x und des Ausgangs y ist. Die Lösung dazu ist (siehe [FHT01] für die vollständige Herleitung)

$$\hat{f}_{\text{opt}}(x) = E(y|x) \tag{2.3}$$

wobei E für den Erwartungswert steht. Neben der Verlustfunktion mit Quadratfehler kommt manchmal auch die Verlustfunktion mit absolutem Fehler $L(\hat{f}(x), y) = |\hat{f}(x) - y|$ zum Einsatz. Die Lösung zu dieser Problemformulierung lautet ([Bis06])

$$\hat{f}_{\text{opt}}(x) = \text{median}(y|x) \tag{2.4}$$

Die Lösung in Formel (2.4) ist robuster gegen das Messrauschen, aber die Unstetigkeit der Verlustfunktion hat den breiten Einsatz beschränkt ([Van+61]). In dieser Arbeit wird nur die Verlustfunktion mit Quadratfehler betrachtet. Aus der vorherigen Diskussion kann der Schluss gezogen werden, dass der theoretisch optimale Schätzer für das in Formel (2.1) dargestellte Regressionsproblem der bedingte Erwartungswert des Ausgangs y ist, wenn

die Verlustfunktion der Erwartungswert des Quadratfehlers ist und das Messrauschen eine unabhängige Normalverteilung verfolgt.

Während die Formel (2.3) den optimalen Schätzer für das Regressionsproblem darstellt, kann das Problem in der Realität nach diesem Prinzip nicht gelöst werden, da die exakte Berechnung des Erwartungswerts $E(y|x)$ unendliche viele Messpunkte braucht. Bei einem Datensatz $\boldsymbol{D} = \{x_i, y_i | i \in \{1 \dots N\}\}$ mit begrenzter Anzahl von Messpunkten bietet sich die altbekannte KQ-Methode[1] als eine Möglichkeit zur Lösung an:

$$\hat{f}_{\text{opt}}(x) = \min_{\hat{f}(x)} \sum_{i=1}^{N} (\hat{f}(x_i) - y_i)^2 \tag{2.5}$$

Dieser Ansatz stellt eine Approximation für den Schätzer in Formel (2.3) dar. Es ist offensichtlich, dass die Formel (2.5) unendlich viele Lösungen liefern kann, wenn keine zusätzlichen Nebenbedingungen eingeführt werden ([FHT01]), d. h. eine Modellannahme ist für die Lösung des Regressionsproblems notwendig.

Maximum-Likelihood-Methode

Aus Sicht der Wahrscheinlichkeitstheorie kann das Regressionsproblem etwas anders ausgedrückt werden. Dabei wird angenommen, dass die Messpunkte $\boldsymbol{y}$ als Stichprobe aus einer Wahrscheinlichkeitsverteilung $p(y)$ gezogen werden und dass diese Wahrscheinlichkeitsverteilung durch den Parametersatz Θ zu charakterisieren ist ([Mac03]). Somit kann die statistische Modellbildung mit folgender Formel beschrieben werden ([Mac03]):

$$p(y) = p(y|x, \Theta) \tag{2.6}$$

Das Ziel der Modellierung in diesem Kontext ist, den wahren Parametersatz Θ^* mit Hilfe des Datensatzes $\boldsymbol{D}$ zu finden. Bevor wir fortfahren, wird zunächst eine Metrik aus der Informationstheorie eingeführt, die Kullback-Leibler-Divergenz (KL-Divergenz), die den Unterschied zwischen zwei Wahrscheinlichkeitsverteilungen P und Q beschreibt gemäß der Formel ([KL51]):

$$D_{\text{KL}}(P||Q) = \int_{-\infty}^{+\infty} p(x) \log \frac{p(x)}{q(x)} \mathrm{d}x \tag{2.7}$$

wobei $p(x)$ und $q(x)$ jeweils die Wahrscheinlichkeitsdichten der Wahrscheinlichkeitsverteilungen P und Q sind. Diese in Formel (2.7) definierte Metrik ist asymmetrisch und nichtnegativ ([CT12]). Außerdem gilt $D_{\text{KL}}(P||Q) = 0$, wenn und nur wenn (*if and only if*) die Wahrscheinlichkeitsverteilungen P und Q fast überall gleich sind ([Kul97]). Wenn man versucht,

[1] Es gibt mehrere Varianten der KQ-Methode, z. B. die gewichteten kleinsten Quadrate, die totalen kleinsten Quadrate und die orthogonalen kleinsten Quadrate. Allerdings ist hier die klassische Methode der gewöhnlichen kleinsten Quadrate (*Ordinary Least Squares* auf Englisch) gemeint.

den Unterschied zwischen dem wahren Parametersatz Θ^* und einem Schätzer $\hat{\Theta}$ für den wahren Parametersatz Θ^* mithilfe der KL-Divergenz zu ermitteln, lässt sich sehr schnell erkennen ([And02]), dass die KL-Divergenz zwischen der wahren Wahrscheinlichkeitsdichte $p(y|x, \Theta^*)$ und der geschätzten Wahrscheinlichkeitsdichte $p(y|x, \hat{\Theta})$ minimiert wird, wenn der wahre Parametersatz Θ^* gleich dem geschätzten Parametersatz $\hat{\Theta}$ ist, und vice versa. Und zwar gilt:

$$\underset{\hat{\Theta}}{\text{minimize}}\ D_{\text{KL}}(p(y|x, \hat{\Theta})||p(y|x, \Theta^*) \quad \Longleftrightarrow \quad \hat{\Theta} = \Theta^* \tag{2.8}$$

Wird die Definition in Formel (2.7) in Formel (2.8) eingesetzt, ergibt sie sich zu ([And02]):

$$\underset{\hat{\Theta}}{\text{minimize}}\ E[\log p(y|x, \Theta^*) - \log p(y|x, \hat{\Theta})] \quad \Longleftrightarrow \quad \hat{\Theta} = \Theta^* \tag{2.9}$$

Da nach dem frequentistischen Ansatz der wahre Parametersatz Θ^* fest ist und deswegen als eine Konstante bei dem Optimierungsproblem in Formel (2.9) anzusehen ist, reduziert sich die Formel (2.9) zu folgender Darstellung:

$$\underset{\hat{\Theta}}{\text{minimize}}\ E[-\log p(y|x, \hat{\Theta})] \quad \Longleftrightarrow \quad \hat{\Theta} = \Theta^* \tag{2.10}$$

Genauso wie bei der Formel (2.3) ist die Formel (2.10) nicht unmittelbar einsetzbar, da für die exakte Bestimmung des Erwartungswerts unendliche viele Messpunkte benötigt werden. Bei einem Datensatz $\boldsymbol{D} = \{x_i, y_i | i \in \{1 \dots N\}\}$ mit begrenzter Anzahl von Messpunkten wird die Maximum-Likelihood-Methode (ML-Methode) als die approximierte Version von Formel (2.10) mit folgender Formel verwendet:

$$\Theta^* = \arg\min_{\hat{\Theta}} \sum_{i=1}^{N} [-\log p(y_i|x_i, \hat{\Theta})] \tag{2.11}$$

Die vorausgegangenen Herleitungen von Formel (2.7) bis zu Formel (2.11) rechtfertigen den Einsatz der ML-Methode zur Schätzung des wahren Parametersatzes Θ^*.

Diskussion

Es ist offensichtlich, dass sich die Ideen hinter der KQ-Methode und der ML-Methode sehr stark voneinander unterscheiden, obwohl beide auf der frequentistischen Weltsicht basieren. In [Hal99] wird allerdings gezeigt, dass die KQ-Methode äquivalent zur ML-Methode ist, wenn ein normalverteiltes Messrauschen und ein linearer Zusammenhang beim Regressionsproblem angenommen werden.

Ohne die Allgemeingültigkeit zu verlieren, wird bei der Erläuterung der KQ-Methode und der ML-Methode nicht angegeben, ob es um linear oder nichtlinear parametrierte Modelle geht. Während sich beim linear parametrierten Modell das Regressionsproblem in den

Formeln (2.5) und (2.11) analytisch lösen lässt, muss das Regressionsproblem unter der Annahme eines nichtlinear parametrierten Modells mit einem numerischen Optimierungsverfahren, z. B. dem Gauß-Newton-Verfahren, gelöst werden ([Nel13]).

2.1.2 Bayesscher Ansatz

Wenn wir uns die Problemformulierung aus der Formel (2.6) aus der bayesschen Sicht anschauen, bietet sich der bayessche Ansatz als eine grundlegende andere Denkweise als der frequentistische Ansatz an. Dabei wird der Parametersatz Θ nicht als feste und durch Messpunkte zu bestimmende Größe, sondern als eine mit einer Wahrscheinlichkeitsdichte beschriebene Zufallsvariable betrachtet ([BA98]). Im bayesschen Paradigma wird als Erstes eine a-priori-Verteilung $p(\Theta)$ definiert, die unseren Grad der Überzeugung (*Belief*) von den Parametern darstellt ([Hel08]). Die a-priori-Verteilung $p(\Theta)$ kann aus verschiedensten Quellen kommen und ebenfalls zahlreiche Formen annehmen, siehe [Gel+14] für weitere Diskussionen. Gegeben die gesammelten Messdaten $\boldsymbol{D}$, lässt sich die a-posteriori-Verteilung $p(\Theta|\boldsymbol{D})$ der Parameter angesichts der a-priori-Verteilung $p(\Theta)$ mittels des Satzes von Bayes berechnen ([BA98])

$$p(\Theta|\boldsymbol{D}) = \frac{p(\boldsymbol{D}|\Theta)p(\Theta)}{p(\boldsymbol{D})} \tag{2.12}$$

wobei $p(\boldsymbol{D}|\Theta)$ für die Likelihood-Funktion bedingt durch den Parametersatz Θ steht und $p(\boldsymbol{D})$ (*Evidence*) die Wahrscheinlichkeitsverteilung ist, aus der die Messdaten generiert werden ([BA98]). Da die $p(\boldsymbol{D})$ unverändert bleiben soll, und zwar unabhängig von der a-priori-Verteilung und der Likelihood-Funktion, kann die a-posteriori-Verteilung $p(\Theta|\boldsymbol{D})$ mit folgender Formel beschrieben werden ([Bis06]):

$$p(\Theta|\boldsymbol{D}) \propto p(\boldsymbol{D}|\Theta)p(\Theta) \tag{2.13}$$

Die Zielsetzung eines bayesschen Schätzers ist die Minimierung der Risikofunktion, die das erwartete a-posteriori-Risiko R zusammen mit der Verlustfunktion $L(\hat{\Theta}, \Theta^*)$ modelliert. Die Risikofunktion wird durch folgende Formel definiert ([Rüs14]):

$$R(\hat{\Theta}) = \int_{\Theta} L(\hat{\Theta}, \Theta^*)p(\Theta^*|\boldsymbol{D})\mathrm{d}\Theta^* \tag{2.14}$$

In der Tat quantifiziert die Risikofunktion $R(\hat{\Theta})$ das erwartete Risiko des Schätzers $\hat{\Theta}$, wenn die Daten in der Realität gemäß dem Parameter Θ^* erzeugt werden ([Rüs14]). Je nachdem, welche Verlustfunktion $L(\hat{\Theta}, \Theta^*)$ ausgewählt wird, können mit Minimierung der Risikofunktion in Formel (2.14) verschiedene bayessche Schätzer $\hat{\Theta}$ abgeleitet und in folgender Tabelle dargestellt werden ([Koc13]):

Verlustfunktion $L(\hat{\Theta}, \Theta^*)$	Bayesscher Schätzer $\hat{\Theta}$	Bedeutung
$L(\hat{\Theta}, \Theta^*) = (\hat{\Theta} - \Theta^*)^2$	$\hat{\Theta} = E[p(\Theta \vert \boldsymbol{D})]$	a-posteriori-Erwartungswert
$L(\hat{\Theta}, \Theta^*) = \vert\hat{\Theta} - \Theta^*\vert$	$\hat{\Theta} = \text{median}[p(\Theta \vert \boldsymbol{D})]$	a-posteriori-Median
$L(\hat{\Theta}, \Theta^*) = \begin{cases} 1 & \text{für } \hat{\Theta} = \Theta^* \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$	$\hat{\Theta} = \max[p(\Theta \vert \boldsymbol{D})]$	a-posteriori-Modus

Tabelle 2.1: Verschiedene Arten von bayesschen Schätzern abhängig von der Verlustfunktion.

Der dritte Schätzer wird in der Regel als Maximum-a-posteriori-(MAP-)Schätzer bezeichnet. Unter der Annahme, dass die a-priori-Verteilung und die Likelihood-Funktion normalverteilt sind, sind die drei Schätzer in Tabelle 2.1 äquivalent ([Ber13]). Darüber hinaus ist der MAP-Schätzer mit dem Maximum-Likelihood-Schätzer in Formel (2.11) äquivalent, wenn eine nichtinformative a-priori-Verteilung verwendet wird, z. B. Konstante und Gleichverteilung ([Hel08]).

2.1.3 Zusammenfassung

In diesem Abschnitt wurde die grundlegende Schätztheorie behandelt, sowohl in der frequentistischen Sicht als auch im bayesschen Paradigma. Im frequentistischen Teil wurden hauptsächlich die KQ-Methode und die ML-Methode vorgestellt. Die KQ-Methode wird durch das Prinzip der Minimierung des erwarteten Modellfehlers hergeleitet. Die Idee der ML-Methode kommt eher aus dem Bereich der Wahrscheinlichkeitstheorie und kann auf die Minimierung der KL-Divergenz zwischen der geschätzten Wahrscheinlichkeitsverteilung und der wahren Wahrscheinlichkeitsverteilung zurückgeführt werden. Anschließend wurde das Prinzip der bayesschen Schätztheorie erklärt und zuletzt der Zusammenhang zwischen den beiden Denkweisen kurz diskutiert. Der Inhalt dieses Abschnitts kann mit Abbildung 2.2 dargestellt werden.

2.2 Modellselektion

Wie bereits erwähnt wurde, wird die KQ-Methode bei Formel (2.5) unendlich viele Lösungen liefern, wenn keine konkrete Modellstruktur für den Schätzer $\hat{f}(x)$ angenommen wird. Beispielsweise kann der Schätzer eine Polynomstruktur annehmen oder kann er ein KNN sein, und der Gaußprozess kann ebenfalls als ein Kandidat dienen. Die drei Beispiele sind nur ein kleiner Teil aus einer sehr langen Liste. Ein Teil der Aufgabe der Modellselektion ist,

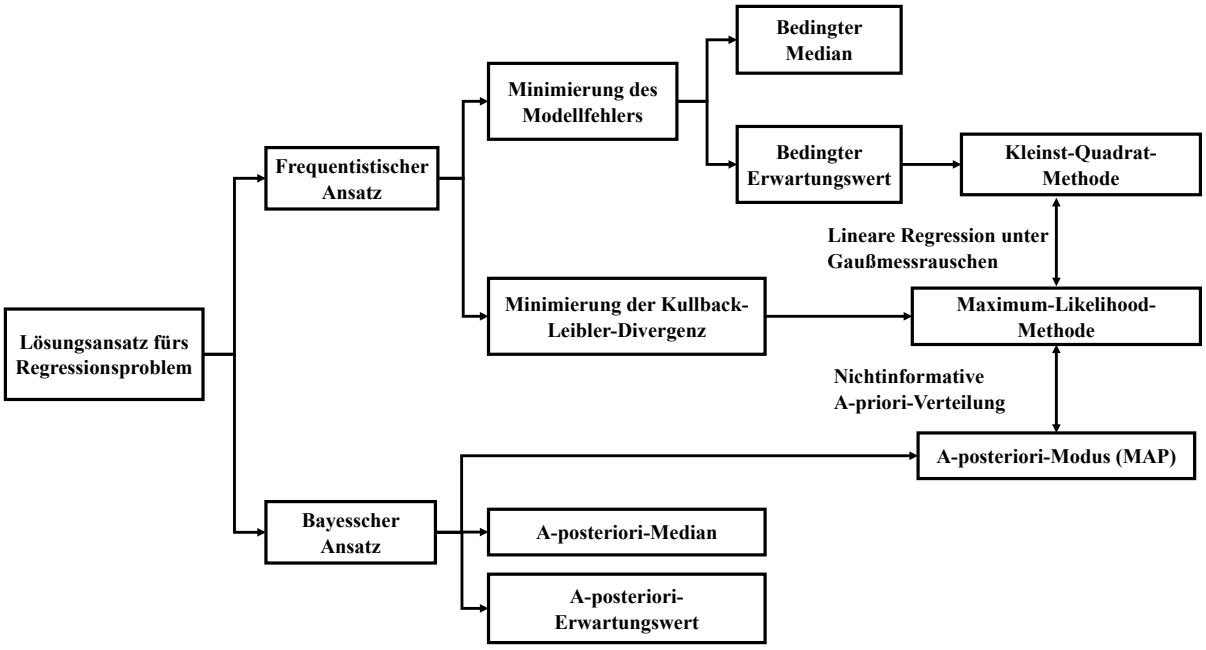


Abbildung 2.2: Graphische Zusammenfassung der Inhalte des Abschnitts 2.1.

unter allen möglichen Modellstrukturen das geeignetste Modell für den Anwendungsfall herauszufinden. Diese Frage wird in Abschnitt 2.3 im Detail behandelt und beantwortet. Eine andere und auch sehr wichtige Aufgabe der Modellselektion ist die gewissenhafte Auswahl der Modellkomplexität unter einer bestimmten Modellklasse, die durch die Anzahl der Parameter charakterisiert wird, damit das Modell die Daten nicht über- oder unterinterpretiert, was als *Overfitting* und *Underfitting* bezeichnet wird ([C+08]).

2.2.1 Overfitting und Underfitting

Mit folgendem klassischem Beispiel, das zur Kategorie der linearen Regression gehört, wird klargemacht, warum man großen Wert auf die Auswahl der Modellkomplexität legt. Hierbei versucht ein Schätzer mit Polynomstruktur den Zusammenhang zwischen Eingang x und Ausgang y anhand des Datensatzes $\boldsymbol{D} = \{x_i, y_i | i \in \{1 \dots N\}\}$ zu modellieren:

$$\hat{f}(x, \Theta) = \sum_{j=0}^{m} \theta_j x^j \tag{2.15}$$

wobei der Parametersatz $\Theta = [\theta_0, \theta_1, \cdots, \theta_m]$ die Menge der zu bestimmenden Parameter ist und die Größe m als Modellkomplexität angesehen werden kann. In diesem Fall ist m die höchste Potenzordnung des Polynoms. Nachdem die Modellkomplexität festgelegt wurde[2], kann der Parametersatz Θ mittels der gewöhnlichen KQ-Methode geschätzt wer-

[2]Die Auswahl der Modellkomplexität kann eine Schwierigkeit darstellen und verdient Aufmerksamkeit. Dies wird in Abschnitt 2.2.2 behandelt. Zur Herleitung wird hierzu angenommen, dass die Modellkomplexität schon bestimmt wurde.

den, woraus sich der geschätzte Parametersatz $\hat{\Theta}$ wie folgt ergibt ([FHT01])

$$\hat{\Theta} = (\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{y} \tag{2.16}$$

Dabei sind $\boldsymbol{y} = [y_1, y_2, \cdots, y_N]^T$ und $\boldsymbol{X}$ die $N \times (m+1)$-Designmatrix

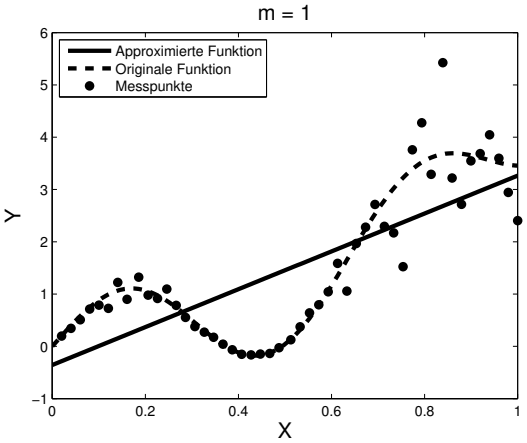
$$\boldsymbol{X} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^m \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \dots & x_2^m \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_N & x_N^2 & \dots & x_N^m \end{pmatrix} \tag{2.17}$$

In Abbildung 2.3 zeigt sich, wie sich der resultierende Schätzer und der Quadratfehler zwischen dem Schätzer und der wahren Kurve mit der Variation der Modellkomplexität m verhalten.

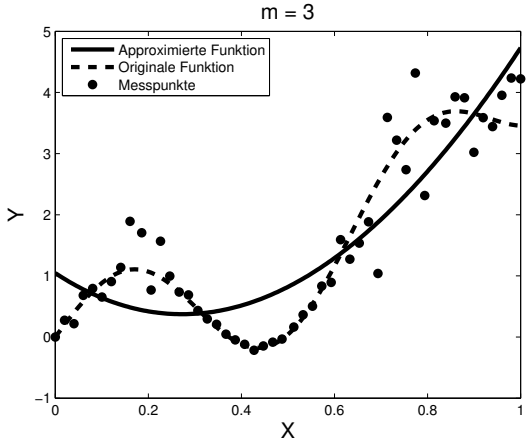
In Abbildung 2.3 lässt sich sehr schnell das Problem von *Overfitting* und *Underfitting* erkennen, dessen theoretische Ursache mittels der Bias-Varianz-Zerlegung erklärt werden kann. Wir gehen von der Problemformulierung in Formel (2.1) aus und haben vor, den Erwartungswert des quadratischen Generalisierungsfehlers MSPE *(Mean Square Prediction Error)* an einer noch nicht gemessenen Stelle x_0 zu minimieren, was zur Herleitung in Formel (2.18) führt ([Jam+13]):

$$\begin{aligned}
\mathrm{MSPE}(x_0) &= E[(y_0 - \hat{f}(x_0))^2] \\
&= E[(f(x_0) + \epsilon - \hat{f}(x_0))^2] \\
&= E[(f(x_0) - \hat{f}(x_0))^2] + E[\epsilon^2] + 2E[\epsilon(f(x_0) - \hat{f}(x_0))] \\
&= E[(f(x_0) - \hat{f}(x_0))^2] + E[\epsilon^2] \\
&= E[(f(x_0) - E[\hat{f}(x_0)] - (\hat{f}(x_0) - E[\hat{f}(x_0)]))^2] + E[\epsilon^2] \\
&= \underbrace{(f(x_0) - E[\hat{f}(x_0)])^2}_{Bias^2} + \underbrace{E[(\hat{f}(x_0) - E[\hat{f}(x_0)])^2]}_{Varianz} + \underbrace{E[\epsilon^2]}_{Messrauschen}
\end{aligned} \tag{2.18}$$

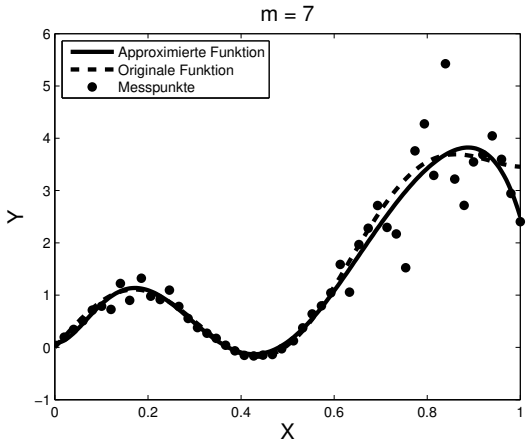
In der letzter Zeile der Formel (2.18) ist zu sehen, dass $\mathrm{MSPE}(x_0)$ aus drei Termen besteht. Der dritte Term ist die Varianz des Messrauschens. Beim Versuch, $\mathrm{MSPE}(x_0)$ zu minimieren, kann er als Konstante behandelt werden. Der erste Term ist das Quadrat des Bias zwischen dem wahren Funktionswert $f(x_0)$ und dem durch alle Datensätze gemittelten geschätzten Funktionswert an der Stelle x_0, $E[\hat{f}(x_0)]$. Unter diesem Term wird ein systematischer Fehler verstanden, der auf eine ungeeignete Annahme über die Modellkomplexität zurückzuführen ist ([For12]). Beim zweiten Term geht es um die Varianz des Schätzers, welche die Sensitivität oder Robustheit des Schätzers gegen die Zufälligkeit der Messdaten beschreibt ([FHT01]). Wenn ein zu komplexes Modell vorausgesetzt wird, d. h. mehr



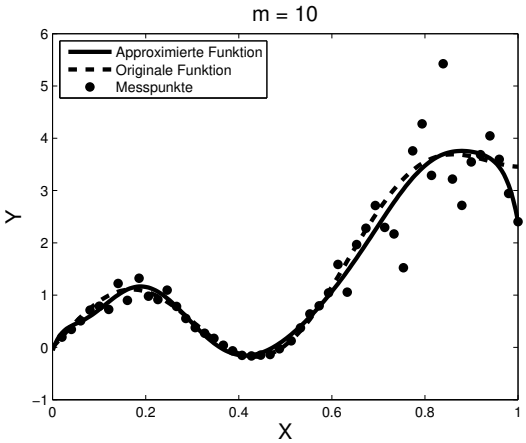
(a) Modellannahme mit dem Komplexitätsparameter $m = 1$.



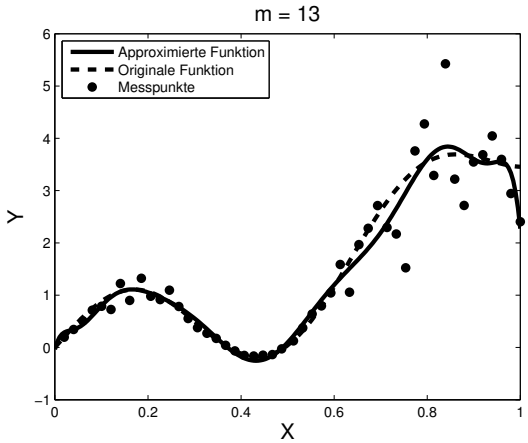
(b) Modellannahme mit dem Komplexitätsparameter $m = 3$.



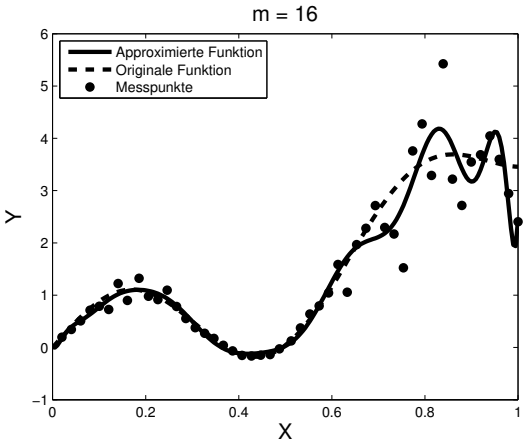
(c) Modellannahme mit dem Komplexitätsparameter $m = 7$.



(d) Modellannahme mit dem Komplexitätsparameter $m = 10$.



(e) Modellannahme mit dem Komplexitätsparameter $m = 13$.



(f) Modellannahme mit dem Komplexitätsparameter $m = 16$.

Abbildung 2.3: *Overfitting* und *Underfitting* beim Regressionsproblem; es wird angezeigt, wie sich die geschätzte Funktion $\hat{f}(x, \Theta)$ verhält, während sich der Komplexitätsparameter m des Modells verändert. Die Punkte stehen für die gesammelten Messpunkte, während die durchgezogene Linie für die geschätzte Funktion $\hat{f}(x, \Theta)$ steht. Die gestrichelte Linie ist die originale Funktion. Die Subgraphen 2.3a und 2.3b sind exzellente Beispiele, die das Problem von *Underfitting* veranschaulichen. Bei den Subgraphen 2.3e und 2.3f liegt das Problem von *Overfitting* vor.

Parameter als notwendig eingeführt werden, besteht die Gefahr, dass das Modell versucht, etwas aus dem Messrauschen herauszuinterpretieren. Dann wird der zweite Term (die Varianz des Schätzers) zu groß, was zu *Overfitting* führt. Wenn im Gegensatz dazu ein zu einfaches Modell ausgewählt wird, reichen die Parameter allein nicht mehr aus, um den gesuchten Zusammenhang $\hat{f}(x, \Theta)$ abzubilden. Dann wird der Bias zu groß, was zu *Underfitting* führt.

Hierbei zeichnet sich offenbar ein besonderes Dilemma ab, das bei der Modellselektion spezielle Aufmerksamkeit verdient. Deswegen muss der *Trade-off* zwischen Bias und Varianz berücksichtigt werden, um die optimale Modellkomplexität zu erhalten ([GBD92]).

2.2.2 Optimierung der Modellkomplexität

Während im letzten Abschnitt 2.2.1 die Notwendigkeit der Optimierung der Modellkomplexität begründet wurde, werden in diesem Abschnitt verschiedene Ansätze als mögliche Lösungen dafür vorgestellt, z. B. Regularisierungstechnik, informationsbasierte Kriterien und *Cross-Validation*.

Regularisierungstechnik

Ausgehend von den in den Abbildungen 2.3e und 2.3f dargestellten Beispielen ist ersichtlich, dass eine zu hoch ausgewählte Modellkomplexität zum Problem des *Overfitting* führt, was zugleich eine zu große Varianz des Schätzers bedeutet. Um dies zu vermeiden, wird die Regularisierungstechnik als Lösungsansatz eingeführt ([Bis06]), wobei das zu lösende Optimierungsproblem in Formel (2.5) um eine Straffunktion $\lambda \sum_{j=0}^{m} ||\theta_j||^q$ erweitert und somit in folgendes umgewandelt wird ([Bis06]):

$$\hat{\Theta} = \min_{\Theta}[\sum_{i=i}^{N}(\sum_{j=0}^{m} \theta_j x^j - y_i)^2 + \lambda \sum_{j=1}^{m} ||\theta_j||^q] \tag{2.19}$$

Dabei kontrolliert der Parameter λ die Modellkomplexität, und zwar kontinuierlich. Je größer λ ist, desto mehr Parameter bei Θ nähern sich 0 an. Deswegen nennt sich diese Methode *Schrinkage Estimator* ([Cop83]). Auf der einen Seite handelt es sich bei der Regularisierung um eine Maßnahme, welche die gegebenenfalls unverhältnismäßig große Flexibilität bei der Bestimmung der Modellstruktur bestraft. Auf der anderen Seite stammt die Regularisierungstechnik aus der Notwendigkeit, den Schätzungsprozess auch bei einer schlecht konditionierten Designmatrix durchzuführen ([Tik63]). Eine mögliche Ursache für die schlechte Kondition ist, dass die Designmatrix kollineare Spalten enthält ([Gol93]). Eine andere Ursache kann die zu hoch ausgewählte Modellkomplexität $m >> N$ sein. Als Ergebnis kann das Hinzufügen der Straffunktion einerseits die schlechte Kondition der Designmatrix beheben, andererseits die Varianz des Schätzers verringern.

Wenn eine L_2-Norm als Straffunktion verwendet wird, d. h. $q = 2$ in Formel (2.19), wird das Verfahren als *Ridge Regression* bezeichnet ([Ng04]). Wenn eine L_1-Norm eingesetzt wird, ist es *lasso (least absolute shrinkage and selection operator)* ([Tib96]). Außerdem muss der Term q nicht unbedingt ein Integer sein, z. B. wird in [LLL13] gezeigt, dass $q = 0.8$ ein besseres Ergebnis für den speziellen Anwendungsfall liefern kann. Während das *Ridge-Regression*-Verfahren analytisch gelöst werden kann ([HK70]) als

$$\hat{\Theta} = \boldsymbol{X}^T(\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^T + \lambda \boldsymbol{I})\boldsymbol{y} \tag{2.20}$$

was der L_2-Norm zu verdanken ist, kann das Problem bei *lasso* nicht analytisch gelöst werden ([WGZ06]). Ein weiterer großer Unterschied zwischen *Ridge Regression* und *lasso* ist, dass alle Elemente des geschätzten Parametersatzes $\hat{\Theta}$ bei *Ridge Regression* immer größer als 0 bleiben, auch wenn λ sehr groß ist. Im Vergleich dazu können beim *lasso* die Elemente von $\hat{\Theta}$ Null sein, und der entsprechende Regressor wird in der Tat nicht mehr betrachtet, was die Interpretierbarkeit des Ergebnisses erheblich erhöht. Deswegen wird *lasso* auch als *Feature Selector* bezeichnet ([Tib96]).

Während die Varianz des Schätzers durch den Einsatz der Regularisierungstechnik vernünftig kontrolliert wird, muss man mit einem vergrößerten Bias rechnen, was die Unverzerrtheit des Schätzers unausweichlich verletzt ([HK70]). Dadurch lässt sich auch das sogenannte Bias-Varianz-Dilemma zeigen. Standardmäßig wird λ bei *Ridge Regression* mittels *Cross-Validation* und λ bei *lasso* mit *least angle regression alogrithm* in [Efr+04] ausgewählt.

Die oben vorgestellte *Schrinkage Method* fällt unter die Kategorie der Regularisierung, wobei ein zusätzlicher Term in den Schätzer hinzugefügt wird, um eine extreme Modellkomplexität zu bestrafen. Es gibt auch eine ähnliche Idee wie *Ridge Regression* beim Training von KNN, das *Weight Decay* ([Bis06]), wobei die Anzahl von Neuronen die Modellkomplexität beeinflusst. Der größte Nachteil der *Schrinkage Method* ist, dass der Komplexitätsparameter λ im Vorfeld von außen bestimmt werden muss, normalerweise mittels *Cross-Validation*.

Der Ansatz der Regularisierung lässt sich ebenfalls in der bayesschen Sicht interpretieren. Basierend auf der Problemformulierung in Formel (2.6), wenn bei der linearen Regression dem Parameteransatz Θ eine gaußsche a-priori-Verteilung zugewiesen wird[3],

$$\Theta \sim \mathcal{N}(0, \lambda^{-1}) \tag{2.21}$$

ergibt sich die Lösung des MAP-Schätzers für den Parametersatz Θ wie folgt ([Mur12])

$$\hat{\Theta} = \boldsymbol{X}^T(\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^T + \lambda \boldsymbol{I})\boldsymbol{y} \tag{2.22}$$

[3]Hierbei wird tatsächlich jedem Element im Parametersatz Θ eine gleiche gaußsche a-priori-Verteilung zugewiesen.

was genau der Lösung der *Ridge Regression* in Formel (2.20) entspricht. Zu bemerken ist darüber hinaus, dass die bayessche Version der Regularisierung äquivalent zum Verfahren bei *lasso* ist, wenn der Parametersatz eine Laplace-Verteilung als a-priori-Verteilung zugewiesen bekommt ([Bis06]). Dadurch ist offenbar die Schlussfolgerung zu ziehen, dass im Rahmen der bayesschen Methode die Regularisierung als eine Art Vorwissen über den zu schätzenden Parametersatz angesehen werden kann.

Akaike Information Criterion (AIC)

Das AIC-Kriterium für die Modellselektion wurde von Hirotugu Akaike eingeführt und in [Aka98] veröffentlicht. Im Prinzip besagt es, dass das Modell mit dem kleinsten AIC-Wert ausgewählt werden soll, der durch folgende Formel definiert wird:

$$\mathrm{AIC} = -2\ln(L(\boldsymbol{D}|\hat{\Theta})) + 2|\hat{\Theta}| \tag{2.23}$$

Dabei ist $L(\boldsymbol{D}|\hat{\Theta})$ die Likelihood des Datensatzes $\boldsymbol{D}$ und $|\hat{\Theta}|$ die Anzahl der zu schätzenden Parameter. Die Idee des AIC-Kriteriums stammt aus der Minimierung der KL-Divergenz zwischen dem wahren Modell $f(x, \Theta)$ und dem Kandidatenmodell $g(x, \hat{\Theta})$ (siehe [And02] für die detaillierte Herleitung). Das AIC-Kriterium ist ein asymptotisch erwartungstreuer Schätzer für die oben genannte KL-Divergenz. Für einen kleinen Datensatz gibt es unter gewissen Bedingungen eine korrigierte Version des AIC-Kriteriums, das $\mathrm{AIC_c}$-Kriterium (siehe [HT89]).

Mallow's C_p

Im Rahmen der linear parametrierten Modelle kann das Kriterium Mallow's C_p mit folgender Definition ([FKL07])

$$C_p = \frac{\mathrm{RSS}(p)}{\sigma^2} - N + 2P \tag{2.24}$$

formuliert werden. Dieses Kriterium versucht, aus K möglichen Regressoren die P Regressoren zu identifizieren, welche die gewonnenen Messdaten am besten erklären können. Dabei werden die P Regressoren mit dem kleinsten C_p-Wert ausgewählt. Der Term $\mathrm{RSS}(p)$ ist die Residuenquadratsumme, die sich mit dem ausgewählten Modell ergibt. N und P sind jeweils die Anzahl der Messpunkte und der Regressoren.

Bayesian Information Criterion (BIC)

Das bekannte BIC-Kriterium, auch Schwarz-Kriterium genannt ([Sch+78]), wählt das Modell aus, das den kleinsten BIC-Wert aufweist, der mit folgender Definition entsteht ([FHT01]):

$$\mathrm{BIC} = -2\ln(L(\boldsymbol{D}|\hat{\Theta})) + |\hat{\Theta}|\ln N \tag{2.25}$$

Dabei ist $L(\boldsymbol{D}|\hat{\Theta})$ die Likelihood des Datensatzes $\boldsymbol{D}$ und $|\hat{\Theta}|$ die Anzahl der zu schätzenden Parameter. Obwohl das BIC-Kriterium eine ähnliche Form wie das AIC-Kriterium besitzt,

kommen die beiden aus verschiedenen theoretischen Überlegungen. Das BIC-Kriterium für Modellselektion lässt sich aus dem Prinzip der Marginal-Likelihood-Maximierung ableiten, wobei das Integral in Formel (2.30) nach Approximation durch die Taylor-Entwicklung bis zur 2. Ordnung berechnet und maximiert wird (siehe [FHT01] für eine detaillierte Herleitung):

$$\underset{\hat{\Theta}}{\text{minimize}} \underbrace{-2\ln(L(\boldsymbol{D}|\hat{\Theta})) + |\hat{\Theta}| \ln N}_{\text{BIC}} \quad \Longrightarrow \quad \underset{\hat{\Theta}}{\text{maximize}} \underbrace{\int p(\boldsymbol{D}|\Theta, M)p(\Theta|M)\mathrm{d}\Theta}_{\textit{Marginal Likelihood}} \tag{2.26}$$

Ähnlich wie beim Fall des AIC-Kriteriums ist das BIC-Kriterium auch nur ein asymptotischer Schätzer der *Marginal Likelihood* des Modells $p(\boldsymbol{D}|M)$, was den Einsatz des BIC-Kriteriums beschränkt.

Bayessche Modellselektion

Unter dem bayesschen Paradigma basiert die Modellselektion auf folgender Überlegung: Anhand des Datensatzes $\boldsymbol{D} = \{x_i, y_i | i \in \{1 \dots N\}\}$ versucht man zwei Kandidatenmodelle M_1 und M_2 zu vergleichen. Es wird angenommen, dass wir keine Präferenz unter den zwei Modellen haben, d. h. für die a-priori-Verteilung der Kandidatenmodelle gilt $p(M_1) = p(M_2)$. Mit dem Satz von Bayes in Formel (2.12) werden die a-posteriori-Verteilungen der beiden Kandidatenmodelle berechnet ([Bis06]):

$$\begin{aligned} p(M_1|\boldsymbol{D}) &= \frac{p(\boldsymbol{D}|M_1)p(M_1)}{p(\boldsymbol{D})} \\ p(M_2|\boldsymbol{D}) &= \frac{p(\boldsymbol{D}|M_2)p(M_2)}{p(\boldsymbol{D})} \end{aligned} \tag{2.27}$$

Wenn man die a-posteriori-Verteilungen für die zwei Kandidatenmodelle vergleicht, ergibt sich ([Bis06])

$$\frac{p(M_1|\boldsymbol{D})}{p(M_2|\boldsymbol{D})} = \frac{p(M_1)}{p(M_2)} \frac{p(\boldsymbol{D}|M_1)}{p(\boldsymbol{D}|M_2)} = \frac{p(\boldsymbol{D}|M_1)}{p(\boldsymbol{D}|M_2)} \tag{2.28}$$

wobei der Term $\frac{p(\boldsymbol{D}|M_1)}{p(\boldsymbol{D}|M_2)}$ als *Bayes Factor* zwischen den Kandidatenmodellen M_1 und M_2 bezeichnet und eingesetzt wird, um einen Plausibilitätsvergleich zwischen M_1 und M_2 vorzunehmen ([BS01]). Wenn ein Parametersatz Θ_1 für das Modell M_1 angenommen wird, kann die a-posteriori-Verteilung von Θ_1 wie folgt berechnet werden:

$$p(\Theta_1|\boldsymbol{D}) = \frac{p(\boldsymbol{D}|\Theta_1, M_1)p(\Theta_1|M_1)}{p(\boldsymbol{D}|M_1)} \tag{2.29}$$

Dabei ist der Term $p(\boldsymbol{D}|M_1)$ die Likelihood-Funktion (*Marginal Likelihood*) in Formel (2.27) und die *Evidence* in Formel (2.29). Er kann mit folgender Formel berechnet werden ([Bis06]):

$$p(\boldsymbol{D}|M_1) = \int p(\boldsymbol{D}|\Theta_1, M_1)p(\Theta_1|M_1)\mathrm{d}\Theta_1 \tag{2.30}$$

Aus der Herleitung der Formeln (2.27) bis (2.30) ist ersichtlich, dass durch die Maximierung der *Marginal Likelihood* des Modells die beste Modellgüte zu erreichen ist. Der Hauptvorteil davon ist, dass die Marginal-Likelihood-Maximierung automatisch die optimale Modellkomplexität auswählen kann ([RW06]), da die *Marginal Likelihood* vom Modell M_1 unabhängig vom Parametersatz Θ_1 ist, was sich schon in Formel (2.30) gezeigt hat.

Wenn man den Hyperparametersatz $\mathcal{H}$, z. B. λ in *Ridge Regression* und α und β im Rahmen des bayesschen linearen Modells in [Bis06] berücksichtigt und ihm eine a-priori-Verteilung zuweist, ergibt sich die *Marginal Likelihood* des Modells M mit voller bayesscher Behandlung zu folgender Formel ([RW06]):

$$p(\boldsymbol{D}|M) = \int\int p(\boldsymbol{D}|\Theta)p(\Theta|M, \mathcal{H})p(\mathcal{H}|M)\mathrm{d}\Theta\mathrm{d}\mathcal{H} \tag{2.31}$$

Hierbei muss die Integration über sowohl den Parametersatz Θ als auch den Hyperparametersatz $\mathcal{H}$ durchgeführt werden, was außer ein paar Ausnahmen, z. B. im Fall von konjugierten a-priori-Verteilungen ([Bis06]), nicht analytisch machbar ist. Um dieses Problem zu lösen, werden in der Regel zwei Ansätze berücksichtigt

Deterministische Approximation

In diesem Ansatz wird zunächst das Θ in Formel (2.31) marginalisiert, was zu einer Funktion $p(\boldsymbol{D}|M, \mathcal{H})$ von $\mathcal{H}$ führt. Anschließend wird $\mathcal{H}$ geschätzt durch die Maximierung der $p(\boldsymbol{D}|M, \mathcal{H})$. Somit wird das Integral in Formel (2.31) approximiert durch

$$p(\boldsymbol{D}|M) \approx \int p(\boldsymbol{D}|\Theta)p(\Theta|M, \hat{\mathcal{H}})\mathrm{d}\Theta \tag{2.32}$$

wobei $\hat{\mathcal{H}}$ für den Hyperparametersatz steht, der die Funktion $p(\boldsymbol{D}|M, \mathcal{H})$ maximiert. Dieses Verfahren zur Modellselektion wird als *Type II Maximum Likelihood* (ML-II) oder *Empirical Bayes* bezeichnet ([Bis06]).

Stochastische Approximation

Eine weitere Möglichkeit stellt das sogenannte Sampling-Verfahren dar, das versucht, direkt Stichproben aus der a-posteriori-Verteilung des gewünschten Parameters zu ziehen und damit die Eigenschaft der a-posteriori-Verteilung zu ermitteln. Zu den am häufigsten gebrauchten Verfahren gehört das Markov-Chain-Monte-Carlo-Verfahren (MCMC), das auf einer Markov-Kette basiert (siehe [Bis06], [And+03] und [Bro+11] für eine umfangreiche

Einführung in diese Thematik). Wegen des hohen Anspruchs des MCMC-Verfahrens an die Rechenleistung wird das Sampling-Verfahren in dieser Arbeit nicht berücksichtigt.

Cross-Validation

Eine weitere Möglichkeit, die optimale Modellkomplexität zu finden, bietet die Methode der *Cross-Validation*, die versucht, den erwarteten Generalisierungsfehler des Modells in Formel (2.18) direkt zu bewerten bzw. zu schätzen, ohne den Einfluss der Modellannahme zu berücksichtigen. Anders als AIC und BIC, deren Einsetzbarkeit und Leistung vornehmlich von der ausgewählten Modellannahme limitiert werden, zeichnet sich die Methode *Cross-Validation* durch ihre generelle Anwendbarkeit und ihre Robustheit aus ([FHT01]). Die Idee und Notwendigkeit der Methode der *Cross-Validation* ist auf die Tatsache zurückzuführen, dass im Regelfall keine ausreichenden Messdaten für eine aussagekräftige Inferenz zur Verfügung stehen, was in unserem Anwendungsfall insbesondere zutrifft. Infolgedessen wird auf separat ausgewählte Messdaten als ein unabhängiger Validierungsdatensatz verzichtet. Stattdessen werden sämtliche Messdaten mehrfach nach verschiedenen Partitionsschemas in Trainingsdatensatz und Validierungsdatensatz aufgeteilt; in jeder Runde der *Cross-Validation* wird das Modell erneut[4] mittels des dazugehörigen Trainingsdatensatzes gefittet. Anschließend wird die Modellgenauigkeit durch den Generalisierungsfehler auf den Validierungsdatensatz bewertet und über mehrere Runde gemittelt. Bei gegebenen Messdaten $\boldsymbol{D} = \{x_i, y_i | i \in \{1 \dots N\}\}$ lässt sich die grundlegende Formel zur Berechnung des Generalisierungsfehlers wie folgt ausdrücken ([FHT01]):

$$\mathrm{CV} = \frac{1}{K} \sum_{i=1}^{K} R(\boldsymbol{y}_i, \hat{f}_i) \tag{2.33}$$

Dabei sind K für die Anzahl der Runden, $\boldsymbol{y}_i$ und $\hat{f}_i$ jeweils die Messdaten im Validierungsdatensatz und die geschätzten Modellwerte durch das neue Modell, das mittels der Messdaten ohne den aktuellen Validierungsdatensatz gefittet wird. Außerdem steht R für die verwendete Fehlermetrik in der Berechnung, die verschiedene Formen annehmen kann, z. B. Quadratfehler, absoluter Fehler und relativer Fehler ([A+10]).

<u>K-Fold-Cross-Validation</u>

Das wichtigste und am häufigsten gebrauchte Partitionsschema ist die *K-Fold-Cross-Validation*. Hierbei wird der gesamte Datensatz auf eine zufällige Art und Weise in K Teile mit gleicher Größe partitioniert. In jeder Runde dient ein Teil als Validierungsdatensatz, und der Rest der Messdaten wird als Trainingsdatensatz verwendet, um das neue Modell zu trainieren, wie $\hat{f}_i$ in Formel (2.33). Mit dem neu gefitteten Modell werden die Beobachtungen an denselben Stellen wie im Validierungsdatensatz prädiziert und mit den entsprechenden Gegenstücken im Validierungsdatensatz verglichen. Nach K Runden wird die eingesetzte

[4] Bei manchen Varianten der *Cross-Validation*, in denen die Anzahl der Runden zu groß ist, wird das Modell nicht für jede Runde neu gefittet, um Rechenaufwand zu sparen.

Fehlermetrik gemittelt. Das Partitionsschema wird in Abbildung 2.4 gezeigt. Der Rechenaufwand des Verfahrens entsteht hauptsächlich durch das Modelltraining in jeder Runde und kann schnell zu groß sein, wenn die Anzahl K der Runden zunimmt. Im Normalfall wird K auf 5 oder 10 gesetzt ([FHT01]).

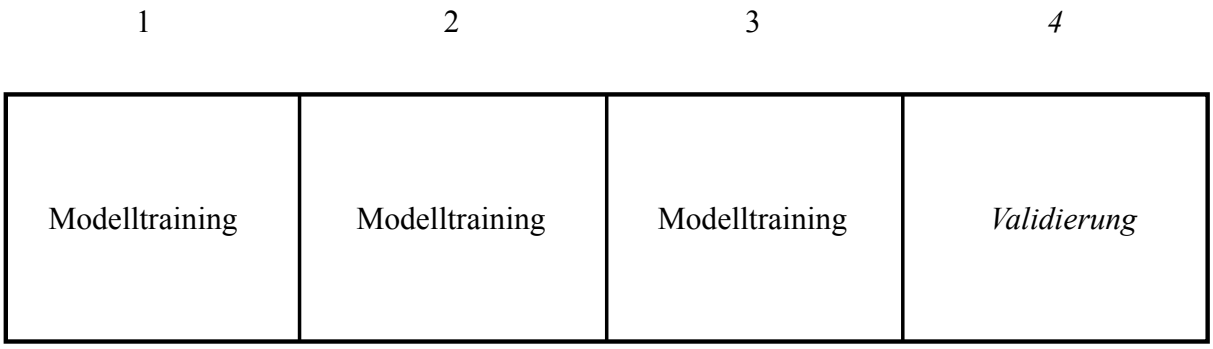


Abbildung 2.4: Schematische Darstellung eines Partitionsplans bei *4-Fold-Cross-Validation*; es werden beispielsweise vier Unterteile mit gleicher Größe aus der gesammelten Messdaten partitioniert; in jeder Runde werden drei der vier Unterteile als Trainingsdatensatz für das Modelltraining eingesetzt.

Leave-One-Out-Cross-Validation

In je mehr Teile die Messdaten partitioniert werden, eine desto bessere Aussage über die Modellgenauigkeit kann das Verfahren der *Cross-Validation* treffen. Wenn die Anzahl der Teile der Anzahl der Messpunkte gleicht, d.h. $K = N$, wird das Verfahren als *Leave-One-Out-Cross-Validation* bezeichnet, da in jeder Runde nur ein Messpunkt als Validierungsdatensatz aus den Messdaten herausgenommen wird. Da im Problem mit großem Datensatz das erneute Modelltraining für jede Runde für einen großen Rechenaufwand sorgt, wird manchmal das Modelltraining nur einmal mit allen Messpunkten durchgeführt und in allen Runden eingesetzt.

2.2.3 Zusammenfassung

In diesem Abschnitt wurde zunächst in das Problem von *Overfitting* eingeführt und anschließend die Ursache des Problems basierend auf der Bias-Varianz-Zerlegung des erwarteten Generalisierungsfehlers analysiert. Daraufhin wurden die Regularisierungstechniken, die für die Vermeidung des *Overfitting* eingesetzt werden, vorgestellt. Als Beispiele ließen sich Verfahren wie *Ridge Regression*, *lasso* und *Weight Decay* anführen. Danach wurden weitere Methoden wie das Mallow's C_p-Kriterium, das AIC-Kriterium und das BIC-Kriterium beschrieben, die sich ebenfalls zielführend für die Auswahl der Modellkomplexität erwiesen. Außerdem wurden die theoretischen Überlegungen hinter den Verfahren für die bayessche Modellselektion erläutert, woraus sich die wichtige Methode ML-II her-

auskristallisierte. Zum Schluss wurde das Verfahren der *Cross-Validation* vorgestellt, das eine sehr breite Anwendung im Themengebiet Modellselektion findet.

2.3 Regressionsmodelle

In diesem Abschnitt werden verschiedene Regressionsmodelle als Kandidaten für unseren Anwendungsfall vorgestellt, klassifiziert und bewertet.

2.3.1 Klassifikation der Regressionsmodelle

Für die Aufgabe der Regression existieren zahlreiche Modellstrukturen und -varianten, die für die verschiedensten Anwendungsfälle und Zielsetzungen entwickelt wurden; in [Mur12] wird eine gut organisierte, aber auf keinen Fall vollständige Übersicht über Regressionsmodelle gegeben. In diesem Abschnitt wird versucht, eine kompakte und für diese Arbeit zweckdienliche Klassifikation der Regressionsmodelle zu erstellen. Als höchste Ebene für die Klassifikation werden die Regressionsmodelle in zwei Kategorien unterteilt: parametrische Modelle und nichtparametrische Modelle[5].

Parametrische Modelle

Ein Regressionsmodell wird als parametrisch bezeichnet, wenn vor der Datensammlung die Struktur des Modells schon durch eine endliche Menge Θ von Parametern festgelegt wird ([Rid07]). Im Anschluss wird versucht, mithilfe dieser festen Modellstruktur die gesammelten Daten zu erklären und zu interpretieren([Fre09]). Das Ergebnis dieses Vorgangs ist der geschätzte Parametersatz $\hat{\Theta}$. Wenn das geschätzte Modell zur Prädiktion an einer unbekannten Stelle x verwendet wird, wird lediglich $\hat{\Theta}$ zum Einsatz gebracht. D.h. die Information, die in den Messdaten enthalten ist, wird durch den Schätzungsvorgang auf $\hat{\Theta}$ übertragen und spielt bei der Prädiktion nur noch mittelbar eine Rolle. Während sich die Modelle dieser Art durch einfache Struktur und Implementierung auszeichnen, verlieren sie ihre Flexibilität bei der Interpretation von Messdaten wegen der festgesetzten Struktur. Auch im Extremfall, wenn unendlich viele Messpunkte vorhanden sind, kann ein parametrisches Modell den gesuchten Zusammenhang nicht hundertprozentig wiedergeben, da der Bias-Term in Formel (2.18) unter einer festen Modellstruktur nicht verschwinden wird[6]. Typische Beispiele sind die Basisfunktion-Regression und das Logit-Modell.

Die parametrischen Modelle kann man noch weiter aufschlüsseln, und zwar in linear parametrierte Modelle und nichtlinear parametrierte Modelle. Der Hauptunterschied ist, dass bei linear parametrierten Modellen der Modellausgang durch eine lineare Abhängigkeit von dem Parametersatz Θ dargestellt werden kann wie in einem ganz gewöhnlichen linearen Regressionsmodell. Bei nichtlinear parametrierten Modellen ist der Zusammenhang

[5] Die Klasse der semiparametrischen Modelle wird in dieser Arbeit nicht berücksichtigt.

[6] Das gilt nur, wenn die gesuchte Modellstruktur der angenommenen Modellstruktur nicht entspricht.

zwischen den Parametern und dem Modellausgang nichtlinear, z. B. ist beim Logit-Modell der Modellausgang eine Exponentialfunktion der Parameter.

Nichtparametrische Modelle

Hierbei wird angenommen, dass die Information in den Messdaten durch eine endliche Menge von Parametern nicht vollständig dargestellt werden kann. In diesem Fall werden die Messdaten auch in der Modellstruktur untergebracht und integriert. Je mehr Messpunkte für das Modelltraining zur Verfügung stehen, desto besser und tiefer kann theoretisch das resultierende Modell den zu approximierenden Zusammenhang verstehen. Außerdem werden bei der Prädiktion durch ein nichtparametrisches Modell sowohl der Hyperparametersatz, der durch Modelltraining gelernt wird, als auch die Messdaten verwendet. Ein typisches nichtparametrisches Regressionsmodell stellt das Gaußprozessmodell dar, das in Abschnitt 2.3.6 vorgestellt wird. Weitere Beispiele für nichtparametrische Modelle sind *Local Polynomial Regression* ([Ave13]) und *K-Nearest Neighbor Regression* ([Alt92]).

2.3.2 Fixed Basis Function Regression

Bei der *Fixed Basis Function Regression* wird angenommen, dass das Modell mit folgender Formel beschrieben werden kann:

$$\hat{f}(x, \Theta) = \sum_{j=0}^{m} \theta_j \phi_j(x) \tag{2.34}$$

Die Basisfunktion $\phi(x)$ des Eingangs kann verschiedene Formen annehmen, z. B. Polynom $\phi_j(x) = x^j$, gaußsche Basisfunktion $\phi_j(x) = \exp(\frac{-(x-x_j)^2}{2\sigma^2})$ etc. Aus der Formel (2.34) ist offensichtlich, dass der Ausgang linear abhängig vom Parametersatz $\Theta = [\theta_0, \theta_1, \cdots, \theta_m]^T$ ist. Deswegen gehört die Basisfunktion-Regression zu den linear parametrierten Modellen ([Chr11]). Wenn die Modellkomplexität festgelegt ist, kann der Parametersatz Θ durch die KQ-Methode oder die ML-Methode geschätzt werden zu

$$\hat{\Theta} = (\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{X}^T \boldsymbol{y} \tag{2.35}$$

was bereits in Abschnitt 2.2.1 dargestellt ist. Die Bestimmung des Komplexitätsparameters, z. B. m bei Polynomen und σ bei der gaußschen Basisfunktion, muss vorher vorgenommen werden, sonst entsteht die Gefahr von *Overfitting*, wie schon in Abschnitt 2.2.1 erklärt wurde. Um das *Overfitting* unter Kontrolle zu halten, kann die Auswahl des Komplexitätsparameters mittels einer Regularisierungstechnik, beispielsweise der *Schrinkage Methode*, des informationsbasierten Kriteriums erfolgen, z. B. BIC, AIC oder *Cross-Validation*, siehe Details in Abschnitt 2.2.2.

2.3.3 Feedforward Neural Network

Das *Feedforward Neural Network* gehört zu den KNN. Die Idee eines KNN ist auf den Versuch zurückzuführen, die Arbeitsweise des Gehirns mathematisch zu beschreiben ([Gur97]). Von der Struktur her besteht ein *Feedforward Neural Network* aus Eingabeschicht, verborgener Schicht und Ausgabeschicht, siehe Abbildung 2.5. Der Name *Feedforward Neural Network* stammt daher, dass die Information in dieser Art von neuronalem Netzwerk immer von der Eingabe bis zur Ausgabe vorwärts durchläuft, wobei kein Zyklus gebildet wird; sonst wird es zum *Reccurent Neural Network*, das üblicherweise bei der Modellierung von dynamischen Prozessen verwendet wird ([Def11]). Da es aus mehreren Schichten besteht, nennt sich das *Feedforward Neural Network* auch MLP-Netzwerk. Zu beachten ist, dass ein MLP-Netzwerk mehrere verborgene Schichten haben kann; allerdings wird schon in [Hor93] gezeigt, dass ein MLP-Netzwerk mit einer verborgenen Schicht als allgemeingültiger Approximator (*Universal Approximator*) angesehen werden kann. In dieser Arbeit werden nur MLP-Netzwerke mit einer verborgenen Schicht berücksichtigt.

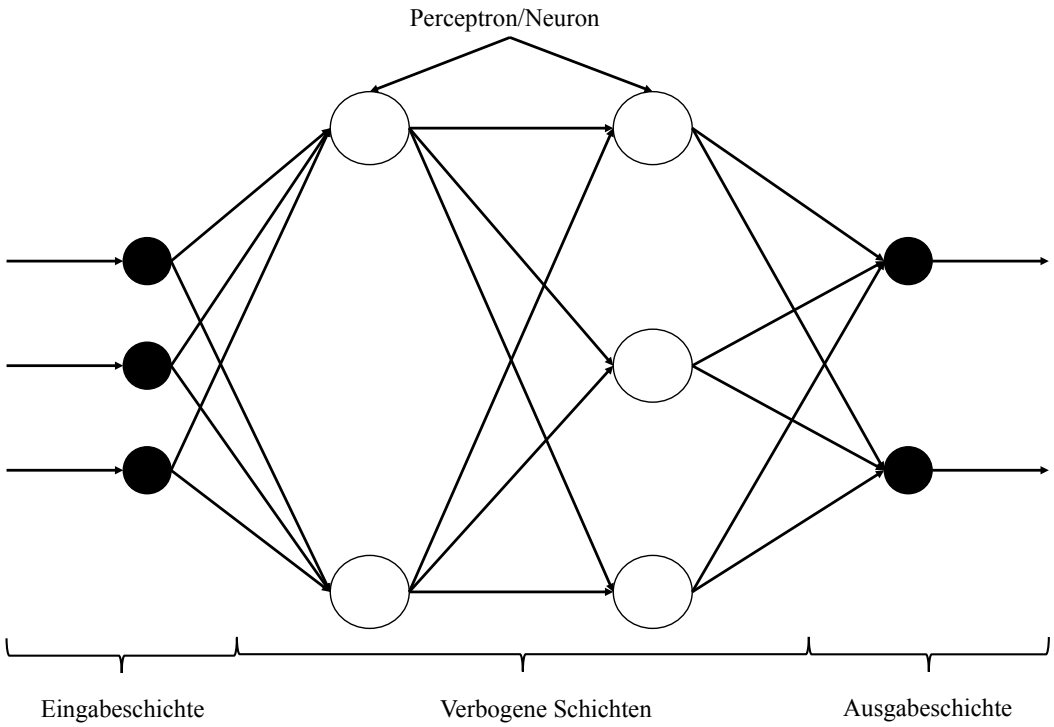


Abbildung 2.5: Schematische Darstellung der Struktur eines KNN; während die schwarzen Punkte auf der linken Seite für die Eingänge stehen, sind die schwarzen Punkte auf der rechten Seite die Ausgänge; die weißen Punkte sind die sogenannten Neuronen des KNN; das in der Abbildung gezeigte Netzwerk besitzt zwei verborgene Schichten.

Im Vergleich zur *Fixed Basis Function Regression* kann unter einem MLP-Netzwerk eine lineare Kombination von Basisfunktionen mit adaptiven Parametern verstanden werden, die mittels Messdaten gelernt werden müssen ([Bis06]). Mathematisch kann ein MLP-Netzwerk mit P Eingängen, M Neuronen (*Perceptrons*) in der verborgenen Schicht und K Ausgängen durch folgendes Gleichungssystem beschrieben werden ([FHT01]):

$$u_m = \sigma(\alpha_{0m} + \alpha_m^T \boldsymbol{x}), m = 1, \cdots, M \tag{2.36}$$

$$t_k = \beta_{0k} + \beta_k^T \boldsymbol{u}, k = 1, \cdots, K \tag{2.37}$$

$$\hat{f}_k(x) = g_k(\boldsymbol{t}), k = 1, \cdots, K \tag{2.38}$$

Dabei sind $\boldsymbol{x} = [x_1, x_2, x_3, \ldots, x_P]$, $\boldsymbol{u} = [u_1, u_2, u_3, \ldots, u_M]$ und $\boldsymbol{t} = [t_1, t_2, t_3, \ldots, t_K]$. Darüber hinaus ist die Funktion $\sigma(\mu)$ die sogenannte Aktivierungsfunktion des Neurons. Normalerweise wird eine s-förmige Funktion ausgewählt, z. B. $\sigma(\mu) = \frac{1}{1+e^{-\mu}}$ ([Hyö01]).

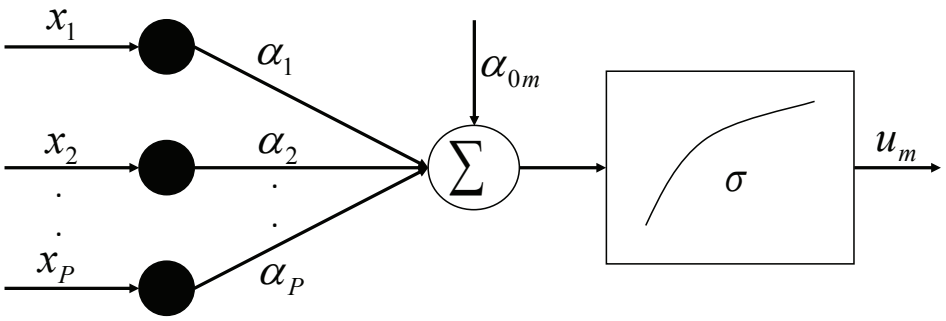


Abbildung 2.6: Schematische Darstellung des Signalflusses eines Neurons auf der Eingangsseite; der Vektor α wird eingesetzt, um die Eingänge zu gewichten, wobei α_{0m} die Bias-Komponente ist. Die Funktion σ ist die nichtlineare Aktivierungsfunktion.

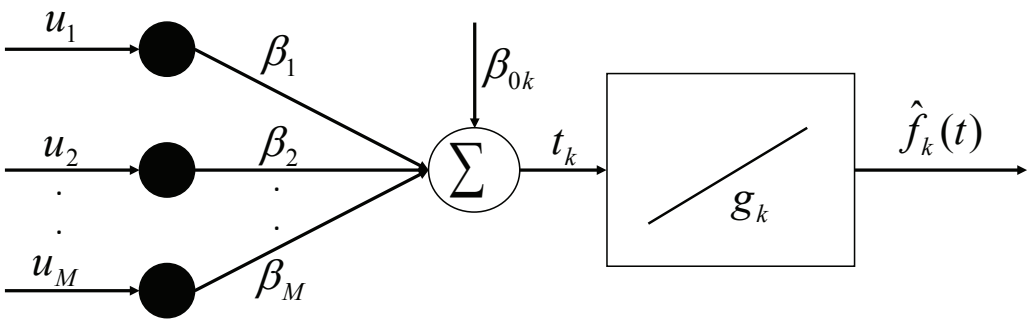


Abbildung 2.7: Schematische Darstellung des Signalflusses eines Neurons auf der Ausgangsseite; der Vektor β ist wiederum ein Vektor für die Gewichtung, außerdem wird die Bias-Komponente durch β_{0k} beschrieben. Am Ausgang wird normalerweise eine lineare Aktivierungsfunktion g verwendet.

Modelltraining

Zum Training eines MLP-Netzwerks wird der komplette Parametersatz Θ, der aus folgenden Gewichten und Bias besteht:

$$\{\alpha_{0m}, \alpha_m; m = 1, 2, \cdots, M\} \tag{2.39}$$

$$\{\beta_{0k}, \beta_k; k = 1, 2, \cdots, K\} \tag{2.40}$$

anhand eines Datensatzes durch Minimierung folgender Fehlerfunktion geschätzt, was keine leichte Aufgabe ist ([FHT01]):

$$R(\Theta) = \sum_{k=1}^{K} \sum_{i=1}^{N} (\hat{f}_k(x_i) - y_{ik})^2 \tag{2.41}$$

Erstens ist die zu minimierende Fehlerfunktion in Formel (2.41) nicht konvex, was das Training ziemlich anfällig zu schlecht gewählten Anfangswerten der Parameter macht ([Bis06]). Standardmäßig wird die Fehlerfunktion in Formel (2.41) mit dem Levenberg-Marquardt Algorithmus minimiert, der robust auch bei schlecht gewählten Anfangswerten der Gewichte konvergieren kann ([DS96]). Dabei wird die Ableitung $\frac{\partial R(\Theta)}{\partial \Theta}$ der Fehlerfunktion nach dem Parametersatz mittels der bekannten Methode *Error-Back-Propagation* aus [RHW88] berechnet. Zweitens muss angesichts der hohen Anzahl der zu schätzenden Parameter in den Formeln (2.36) und (2.37) die Fehlerfunktion regularisiert werden. Mögliche Optionen sind *Weight Decay* ([Moo+95]), die ähnlich wie die *Ridge Regression* in Abschnitt 2.2.2 ist, und *Early Stopping* ([Gil01]), die speziell für das Training von MLP-Netzwerken entwickelt wurde.

Bayesian Neural Network

Während die frequentistische Technik für Regularisierung, z. B. *Weight Decay*, noch *Cross-Validation* braucht, um die Modellkomplexität zu bestimmen, bietet die in Abschnitt 2.2.2 erwähnte bayessche Modellselektion (ML-II) eine komplett automatische Lösung zur Optimierung der Modellkomplexität. Dabei wird ein normalverteiltes Messrauschen mit $p(y|x) = \mathcal{N}(y|\hat{f}(x, \Theta), \beta^{-1})$ angenommen und dem Parametersatz Θ eine gaußsche a-priori-Verteilung $p(\Theta|\alpha) = \mathcal{N}(\Theta|0, \alpha^{-1})$ zugewiesen. Anschließend kann die a-posteriori-Verteilung des Parametersatzes Θ mittels des Satzes von Bayes berechnet werden ([Bis06]):

$$p(\Theta|\boldsymbol{D}, \alpha, \beta) \propto p(\boldsymbol{D}|\Theta, \beta) p(\Theta|\alpha) \tag{2.42}$$

Wegen der Nichtlinearität in der Likelihood-Funktion $p(\boldsymbol{D}|\Theta, \beta)$ ist die a-posteriori-Verteilung $p(\Theta|\boldsymbol{D}, \alpha, \beta)$ keine Normalverteilung mehr und beinhaltet in der Regel mehrere Modi. Um den Parametersatz Θ und die zwei Hyperparameter α und β zu schätzen, wird ein iterativer Prozess aus zwei Schritten angesetzt ([Bis06]):

1. Wenn angenommen wird, dass die Hyperparameter α und β Konstanten sind, kann mittels der Laplace-Approximation die a-posteriori-Verteilung $p(\Theta|\boldsymbol{D}, \alpha, \beta)$ durch eine Normalverteilung approximiert werden, und der Modus Θ_{MAP} der approximierten a-posteriori-Verteilung kann damit problemlos berechnet werden.

2. In Rahmen der bayessche Modellselektion (ML-II) wird die Marginal-Likelihood-Funktion mit folgender Formel definiert:

$$p(\boldsymbol{D}|\alpha, \beta) = \int p(\boldsymbol{D}|\Theta, \beta) p(\Theta|\alpha) \mathrm{d}\Theta \tag{2.43}$$

   Um die Hyperparameter α und β zu optimieren, wird die *Marginal-Likelihood* $p(\boldsymbol{D}|\alpha, \beta)$ zunächst bei Θ_{MAP} mit Laplace-Approximation approximiert und dann maximiert.

Wenn der Prozess konvergiert, bekommt man den Parametersatz Θ und die Hyperparameter α und β geschätzt. Damit kann eine Prädiktion an unbekannten Stellen durchgeführt werden.

2.3.4 Radial Basis Function Network

Wenn eine radiale Basisfunktion als Aktivierungsfunktion ausgewählt wird, wird das MLP-Netzwerk zu einem RBF-Netzwerk, dessen übliche Struktur durch Abbildung 2.8 aufgezeigt wird. Eine radiale Basisfunktion $\phi(\mathbf{x})$ von einem Eingang x ist abhängig vom radialen Abstand zwischen dem Eingang und einem Zentrumspunkt $\mathbf{c}$ und lässt sich durch folgende Formel definieren ([Buh00]):

$$\phi(\mathbf{x}) = h(||\mathbf{x} - \mathbf{c}||) \tag{2.44}$$

Der Abstand $||\mathbf{x} - \mathbf{c}||$ kann entweder zur Mahalonobis-Norm verallgemeinert werden oder schlechthin der euklidische Abstand sein. Während Ersteres eine größere Flexibilität an der Modellstruktur erlaubt, braucht Letzteres einen geringeren Rechenaufwand für das Modelltraining ([Har14]). Eine gebräuchliche Wahl der Basisfunktion stellt die Gaußfunktion mit folgender Definition dar:

$$\phi(\mathbf{x}) = \exp\left(-0.5\left(\frac{||\mathbf{x} - \mathbf{c}||^2}{\sigma^2}\right)\right) \tag{2.45}$$

Der Modellausgang lässt sich schnell als die Summe der gewichteten Ausgänge jeder radialen Basisfunktion berechnen zu

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{M} w_i \phi_i(\mathbf{x}) \tag{2.46}$$

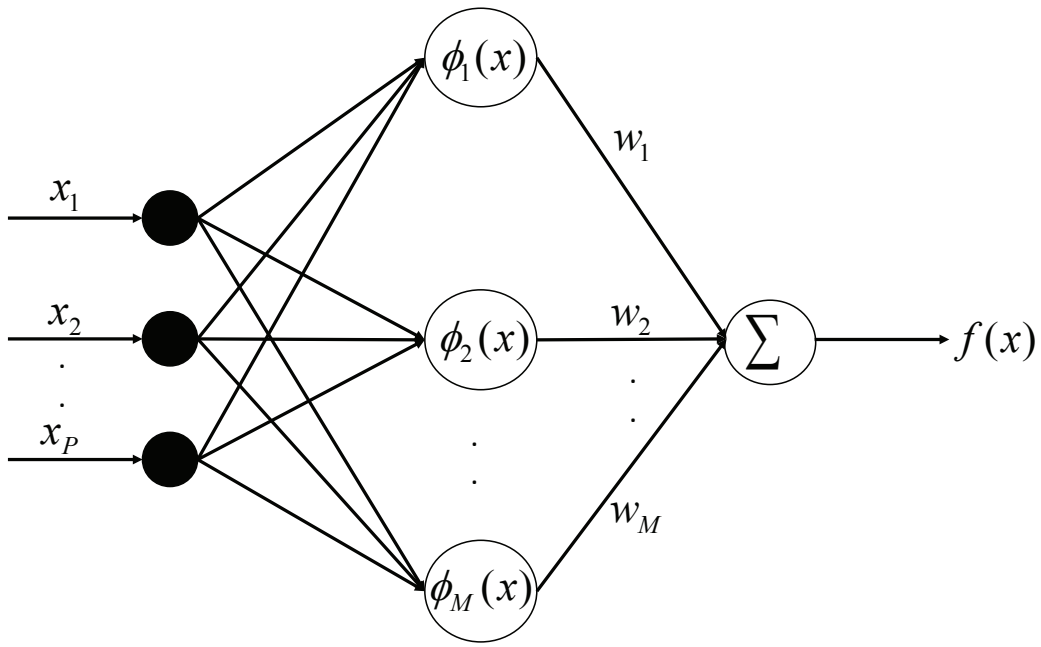


Abbildung 2.8: Schematische Darstellung der Struktur eines RBF-Netzwerks, das einen P-dimensionalen Eingangsraum und M Zentrumspunkte besitzt; der Ausgang des RBF-Netzwerks ist die gewichtete Summe der Ausgänge der radialen Basisfunktion $\phi_i(\mathbf{x})$.

wobei M die Anzahl der Zentrumspunkte ist und der Parametersatz $\mathbf{w} = [w_1, w_2, \ldots, w_M]$ für die Menge der Gewichtungsfaktoren steht.

Modelltraining

Der Modellstruktur in Abbildung 2.8 ist zu entnehmen, dass $\mathbf{w}$ und der Parametersatz in der Gaußfunktion jeweils eine lineare und eine nichtlineare Auswirkung auf den Modellausgang besitzen. Für das Training des RBF-Netzwerks gibt es normalerweise zwei Phasen. In der ersten Phase werden die Lage und die Standardabweichung der Gaußfunktion entweder durch eine zufällige Verteilung oder mittels *k-means clustering* bestimmt ([SKP01]). Eine weitere Möglichkeit für die Identifikation der nichtlinearen Parameter bietet der *Orthogonal-Least-Squares*-Algorithmus an, siehe [CCG91] für Details. In der zweiten Phase wird die KQ-Methode eingesetzt, um die Gewichtungsfaktoren in $\mathbf{w}$ zu schätzen.

2.3.5 Lokale Modellnetze

Während der Ansatz der Polynom-Regression an dem Nachteil leidet, dass der Regressor einen globalen Einfluss im gesamten Eingangsraum besitzt, was zu Oszillation und weiteren unerwünschten Phänomenen führen kann ([Bis06]), zeichnet er sich durch eine einfache Struktur und geringen Trainingsaufwand aus. Um den negativen Effekt der Polynom-Regression (Globalität des Regressors) zu neutralisieren, greift man auf die Idee zurück, den Eingangsraum in mehrere Subräume zu unterteilen und in jedem Unterraum ein lokales Polynommodell zu identifizieren. Die übliche Struktur zeigt Abbildung 2.9.

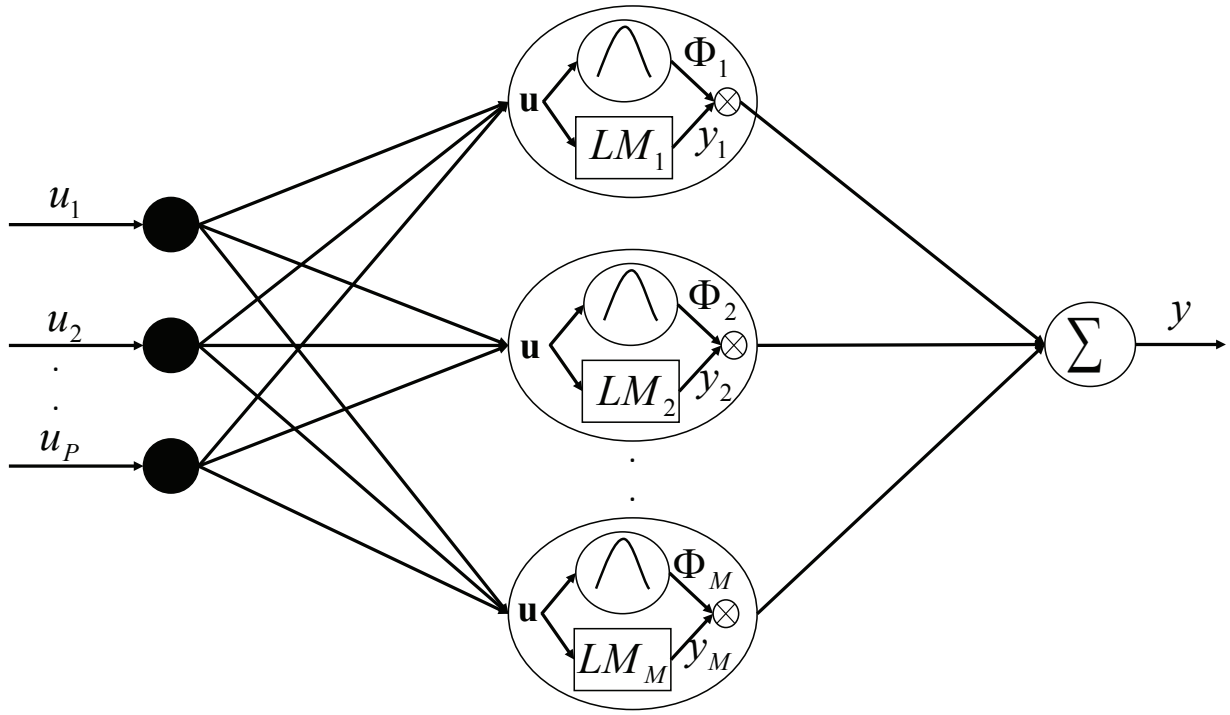


Abbildung 2.9: Schematische Darstellung der Struktur eines lokalen Modellnetzes; die schwarzen Punkte auf der linken Seite stehen für den Eingangsvektor $\mathbf{u} = [u_1, u_2, \ldots, u_P]$; in der Mitte des Bildes sind drei lokale Modelle (LM) schematisch dargestellt, wobei der Term Φ_i für den Beitrag und die Gültigkeit des entsprechenden lokalen Modells LM_i für den gesamten Ausgang y steht.

Wenn ein lineares Polynommodell im Subraum verwendet wird, kann der Modellausgang y von einem P-dimensionalen Eingangsvektor $\mathbf{u} = [u_1, u_2, \ldots, u_P]$ als ([Nel97])

$$y = \sum_{i=1}^{M} y_i(\mathbf{u})\Phi_i(\mathbf{u}) \tag{2.47}$$

mit dem i-ten linearen lokalen Polynommodell $y_i(\mathbf{u})$ gemäß

$$y_i(\mathbf{u}) = w_{i,0} + w_{i,1}u_1 + w_{i,2}u_2 + \cdots + w_{i,P}u_P \tag{2.48}$$

Der Term $\Phi_i(\mathbf{u})$ in Formel (2.47) ist die Gültigkeitsfunktion, welche die aktive Region des entsprechenden lokalen Modells im Eingangsraum bestimmt ([Ise14]), und kann wie folgt definiert werden ([MJ97]):

$$\Phi_i(\mathbf{u}) = \frac{\mu_i(\mathbf{u})}{\sum_{j=1}^{M} \mu_j(\mathbf{u})} \tag{2.49}$$

Die Gültigkeitsfunktion besitzt die Eigenschaft, dass sich die Funktionswerte für einen Eingangsvektor auf eins summieren, d.h. es gilt (([MJ97]))

$$\sum_{i=1}^{M} \Phi_i(\mathbf{u}) = 1 \tag{2.50}$$

Der Term $\mu_i(\mathbf{u})$ in Formel (2.49) ist die Zugehörigkeitsfunktion und wird durch die Normierung in die Gültigkeitsfunktion umgewandelt ([Har14]). Im Regelfall kann die Sigmoid-Funktion oder normierte Gaußfunktion als Zugehörigkeitsfunktion wie folgt zum Einsatz kommen:

$$\mu_i(\mathbf{u}) = \prod_{j=1}^{p} \exp\left[-0.5\left(\frac{(u_j - c_{i,j})^2}{\sigma_{i,j}^2}\right)\right] \tag{2.51}$$

Dabei sind $c_{i,j}$ und $\sigma_{i,j}$ jeweils der Zentrumspunkt und die Standardabweichung der Gaußfunktion.

Modelltraining

Zum Trainieren des lokalen Modellnetzes sind das Partitionsschema, der Parametersatz $\mathbf{w}$[7] im lokalen Modell in Formel (2.48), die Lage $c_{i,j}$ und die Standardabweichung $\sigma_{i,j}$ der Zugehörigkeitsfunktion in Formel (2.51) zu bestimmen. Während der Modellausgang linear abhängig von $\mathbf{w}$ ist, wirken sich die Lage und die Standardabweichung der Zugehörigkeitsfunktion nichtlinear auf den Modellausgang aus. Deshalb reicht auf der einen Seite die gewöhnliche KQ-Methode für die Schätzung von $\mathbf{w}$ aus. Auf der anderen Seite muss ein nichtlineares Optimierungsverfahren eingesetzt werden, um die Parameter der Zugehörigkeitsfunktion zu identifizieren ([Ise14]).

LOLIMOT

In [Nel97] wird das Verfahren LOLIMOT entwickelt, das die nichtlinearen Parameter durch eine Kombination von heuristischen Partitionsverfahren mit linearem Optimierungsverfahren bestimmt ([AF07]). LOLIMOT fängt mit einem linearen Polynommodell auf dem gesamten Eingangsraum an. In jeder Iteration wird ein Subraum achsenorthogonal in zwei Subräume partitioniert, und der Subraum, der zu einem geringeren Maß an Verbesserung der Modellgüte führt, wird in der nächsten Iteration geschnitten. Das Verfahren lässt sich mit Abbildung 2.10 darstellen, für mehr Details siehe [Ise14].

HHT und LOPOMOT

Eine andere Variante des lokalen Modellnetzes stellt der *Hinging Hyperplane Tree* (HHT) dar. Dabei wird ein achsenschräges Partitionsschema zugelassen ([Ern98]). Wenn nicht nur lineare lokale Modelle verwendet werden, wird darüber hinaus LOLIMOT zum *Local Polynomial Model Tree* (LOPOMOT) erweitert ([SSI09]). Der LOPOMOT-Algorithmus hat die Baumstruktur von LOLIMOT für die Teilung des Eingangsraums in Abbildung 2.10 geerbt. Dennoch wird der Grad des lokalen Polynommodells im Subraum von Mallow's C_p-Kriterium bestimmt, was die Flexibilität der Modellstruktur erhöhen kann.

[7] Unter $\mathbf{w}$ ist eine $M \times (P+1)$-Matrix zu verstehen.

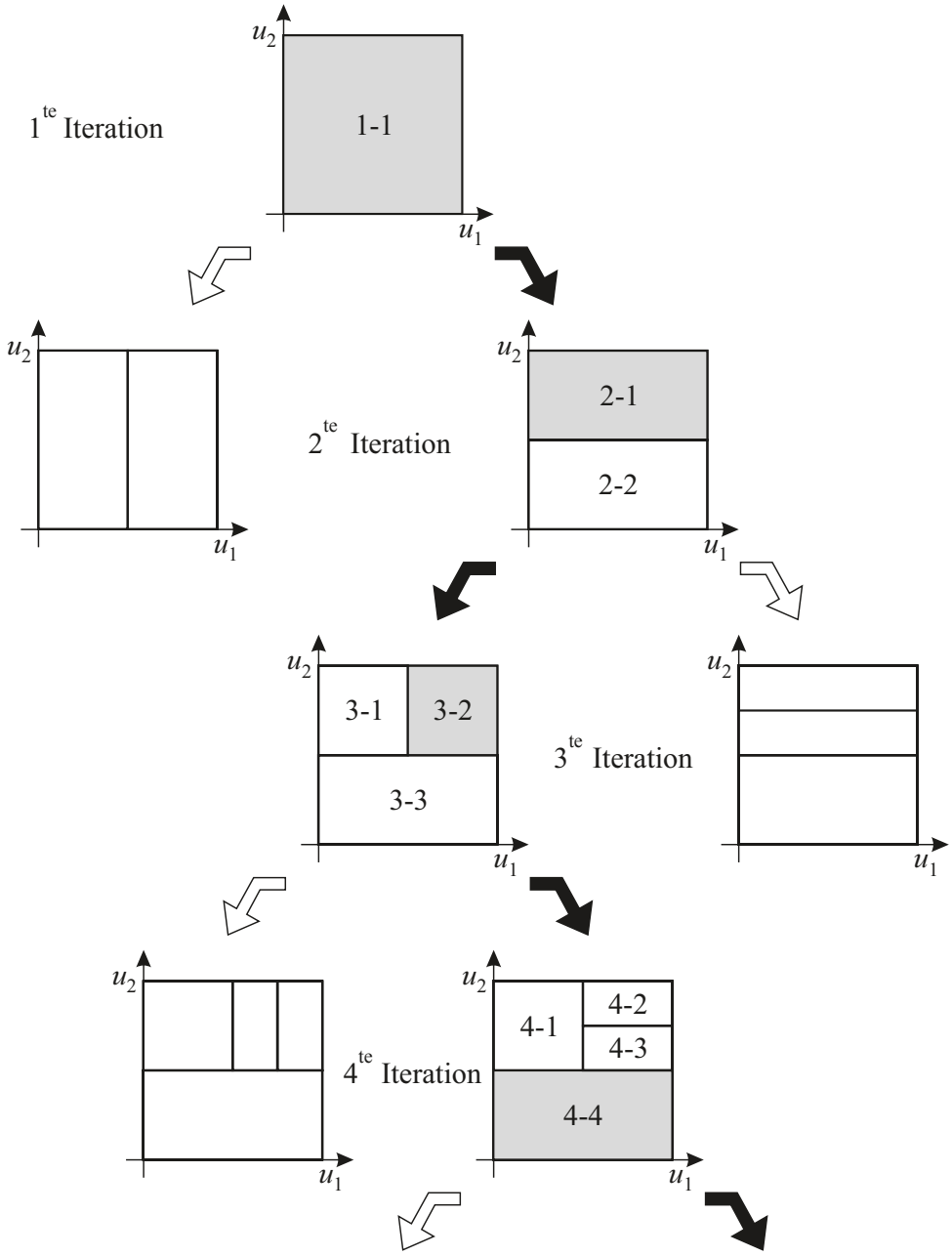


Abbildung 2.10: Schematische Darstellung des Partitionsverfahrens bei LOLIMOT; es werden insgesamt vier Iterationen des Verfahrens angezeigt. In jeder Iteration wird der ausgewählte Subraum in zwei kleinere Subräume partitioniert. Zu bemerken ist, dass im LOLIMOT-Verfahren ausschließlich eine achsenorthogonale Partitionierung des Eingangsraums zugelassen wird.

2.3.6 Gaussian Process Regression (GPR)

In den letzten Jahren hat sich ein großes Interesse an der GPR entwickelt, vor allem im Umfeld von *Machine Learning* ([Cal+14]), ([DBC11]), ([Ban+08]) und ([NSP09]). In der GPR wird ein bayesscher Ansatz entwickelt, der den Zusammenhang zwischen x und y anhand eines Datensatzes $\boldsymbol{D} = \{x_i, y_i | i \in \{1 \dots N\}\}$ ermittelt. Anders als bei den bisher vorgestellten Re-

gressionsmodellen wird bei der GPR die a-priori-Verteilung statt auf explizite Parameter Θ auf die Schätzfunktion $\hat{f}(\mathbf{x})$ selbst gesetzt ([RW06]). Wie schon der Namen verrät, wird auf die geschätzten Funktionswerte $\hat{f}(\mathbf{x}) = [\hat{f}(x_1), \hat{f}(x_2), \cdots, \hat{f}(x_M)]$ ein *Gaussian Process* (GP) als a-priori-Verteilung gesetzt. Ein GP ist nach Definition in [RW06] ein stochastischer Prozess, bei dem jede endliche Teilmenge der Zufallsvariablen mehrdimensional normalverteilt ist. Mit einem GP als a-priori-Verteilung lässt sich die Schätzfunktion wie folgt beschreiben ([RW06]):

$$\hat{f}(x) \sim \mathcal{GP}(m(x), k(x, x')) \tag{2.52}$$

Dabei ist der Term $m(x)$ die Mittelwertfunktion und $k(x, x')$ die Kovarianzfunktion. Normalerweise wird eine Null-Mittelwertfunktion $m(x) = 0$ ausgewählt, da die Kovarianzfunktion im GP allein schon flexibel genug ist, um eine beliebig komplexe Mittelwertfunktion zu modellieren ([Ber12]). Beim *Kriging*, einem ähnlichen Verfahren wie GPR im Umfeld der Geographie, wird auch eine lineare Funktion als Mittelwertfunktion eingesetzt, siehe ([JHS08]), ([ANS10]) und ([JCS01]) für weitere Diskussionen. Jetzt bleibt die Spezifikation der Kovarianzfunktion $k(x, x')$ übrig, um den GP vollständig zu bestimmen. In der Literatur wird eine Reihe von unterschiedlichen Kovarianzfunktionen vorgeschlagen, siehe [RW06] und [HSK99]. In der vorliegenden Arbeit wird die klassische SE-Kovarianzfunktion (*Squared Exponential*)

$$k(x, x') = \sigma_f \exp(\frac{||x - x'||^2}{-2l^2}) \tag{2.53}$$

verwendet, da auf der einen Seite die Hyperparameter l und σ_f in der SE-Kovarianzfunktion die Eigenschaft des Modells widerspiegeln und anschaulich sind. Der Term l wird als *Charakteristic Length-Scale* bezeichnet und beschreibt die horizontale Stärke der Korrelation zwischen zwei Stellen im Eingangsraum, und σ_f beeinflusst das vertikale Verhalten des Modells. Auf der anderen Seite ist die SE-Kovarianzfunktion unendlich oft differenzierbar, womit das Modell theoretisch Details beliebig hohen Grades aus dem Datensatz erfassen kann ([Bis06]), was eine wertvolle Eigenschaft ist.

Prädiktion und Training

Wenn ein normalverteiltes Messrauschen mit $p(y|\mathbf{x}) = \mathcal{N}\ (y|\hat{f}(\mathbf{x}), \sigma_n)$ angenommen wird, ergibt sich die Kovarianzfunktion der Messpunkte y zu ([RW06])

$$\text{cov}(y) = K(\mathbf{x}, \mathbf{x}) + \sigma_n^2 I \tag{2.54}$$

wobei $K(\mathbf{x}, \mathbf{x})$ die Kovarianzmatrix ist und aus den Kovarianzen zwischen allen möglichen Elementen aus dem Eingangsvektor $\mathbf{x} = [x_1, x_2, \cdots, x_N]$ besteht:

$$K(\mathbf{x},\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} k(x_1,x_1) & k(x_1,x_2) & k(x_1,x_3) & \dots & k(x_1,x_N) \\ k(x_2,x_1) & k(x_2,x_2) & k(x_2,x_3) & \dots & k(x_2,x_N) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ k(x_N,x_1) & k(x_N,x_2) & k(x_N,x_3) & \dots & k(x_N,x_N) \end{pmatrix} \tag{2.55}$$

Dann ergibt sich die prädizierte gaußsche Verteilung an der Stelle x^* zu ([RW06])

$$\hat{f}(x^*) \sim \mathcal{N}(\mathrm{m}(x^*), \mathrm{cov}(x^*)), \qquad \text{wobei} \tag{2.56}$$

$$\mathrm{m}(x^*) = K(x^*,\mathbf{x})[K(\mathbf{x},\mathbf{x}) + \sigma_n^2\mathbf{I}]^{-1}\mathbf{y} \tag{2.57}$$

$$\mathrm{cov}(x^*) = K(x^*,x^*) - K(x^*,\mathbf{x})[K(\mathbf{x},\mathbf{x}) + \sigma_n^2\mathbf{I}]^{-1}K(\mathbf{x},x^*) \tag{2.58}$$

Die Prädiktion kann nur funktionieren, wenn die Hyperparameter l, σ_f und σ_n in der SE-Kovarianzfunktion aus Messrauschen bekannt sind. Um den Hyperparametersatz $\mathcal{H} = [l, \sigma_f, \sigma_n]$ zu lernen, wird die *Log Marginal Likelihood* $\log p(\mathbf{y}|\mathcal{H})$ des Hyperparametersatzes mit der Formel ([Pla08])

$$\log p(\mathbf{y}|\mathcal{H}) = -\frac{1}{2}\mathbf{y}K_\mathbf{y}^{-1}\mathbf{y} - \frac{1}{2}\log|K_\mathbf{y}| - \frac{N}{2}\log(2\pi) \tag{2.59}$$

maximiert, wobei gilt:

$$K_\mathbf{y} = K(\mathbf{x},\mathbf{x}) + \sigma_n^2\mathbf{I} \tag{2.60}$$

In der Tat ist die Maximierung der *Log Marginal Likelihood* des Hyperparametersatzes $\mathcal{H}$ äquivalent zum bayesschen Verfahren der ML-II für die Modellselektion, wenn die geschätzten Funktionswerte an Trainingsdaten $\hat{f}(\mathbf{x}) = [\hat{f}(x_1), \hat{f}(x_2), \cdots, \hat{f}(x_N)]$ als Parameter angesehen werden ([Bis06]). Eine andere Möglichkeit für das Modelltraining von GPR ist der Einsatz von *Cross-Validation*, der mehr Rechenzeit braucht, siehe [Bac13] für weitere Analysen.

Diskussion

Der größte Nachteil der GPR ist der Rechenaufwand von $\mathcal{O}(N^3)$[8] für die Invertierung der Matrix $K_\mathbf{y}$ aus der Formel (2.59) beim Modelltraining, was den Einsatz von GPR bei sehr großen Datensätzen fast unmöglich gemacht hat ([SG12]), ([MR09]) und ([SG05]). Um dieses Problem zu mildern, wurde das Verfahren *Sparse Gaussian Process Regression* (SGPR) entwickelt, das den Rechenaufwand auf $\mathcal{O}(M^2N)$ reduzieren kann, wobei $M << N$ und M für die Anzahl der Pseudo-Eingänge steht ([SG12]). Darüber hinaus kann die SE-

[8] Mit Cholesky-Zerlegung kann dieser Rechenaufwand auf $\mathcal{O}(\frac{N^3}{6})$ reduziert werden ([RW06]).

Kovarianzfunktion auch ein Problem darstellen, weil sie eine stationäre Kovarianzfunktion ist, d. h. die Kovarianzfunktion ist nur abhängig vom relativen Abstand $||x - x'||^2$; die absolute Position von x und x' im Eingangsraum spielt keine Rolle, was eine Beschränkung für manche Anwendungen sein kann.

2.3.7 Support und Relevance Vector Machine für Regression

Support Vector Machine (SVM) für Regression

Ein bekannter Nachteil von GPR ist das langsame Modelltraining bei hoher Anzahl von Messpunkten ($N > 2000$) ([SG05]). Um dieses Problem zu lösen, wurde in [CV95b] das Modell *Support Vector Machine* (SVM) vorgestellt, das auf dem sogenannten *Sparse Kernel* basiert. Die SVM wurde ursprünglich für das Problem der Klassifikation entwickelt, kann aber auch für die Aufgabe der Regression angewendet werden. Die SVM für Regression wird als *Support Vector Regression* (SVR) bezeichnet ([SV97]).

Bei SVM wird dieselbe Modellstruktur wie in Formel (2.34) verwendet, und zwar wird der Ausgang durch eine lineare Kombination von Basisfunktionen $\phi(x)$ mit dem Parametersatz Θ beschrieben. Hingegen wird beim Modelltraining statt einer quadratischen Verlustfunktion $L(\hat{f}(x,\Theta) - y) = (\hat{f}(x,\Theta) - y)^2$ eine sogenannte *ϵ-insensitive* Verlustfunktion wie im Folgenden eingesetzt ([SS04]):

$$L_\epsilon(\hat{f}(x,\Theta) - y) = \begin{cases} 0 & \text{für} |\hat{f}(x,\Theta) - y| < \epsilon \\ |\hat{f}(x,\Theta) - y| - \epsilon & \text{sonst} \end{cases} \tag{2.61}$$

Diese Verlustfunktion bedeutet, dass Messpunkte, deren Abstände von ihren geschätzten Modellwerten kleiner als ϵ sind, nicht bestraft werden, was zur *Sparsity* des Modells bei SVM führt. Wenn darüber hinaus noch ein Term für die Regularisierung dazu kommt, ergibt sich die zu minimierende Fehlerfunktion zu ([Kec01])

$$R(\Theta) = C \sum_{i=i}^{N} L_\epsilon(\hat{f}(x_i,\Theta) - y_i)^2 + \frac{1}{2}||\Theta||^2 \tag{2.62}$$

wobei C ein Komplexitätsparameter ist. Die Fehlerfunktion oben ist konvex und unbegrenzt, aber nicht differenzierbar. Typischerweise wird das Minimierungsproblem in Formel (2.62) durch die Einführung einer *Slack-Variablen* zu einem Optimierungsproblem mit Begrenzung umgewandelt, siehe [SS02] für mehr Details.

Obwohl die SVM mit ihrem *Sparse Kernel* ein schnelles Training erlaubt, wird ihr Einsatz durch ein paar Nachteile beschränkt. Vor allem kann die SVM keine probabilistische Aussage über die Prädiktion treffen ([Bis06]), was sich durch weitere Analysen und Diskussionen als ein schwerer Nachteil für unseren Anwendungsfall entpuppt, siehe Details in

Abschnitt 4.3.2. Außerdem müssen normalerweise der Komplexitätsparameter C und ϵ in Formel (2.61) mittels einer Technik wie *Cross-Validation* bestimmt werden ([Bis06]), was als eine Verschwendung von Messpunkten angesehen werden kann.

Relevance Vector Machine (RVM) für Regression

Eine andere Methode, die auf der Idee des *Sparse Kernels* basiert, ist die RVM für Regression. Die RVM kann ebenfalls als ein lineares *Sparse Model* interpretiert werden, das unter dem bayesschen Paradigma funktioniert. Ähnlich wie die SVM kann die RVM mit folgender Formel ([Tip01]):

$$\hat{f}(x, \Theta) = \sum_{i=1}^{N} \theta_i K(x, x_i) + \theta_0 \tag{2.63}$$

beschrieben werden, wobei der Term $K(x, x_i)$ die Kernfunktion ist, die um den Messpunkt x_i zentriert. Der Parametersatz $\Theta = [\theta_0, \theta_1, \cdots, \theta_N]$ besteht aus $N + 1$ zu schätzenden Parametern. Im Rahmen der bayesschen Inferenz wird dem Parametersatz Θ eine Menge von a-priori-Verteilungen zugewiesen, und zwar für jedes Element x_i der Messdaten jeweils eine a-priori-Verteilung $p(\theta_i|\alpha_i)$ mit den Hyperparametersatz $\underline{\alpha} = [\alpha_0, \alpha_1, \cdots, \alpha_N]$, was das größte Merkmal von RVM ausmacht ([Bis06]). Außerdem wird ein normalverteiltes Messrauschen mit $p(y|x) = \mathcal{N}\left(y|\hat{f}(x, \Theta), \beta^{-1}\right)$ angenommen, wobei β die inverse Varianz des Messrauschens ist. Um den Parametersatz Θ und den dazugehörigen Hyperparametersatz $\underline{\alpha}$ und β zu schätzen, wird der gleiche iterative Prozess wie beim *Bayesian Neural Network* in Abschnitt 2.3.3 eingesetzt.

Der Hauptvorteil von RVM gegenüber SVM ist, dass mittels der bayesschen Inferenz die Modellkomplexität ohne *Cross-Validation* optimiert werden kann und die probabilistische Angabe zum Ausgang auch ein natürliches Produkt des Modelltrainings ist. Außerdem stellte sich heraus, dass eine deutlich spärlichere Lösung erzeugt werden kann ([Bis06]).

2.4 Bewertung der Regressionsmodelle

In diesem Abschnitt wird aus den in Abschnitt 2.3 vorgestellten Modellen das geeignetste Regressionsmodell für unseren Anwendungsfall ausgewählt, nämlich die Applikation der stationären Zusammenhänge in ECU-Funktionen für das Diesel-Luftsystem. Zunächst werden in Abschnitt 2.4.1 die Anforderungen an die Regressionsmodelle aus dem Anwendungsfall abgeleitet und analysiert. Daraufhin werden in Abschnitt 2.4.2 die Kandidatenmodelle von der Theorie her auf ihre Eignung überprüft und bewertet. Dabei wird das tauglichste Modell ausgesucht.

2.4.1 Anforderungen an die Regressionsmodelle

Wie bereits in Abschnitt 1.3 dargestellt, zielt die vorliegende Arbeit darauf ab, alle stationären Zusammenhänge in ECU-Funktionen für das Diesel-Luftsystem **automatisch** zu applizieren, und zwar mit **möglichst geringem Messaufwand**. Während die grundlegenden Ansprüche berücksichtigt werden müssen, z. B. die Modellgüte und der Rechenaufwand für das Modelltraining, stammen die hauptsächlichen Anforderungen an die Regressionsmodelle aus den obigen zwei fett gedruckten Schlüsselwörtern, und zwar dem automatisierten Prozess für die Applikation und dem minimalen Aufwand für die Vermessung. Um die dahintersteckenden Überlegungen besser zu veranschaulichen, werden die Anforderungen in Abbildung 2.11 spezifiziert.

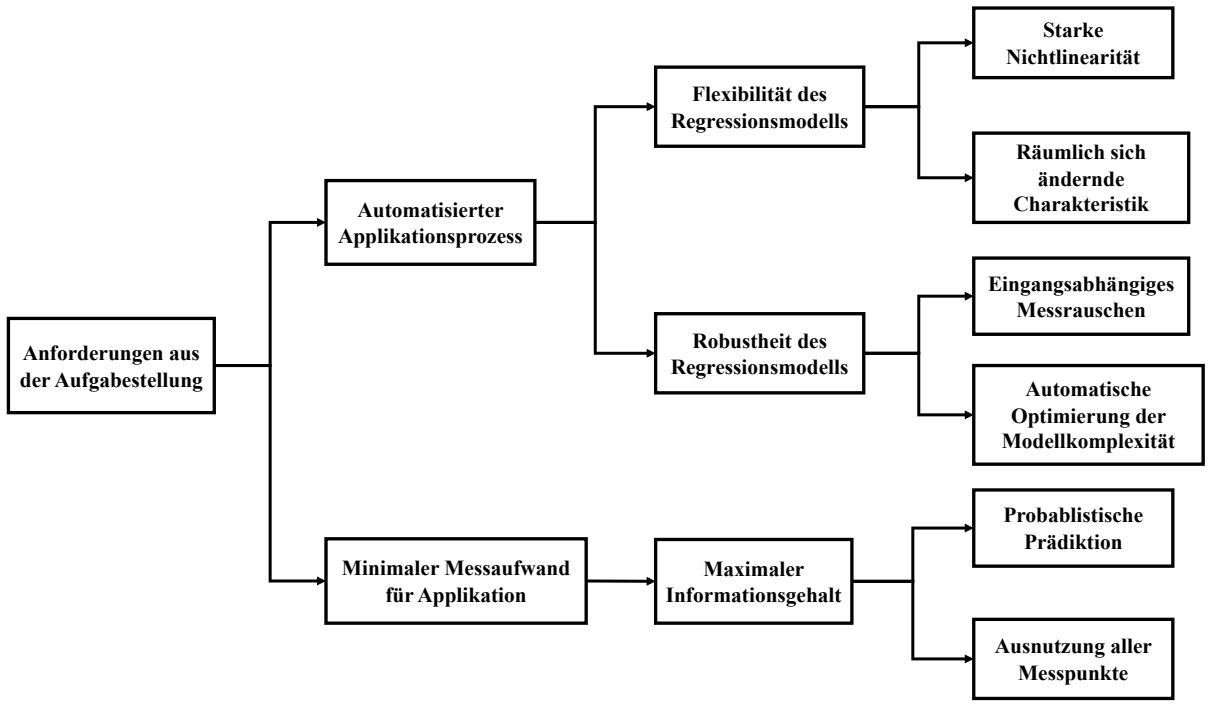


Abbildung 2.11: Ableitung der Anforderungen an das Regressionsmodell aus der Aufgabenstellung.

Als Erstes muss der Applikationsprozess automatisch erfolgen. Das bedeutet auf der einen Seite, dass die Modellstruktur ausreichend flexibel sein soll, um das unbekannte Verhalten des zu approximierenden Zusammenhangs zu beherrschen. Für den zu applizierenden Zusammenhang darf keine Annahme außer gegebener Differenzierbarkeit notwendig sein, da es durchaus passieren kann, dass der zu approximierende Prozess sehr stark von Nichtlinearität und Details mit hohem Grad (Modellverhalten, das durch ein Polynom mit hohem Grad approximiert werden kann) geprägt ist. Außerdem darf eine räumlich variierende Charakteristik beim Zusammenhang nicht ausgeschlossen werden, was bedeutet, dass der Prozess an manchen Stellen ruhig bleiben kann, aber anderswo stark fluktuierend. Alle oben erwähnten Eigenschaften der Zusammenhänge muss das Modell automatisch erkennen und mit einer befriedigenden Genauigkeit verfolgen oder erfassen können. Auf der

anderen Seite, weil ein hoher Grad an Automatisierung des Applikationsprozesses im Vordergrund steht, stellen sich zwei weitere Anforderungen an das Modell. Erstens soll beim Training des Modells die Modellkomplexität automatisch optimiert werden, d.h. jeglicher manueller Eingriff oder eine Festlegung im Vorfeld, z. B. mittels *Cross-Validation*, ist nicht erwünscht. Das bedeutet, dass das Regressionsmodell in der Lage sein soll, die Modellkomplexität automatisch an die Komplexität der Messdaten anzupassen. Zweitens soll das Modell mit eingangsabhängigem Messrauschen (Varianz) umgehen können, da die Annahme, dass die Messdaten immer ein Messrauschen mit konstanter globaler Varianz im Eingangsraum besitzen, in der realen Welt normalerweise nicht zutrifft, zumal für den Anwendungsfall in dieser Arbeit. Die Messdaten in dieser Art werden als heteroskedastische Messdaten bezeichnet ([Whi80]). Wie bereits in Abschnitt 1.2.2 erklärt, kann die effektive Fläche der Drosselklappe oder des AGR-Ventils wegen der starken Nichtlinearität der Durchflussfunktion nur mit großer Unsicherheit geschätzt werden. Infolgedessen soll das ausgewählte Regressionsmodell in der Lage sein, diese eingangsabhängige Ungleichheit bei der Varianz des Messrauschens richtig zu interpretieren und in der Prädiktion widerzuspiegeln.

Eine andere aus der Zielsetzung entstehende Anforderung ist die Minimierung des Messaufwands für die Applikation. Obwohl es eigentlich zu den Aufgaben der Versuchsplanung gehört, soll das gewählte Modell ebenfalls dazu beitragen, wenn es möglich ist. Infolgedessen soll jeder Messpunkt ein möglichst großes Maß an Informationsgehalt über den zu approximierenden Zusammenhang liefern. In diesem Sinn kann ein Modell mit probabilistischer Prädiktion helfen, weil diese Eigenschaft als ein vernünftiger Indikator für den Informationsgehalt eines Messpunkts angesehen werden kann, was in Abschnitt 4.3.2 im Detail erläutert wird. Außerdem sollen keine Messpunkte verschwendet werden, d. h., alle Messpunkte sollen bei dem Modelltraining und der Prädiktion berücksichtigt und ausgenutzt werden.

2.4.2 Gegenüberstellung der Regressionsmodelle

Anhand der oben in Abschnitt 2.4.1 formulierten Anforderungen werden die in Abschnitt 2.3 vorgeschlagenen Regressionsmodelle auf ihre Einsatzmöglichkeit für unsere Aufgaben überprüft und bewertet. Dabei wird das Polynommodell als Vertreter der *Fixed Basis Function Regression* aus Abschnitt 2.3.2 genommen. Darüber hinaus wird in der Bewertung nur das Modell RVM berücksichtigt wegen der Vorteile der RVM gegenüber der SVM, siehe Abschnitt 2.3.7. Daneben werden statt vollständiger Bezeichnungen nur Abkürzungen der jeweiligen Regressionsmodelle in der Bewertungstabelle verwendet. Die Zuordnung ist Tabelle 2.2 zu entnehmen. Anschließend werden alle Regressionsmodelle an den oben erwähnten Anforderungen bzw. Kriterien miteinander verglichen.

Vollständige Bezeichnung	Abgekürzte Bezeichnung
Polynom Regression	Poly
Multilayer Network	MLP
Lokale Modellnetze	LMN
Gaussian Process Regression	GPR
Relevance Vector Machine for Regression	RVM

Tabelle 2.2: Abkürzungen für die Regressionsmodelle.

Starke Nichtlinearität

Bei diesem Kriterium geht es um die Fähigkeit des Modells, stark nichtlineares Verhalten des Zusammenhangs zu erfassen. Im Rahmen von Poly sollte dieses Verhalten mit einem Polynom hohen Grades approximiert werden. Dabei sollte das GPR die beste Leistung unter allen Modellen liefern, da ein Gaußprozessmodell mit SE-Kovarianzfunktion theoretisch als eine lineare Kombination von unendlich vielen Basisfunktionen angesehen werden kann ([Ber12]). Das MLP sollte auch eine mit der GPR vergleichbare Performance aufweisen, was der nichtlinearen Aktivierungsfunktion und normalerweise hohen Anzahl von Neuronen zu verdanken ist. Das Poly mit hoher Ordnung kann theoretisch auch mit starker Nichtlinearität umgehen, aber auf Kosten der Modellgüte, weil das Polynom einen globalen Einfluss im gesamten Eingangsbereich besitzt, was zu dem unerwünschten *wiggly* Modellverhalten führen kann. Es sollte kein besseres Verhalten von LMN und RVM in diesem Kriterium erwartet werden als von GPR, da die beiden Modelle aus einer endlichen Anzahl von Basisfunktionen bestehen.

Räumlich variierende Charakteristik

Neben der starken Nichtlinearität stellt die räumlich variierende Charakteristik des Zusammenhangs im Eingangsraum ebenfalls eine Herausforderung dar, vor allem für GPR, weil bei der GPR mit SE-Kovarianzfunktion eine konstante *Charakteristic Length-Scale* l angenommen wird, siehe Formel (2.53). Die Annahme entspricht einer konstanten Glattheit des Zusammenhangs, was in der Praxis meist nicht zutrifft ([HL09], [TK12] und [Lia12]). Das Poly sollte wegen des globalen Polynoms dasselbe Problem teilen. Das LMN kann seinen Vorteil in diesem Kriterium gegen andere Modelle zeigen, weil hier der lokalen Ungleichheit durch lokale Modelle Rechnung getragen wird.

Heteroskedastische Messdaten

Im Normalfall muss die Heteroskedastizität an den Messdaten detektiert und klassifiziert ([Pay14]) werden, bevor sie durch das Regressionsmodell behandelt wird. Sowohl für die Detektion ([Whi80]) als auch für die Behandlung oder Neutralisierung der Heteroskedas-

tizität ([Ker+07] und [KZL13]) wurden bereits zahlreiche Methoden entwickelt. In der vorliegenden Arbeit lässt sich allerdings der Schritt für die Detektion sparen, da die Existenz der Heteroskedastizität aus der Analyse in Abschnitt 1.2.2 schon bestätigt ist. Darüber hinaus kann das Maß der Heteroskedastizität in jedem Messpunkt geschätzt werden, siehe Abschnitt 1.2.2 für Details. Beim Poly für die Behandlung der Heteroskedastizität an den Messdaten kann der gewichtete Kleinste-Quadrate-Schätzer eingesetzt werden ([Gre03]). Die Integration der eingangsabhängigen Varianz bei der GPR kann auch in einer natürlichen Art und Weise erfolgen, und zwar durch die direkte Berücksichtigung solcher Information bei der Kovarianzmatrix, was in Abschnitt 4.2.3 erklärt wird. Bei der RVM kann eine ähnliche Methode wie bei der GPR herangezogen werden, um beim Schätzungsverfahren auf die Heteroskedastizität Rücksicht zu nehmen. Beim MLP kann die Heteroskedastizität an den Messdaten ebenfalls behandelt werden, aber das Hinzufügen einer eingangsabhängigen Varianz in die Verlustfunktion kann das Schätzverfahren numerisch instabil machen ([Bay+13]).

Automatische Optimierung der Modellkomplexität

Außer Poly und LMN werden normalerweise MLP, GPR und RVM im Rahmen der bayesschen Inferenz trainiert, die in Abschnitt 2.2.2 vorgestellt wurde, wobei die Modellkomplexität automatisch optimiert wird. Allerdings kann wegen der Nichtlinearität der Likelihood-Funktion in Formel (2.42) das Trainingsproblem von MLP nicht analytisch exakt gelöst werden, d.h. dabei wird eine Approximationstechnik eingesetzt. Die RVM hat dasselbe Problem. Außerdem ist beim Training von MLP das Ergebnis sehr empfindlich gegen die Initialisierung der Parameter ([Bis06]). Im Gegensatz zu MLP und RVM kann das Trainingsproblem von GPR nach Formel (2.59) exakt gelöst werden, was zu einem robusteren Modell führt.

Probabilistische Prädiktion

Wie schon anfangs erklärt wurde, kann es für die Versuchsplanung sehr hilfreich sein, wenn das Modell in der Lage ist, eine vernünftige Wahrscheinlichkeitsverteilung über den Modellausgang anzubieten. Normalerweise kann bei Poly eine Aussage über das Konfidenzintervall des Ausgangs getroffen werden, jedoch ist dieses nur präzise und vernünftig, wenn die Modellannahme des Polynoms vernünftig ist, was in der Realität nicht unbedingt zutrifft. Da das Modelltraining von GRP, MLP und RVM auf der bayesschen Inferenz basiert, ist die probabilistische Prädiktion ein natürlicher Bestandteil des Verfahrens, aber mit unterschiedlicher Qualität. Während die Berechnung der Prädiktion bei MLP und RVM mittels Approximation erfolgen muss ([Gur97] und [Bis06]), kann GPR eine exakte Lösung dazu anbieten. Außerdem wird bei RVM eine eher ungewöhnliche Unsicherheit über den Ausgang produziert – je größer der relative Abstand zwischen der Teststelle und dem Trainingsdatensatz, desto kleiner die Unsicherheit des Ausgangs ([Mur12]).

Ausnutzung aller Messpunkte

Bei LMN wird der Eingangsraum in mehrere kleinere Subräume partitioniert, und ein lokales Polynommodell nutzt lediglich die Messdaten, die in die dazugehörige Region des lokalen Modells fallen. Infolgedessen kann der Übergang zwischen lokalen Modellen problematisch für die Prädiktion sein ([Ber12]). Im Gegensatz dazu werden bei anderen Kandidatenmodellen alle Messpunkte für das Modelltraining und die Prädiktion berücksichtigt.

Zusammenfassung und Schlussfolgerung

Zusammengefasst sehen die Ergebnisse der Bewertungen wie in Tabelle 2.3 aus.

Anforderungen bzw. Kriterien \ Regressionsmodelle	Poly	MLP	LMN	GPR	RVM
Starke Nichtlinearität	0	++	+	++	++
Räumlich variierende Charakteristik	0	+	++	0	+
Heteroskedastische Messdaten	+	+	+	++	++
Automatische Optimierung der Modellkomplexität	0	+	+	++	+
Probabilistische Prädiktion	0	+	0	++	+
Ausnutzung aller Messpunkte	++	++	+	++	++
Zusammenfassung	0	+	+	++	+

Tabelle 2.3: Zusammenfassung der Auswahl von Regressionsmodellen; 0 = befriedigend, + = gut, ++ = sehr gut.

Aus Tabelle 2.3 ist ersichtlich, dass die GPR das geeignetste Regressionsmodell für unseren Anwendungsfall ist. Allerdings leidet die standardmäßige GPR mit SE-Kovarianzfunktion unter der stationären Kovarianzfunktion und kann nicht sehr gut mit der eventuell starken räumlich variierenden Charakteristik beim zu approximierenden Zusammenhang umgehen. Dieses Problem wird mit der in Abschnitt 4.2.3 entwickelten GPR mit nichtstationärer Kovarianzfunktion behoben.

3 Statistische Versuchsplanung für globale Approximation

Wie schon in Abschnitt 1.2.2 erklärt, werden in der ECU-Funktionsapplikation die *Grey-Box*- bzw. *Black-Box*-Modelle durch Experimente am Prüfstand appliziert. Außerdem stellt sich aus der Zielsetzung in Abschnitt 1.3 heraus, dass der Messaufwand, der durch die Anzahl der benötigten Messpunkte quantifiziert wird, für die Applikation auf einem möglichst geringen Niveau gehalten werden muss. Um diese Anforderungen erfüllen zu können, wird in der vorliegenden Arbeit versucht, das Experiment so zu organisieren, dass der generierte Messpunkt ein möglichst großes Maß an Informationsgehalt für die Applikation liefern kann. Die DoE-Technik erweist sich für das Problem als zweckdienlich.

In Abbildung 3.1 wird das grundsätzliche Szenario verdeutlicht, wo die DoE-Technik eingesetzt wird. Oft wird uns der zu ermittelnde Prozess nur als *Black-Box* zur Verfügung gestellt, d. h. es können lediglich die Eingänge (Einflussfaktoren) und die Ausgänge (Zielgrößen) kontrolliert und beobachtet werden. Was genau innerhalb des Prozesses passiert, ist unzugänglich. Die Aufgabe von DoE ist, durch eine vernünftige Variation der Eingänge, d.h. durch eine vernünftige Versuchsplanung, eine maximale Information über den Prozess zu erlangen ([SVH10]).

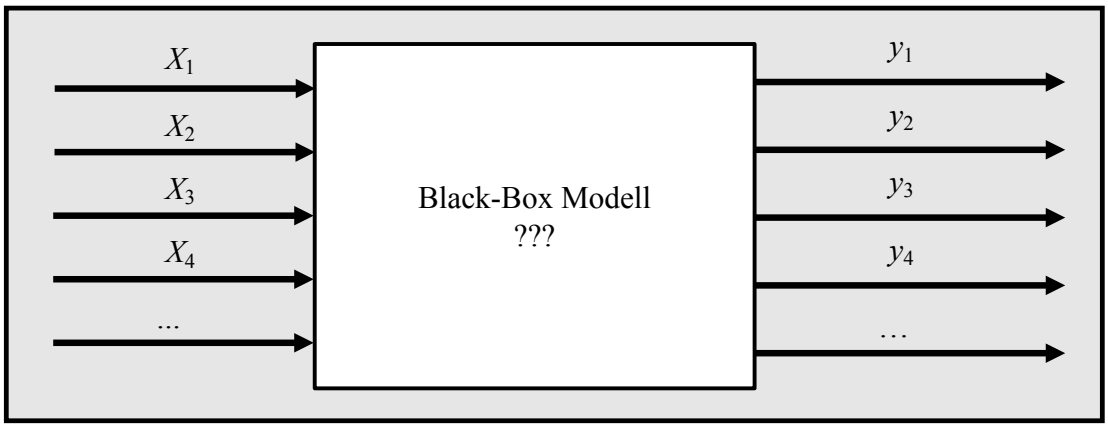


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung der Anwendungssituation der DoE.

In diesem Kapitel werden zuerst die Methoden der statistischen Versuchsplanung im Abschnitt 3.1 nach verschiedenen Kriterien klassifiziert. Anschließend wird in Abschnitt 3.2 die klassische stufige Versuchsplanung betrachtet. Daraufhin wird in Abschnitt 3.3 auf die raumfüllende Versuchsplanung eingegangen. Dann werden in Abschnitt 3.4 das Konzept und die Funktionsweise des *Optimal Design* erklärt. Schließlich wird in Abschnitt 3.5 die Idee der sequentiellen Versuchsplanung vorgestellt.

3.1 Klassifikation der statistischen Versuchsplanung

Die Methoden der DoE können nach verschiedenen Kriterien klassifiziert werden. Je nachdem, welches Ziel dabei angestrebt wird, kann DoE grob in folgende Kategorien aufgeteilt

werden ([Mon08] und [RPS11]):

- DoE für *Screening-Experiment*: Dabei wird ein Versuchsplan erstellt, um die Signifikanz eines Eingangsfaktors auf bestimmte Ausgangsfaktoren zu ermitteln. Die Eingänge, die als nicht signifikant eingestuft werden, werden aus den Eingangsfaktoren entfernt. Ein *Screening-Experiment* wird normalerweise als eine Art von Vorverarbeitung für die echte Versuchsplanung verwendet ([YT02] und [Kle08]).

  Der DoE-Prozess für die Erstellung eines Modells, das ein Eingangs-Ausgangs-Verhalten beschreibt, besteht normalerweise aus drei Arbeitsschritten: *Screening-Experiment* (Identifikation der signifikanten Eingangsfaktoren), Modellbildung mittels der gewonnenen Messdaten und Validierung des gebildeten Modells. In der vorliegenden Abhandlung müssen wir uns nur auf die letzten zwei Arbeitsschritte konzentrieren, da die Eingänge in unserem Anwendungsfall schon aus Erfahrung als signifikant für die jeweiligen Ausgänge eingestuft wurden, was ein *Screening-Experiment* überflüssig macht.

- DoE für lokale Approximation: Dabei können mehrere Ziele verfolgt werden, z. B. die Suche nach den Eingängen, damit der Ausgang einen bestimmten Wert annimmt, die Maximierung oder Minimierung des Ausgangs etc. Genau diese DoE-Technik kann Anwendung im Bereich der Motorapplikation finden, was schon in Abschnitt 1.2.1 dargestellt wurde.

- DoE für globale Approximation: Dabei geht es darum, mit dem gewonnenen Datensatz ein Regressionsmodell zu erstellen, das den Prozess im gesamten Eingangsraum mit zufriedenstellender Genauigkeit approximieren kann. Dies ist genau die Art von DoE, die für die ECU-Funktionsapplikation eingesetzt werden muss.

Je nachdem, wie der Versuchsplan konstruiert wird, kann DoE in folgende Kategorien aufgeteilt werden:

- DoE mit stufigem Versuchsplan: Während der Konstruktion des stufigen Versuchsplans dürfen die Eingangsfaktoren nur Werte in einem diskretisierten Eingangsraum annehmen ([Mon08] und [SVH10]). Es gibt Situationen, in denen nur diskrete Eingangsfaktoren existieren, z. B. gibt es bei der Überprüfung des Effekts von einem neuen Medikament nur zwei Stufen des Eingangsfaktors – mit und ohne Einnahme des Medikaments. Es kann auch vorkommen, dass lediglich diskrete Eingangsfaktoren erlaubt werden, um den Zusammenhang zwischen Eingang und Ausgang mit einem vertretbaren Aufwand ermitteln zu können. Normalerweise kann ein Eingangsfaktor zwei Stufen annehmen, bei einem komplexen Zusammenhang kann ein Eingangsfaktor mit drei Stufen in Frage kommen. Bei klassischen DoE-Methoden, die in 3.2 vorgestellt werden, wird normalerweise der stufige Versuchsplan bevorzugt.

- DoE mit kontinuierlichem Versuchsplan: In diesem Fall können theoretisch die Eingangsfaktoren einen beliebigen Wert innerhalb des Eingangsraums annehmen. Wegen der begrenzten Genauigkeit bei der praktischen Bestimmung der Eingangsfaktoren, z. B. wird die Position der Drosselklappe im Dieselmotor bei einem Experiment nicht unendlich genau sein, muss der gewünschte Eingangsfaktor in der Praxis in einem diskretisiertem Eingangsraums mit einer wesentlich feineren Granularität als beim stufigen Versuchsplan angepasst werden.

Eine weitere Möglichkeit, die DoE-Verfahren zu klassifizieren, bezieht sich auf die Frage, ob die Versuchsplanung auf einer Modellannahme basiert ([Ber12]).

- Modellfreie DoE: Wenn keine mathematische Modellannahme für den zu ermittelnden Prozess vorhanden ist, wird normalerweise der raumfüllende Versuchsplan verwendet. Dabei handelt es sich darum, den Versuchsraum durch Abtastpunkte *gleichmäßig* zu füllen, damit das Eingangs-Ausgangs-Verhalten ausreichend ermittelt werden kann ([LR11]). Die gebräuchlichen Ansätze sind Gittersampling, Abtaststrategien basierend auf *Sobol Sequence* und das *Latin Hypercube Design*. Außerdem werden auch geometrische Methoden verwendet.

- Modellbasierte DoE: Die meisten DoE-Methoden gehören zu dieser Kategorie, z. B. das *Plackett-Burman Design* (lineares Modell), das *Central Composite Design* (quadratisches Modell) und das D-optimal Design (hauptsächlich parametrisches Modell). In diesem Fall erfolgt die Versuchsplanung aufgrund der Modellannahme. Statt einer raumfüllenden Verteilung zielt die Abtaststrategie hierbei eher darauf ab, mithilfe der Modellannahme die Punkte mit dem höchsten Informationsgehalt zu identifizieren. Die dabei verwendeten Kriterien, mit denen der Informationsgehalt berechnet wird, können die Minimierung der Varianz der Parameter oder die Optimierung der Approximationsgüte sein.

Wenn die verfügbaren Ressourcen für das Experiment begrenzt und schon vorher festgesetzt werden, kann das DoE wie folgt klassifiziert werden:

- *Continuous Design*: Normalerweise kann ein Versuchsplan ξ mit einem Eingangsfaktor $\boldsymbol{x}$ folgendermaßen dargestellt werden ([Boo07]):

$$\xi = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & x_3 & \dots & x_N \\ w_1 & w_2 & w_3 & \dots & w_N \end{pmatrix} \tag{3.1}$$

  Dabei steht $\boldsymbol{x} = [x_1, x_2, x_3 \dots x_N]$ für die Menge aller möglichen Werte, die der Eingangsfaktor annehmen kann und die als Stützpunkte bezeichnet werden ([YS09]). $\boldsymbol{w} = [w_1, w_2, w_3 \dots w_N]$ steht für das Verteilungsschema der verfügbaren Ressourcen

auf den Stützpunkten. Außerdem kann der Vektor $\boldsymbol{w}$ ebenfalls als Gewichtungsvektor für die Stützpunkte interpretiert werden und wird typischerweise normalisiert, wobei Folgendes gilt ([Kie74]):

$$\sum_{i=1}^{N} w_i = 1 \quad \text{und} \quad 0 \leq w_i \leq 1 \tag{3.2}$$

Der Versuchsplan mit kontinuierlicher Gewichtung für die Stützpunkte lässt sich als *Continuous Design* bezeichnen. Die Stetigkeit der Gewichtung sorgt dafür, dass die Suche nach der optimalen Ressourcenverteilung mittels eines ausgereiften ableitungsbasierten Optimierungsverfahrens erfolgen kann.

- *Exact Design*: Beim Versuchsplan, den man letztendlich in der Praxis verwendet, muss die Anzahl der Messpunkte bei jedem Stützpunkt ganzzahlig sein, und der entsprechende Versuchsplan wird als *Exact Design* bezeichnet ([Kie59]). Die direkte Konstruktion des *Exact Designs* wird Schwierigkeiten bereiten, da das dazugehörige diskrete Optimierungsproblem keine leichte Aufgabe darstellt. Infolgedessen erfolgt in der Regel die Konstruktion des *Exact Designs* nach der Bestimmung des entsprechenden optimalen *Continuous Designs*, wobei das *Continuous Design* durch ein *Exact Design* näherungsweise ersetzt wird. Die Approximation des *Continuous Designs* durch das *Exact Design* wird in [Puk06] und [WL11] abgeklärt.

Im Folgenden werden weitere mögliche Kriterien für die Klassifikation der DoE-Methoden aufgelistet:

- Methoden, welche die Wiederholung von Messpunkten erlauben, und Methoden, welche die Wiederholung von Messpunkten ausschließen. In der vorliegenden Arbeit wird nur die Methode ohne Wiederholung berücksichtigt.
- Methoden, welche die gleichzeitige Anpassung von Eingangsfaktoren erlauben, und Methoden, welche die gleichzeitige Anpassung von Eingangsfaktoren ausschließen. Die letztere Methode wird als Verfahren *One-Factor-At-a-Time* (OFAT) bezeichnet ([Czi99]).

In Abbildung 3.2 wird die Klassifikation der statistischen Versuchsplanung zusammengefasst.

3.2 Stufige Versuchsplanung

Wie bereits erwähnt, kann ein Eingangsfaktor bei der stufigen Versuchsplanung nur diskrete Werte annehmen. Im Folgenden werden die wichtigsten stufigen Versuchspläne vorgestellt.

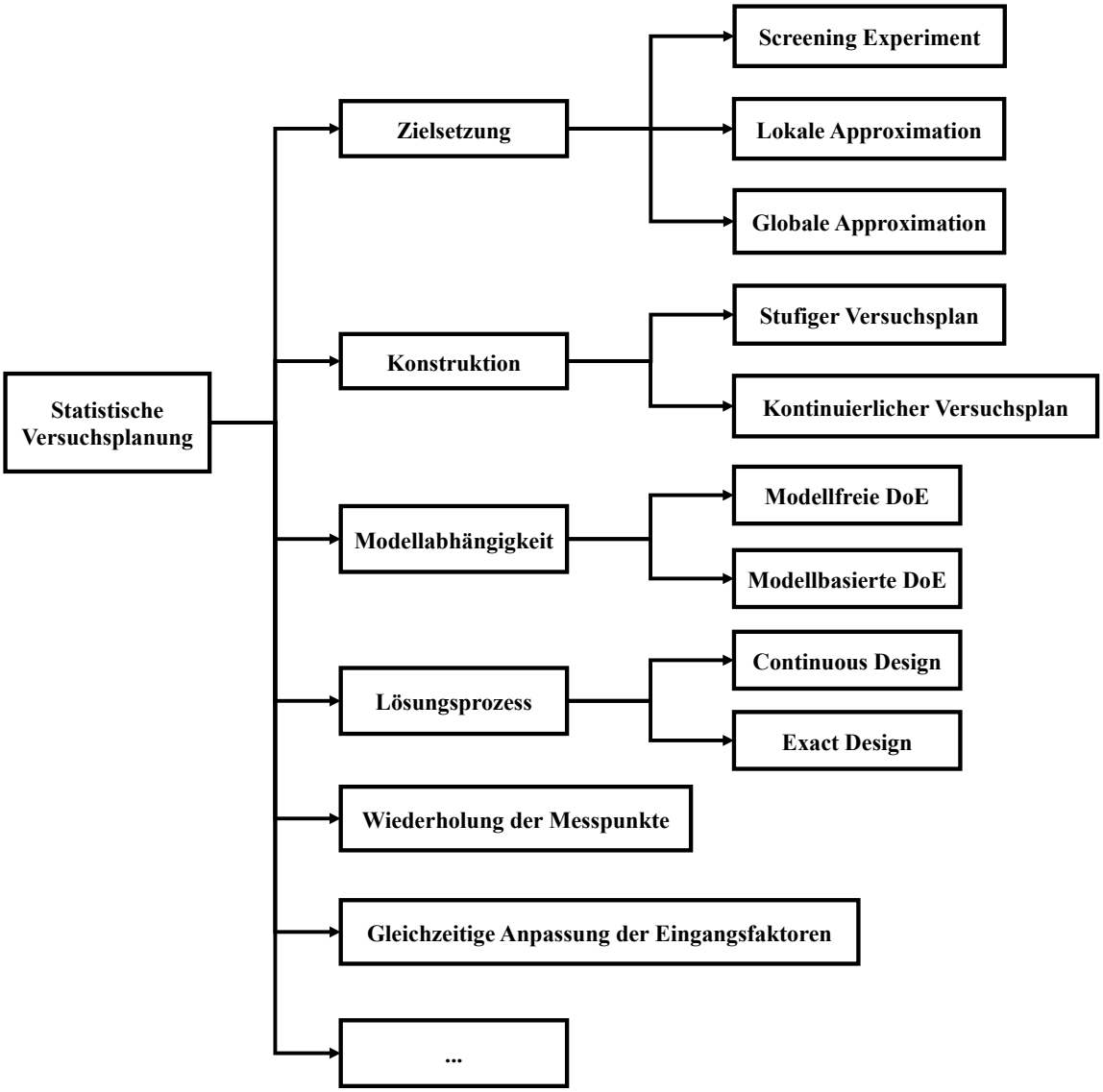


Abbildung 3.2: Klassifikation der statistischen Versuchsplanung nach verschiedenen Kriterien.

Vollfaktorplan

Beim Vollfaktorplan werden alle möglichen Kombinationen von Eingangsfaktoren in den Versuchsplan eingespeist. Während der Vollfaktorplan den Vorteil einer lückenloser Abdeckung des gesamten Eingangsraums genießt, wird der Einsatz dieses Ansatzes wegen der Explosion der Anzahl benötigter Messpunkte bei dem multivariaten Problem limitiert. Mit der Anzahl m der Eingangsfaktoren und der Anzahl p der Stützpunkte[9] bei jedem Eingangsfaktor kann die Anzahl N der Messpunkte für einen Vollfaktorplan durch folgende Formel berechnet werden:

$$N = p^m \tag{3.3}$$

[9]Werte, die ein Eingangsfaktor annehmen kann. Es wird in der Berechnung in Formel (3.3) angenommen, dass die Anzahl der Stützpunkte für jeden Eingangsfaktor gleich ist.

Teilfaktorplan für die lineare Modellannahme

Da der Vollfaktorplan nicht mit vertretbarem Messaufwand durchgeführt werden kann, entsteht die Idee, nur einen Bruchteil des Vollfaktorplans zu verwenden, was zur Entwicklung des sogenannten Teilfaktorplans führt. Im Regelfall zielt der Teilfaktorplan nicht direkt auf die Modellierung eines Eingangs-Ausgangs-Verhaltens ab, sondern wird im *Screening-Experiment* eingesetzt ([Tri08] und [Was10]). Die Essenz und der Erfolgsfaktor eines Teilfaktorplans bestehen in der Auswahl eines Teils des Vollfaktorplans. Zu den hauptsächlichen Kriterien für die Konstruktion des Teilfaktorplans gehören unter anderem die Balance[10] und die Orthogonalität[11]. Die am häufigsten gebrauchten Ansätze des Teilfaktorplans sind das *Plackett-Burman-Design* ([PB46]) und die *Yates Analysis* ([Yat78]). Während sich die Anzahl der Messpunkte durch den Einsatz des Teilfaktorplans erheblich verringert, entsteht auch die Gefahr der Vermengung von Haupteffekt und Wechselwirkung ([Nat10] und [SVH10]). Der hier vorgestellte zweistufige Teilfaktorplan funktioniert unter der Annahme, dass das relevante Eingangs-Ausgangs-Verhalten linear ist.

Teilfaktorplan für die quadratische Modellannahme

Wenn schon vor dem Experiment bekannt ist oder es sich nach einem Vorversuch herausstellt, dass eine lineare Modellannahme nicht ausreicht, um den betrachteten Prozess darzustellen, ist eine quadratische Modellannahme in Betracht zu ziehen. Um dem nichtlinearen Zusammenhang gerecht zu werden, wird normalerweise ein dreistufiger Versuchsplan erstellt, der die gegebenenfalls auftretende Krümmung beschreiben kann ([Nat10]). Der klassische dreistufige Teilfaktorplan zerfällt in zwei Kategorien: *Central Composite Design* und *Box-Behnken-Design*.

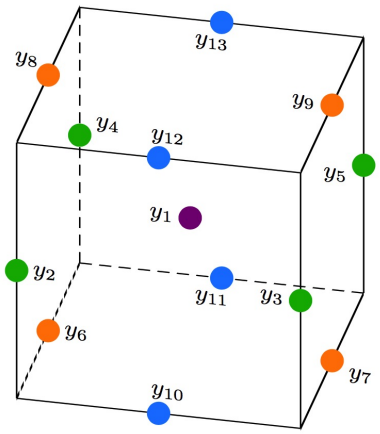
Ein *Central Composite Design* besteht in der Regel aus einem zweistufigen Teilfaktorplan und einer Gruppe von sogenannten Sternpunkten, die dafür zuständig sind, das Krümmungsverhalten zu berücksichtigen ([BD07]). Je nachdem, wo die Sternpunkte platziert werden, gibt es drei Arten von *Central Composite Designs*: *Central Composite Circumscribed*, *Central Composite Inscribed* und *Central Composite Face Centered*, siehe [Nat10] für mehr Information. Das *Box-Behnken-Design* wird eingesetzt, wenn schon vor einem Versuch bekannt ist, dass die Eckpunkte des Eingangsraums für die Untersuchung nicht relevant sind ([BW92]). Die Messpunkte werden dabei auf die Mitte jeder Kante gesetzt. In Abbildung 3.3 werden ein typisches *Box-Behnken-Design* und ein typisches *Central Composite Design* dargestellt.

3.3 Raumfüllende Versuchsplanung

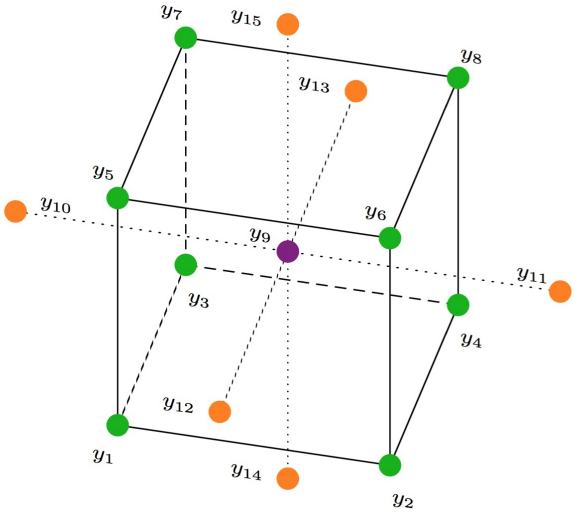
Wenn keine konkrete Annahme für den unterliegenden Prozess vorhanden ist, erweist sich oftmals die raumfüllende Versuchsplanung (*Space-Filling Design*) als ein zielführender An-

[10] Jede Kombination von Eingangsfaktoren besitzt die gleiche Anzahl von Messgrößen ([SVH10]).

[11] Zwei Vektoren von derselben Länge sind orthogonal, wenn die Summe der Produkte der korrespondierenden Einträge null ist ([SVH10]).



(a) Box-Behnken-Design für zwei Eingangsfaktoren ([SVH10]).



(b) Central Composite Design für zwei Eingangsfaktoren ([SVH10]).

Abbildung 3.3: Beispiele für den Teilfaktorplan für quadratische Modellannahme.

satz. Dabei wird angestrebt, den Versuchsraum möglichst gleichmäßig zu füllen. Es existiert eine Vielzahl von Konzepten, was die Definition und die Konstruktion eines *gleichmäßigen* Versuchsplans angeht. Die einfachste Möglichkeit ist die äquidistante Abtastpunktverteilung, und zwar das Gittersampling. Jedoch explodiert beim Gittersampling die Anzahl der benötigten Abtastpunkte wegen des Fluchs der Dimensionalität zu einem unerträglichen Grad, was den Einsatz des Gittersamplings auf eine niedrige Dimension beschränkt. Im Folgenden werden ein paar fortgeschrittenere raumfüllende Versuchspläne vorgestellt.

Sobol Sequence (SS)

Die Erfindung von Sobol Sequence stammt aus dem Umfeld der numerischen Approximation eines Integrals ([AG07]). Dabei versucht man, den Eingangsraum durch Abtastpunkte zu füllen, damit der Wert eines Integrals approximiert wird. SS gehört zur Klasse der *Low-Discrepancy Sequence* (LDS). Die Diskrepanz einer Sequenz wird von der Diskrepanz eines Subintervalls im Eingangsraum bestimmt. Ohne die genaue mathematische Definition zu formulieren, ist die Diskrepanz J eines Subintervalls die Differenz zwischen der Proportion der Abtastpunkte in J im Verhältnis zu allen Abtastpunkten und der Proportion des Volumens von J im Verhältnis zu dem gesamten Eingangsraum ([DSH08]). Die Konstruktion der SS soll dafür sorgen, dass die maximale Diskrepanz unter allen Subintervallen minimiert wird ([DSH08]).

Während die SS von Natur aus sehr gut mit dem Geist der sequentiellen Versuchsplanung übereinstimmt, kann man sie auch bei passiver Versuchsplanung benutzen. Dabei muss man lediglich die Dimension festlegen und die gewünschte Anzahl Abtastpunkte aus der generierten Sequenz herausnehmen.

Latin Hypercube Design (LHD)

Beim *Latin Hypercube Design*, das zur Klasse *Stratified Sampling* gehört ([BJH11]), wird ebenfalls versucht, den Versuchsraum durch eine gleichmäßige Verteilung der Abtastpunkte abzudecken. Zu diesem Zweck wird zuerst der Versuchsraum in Subintervalle unterteilt. Die Anzahl der Subintervalle wird durch die gewünschte Granularität der Eingangsfaktoren bestimmt. Anschließend verteilt das LHD die Abtastpunkte so in die Subintervalle, dass es in jedem Subintervall nur einen Abtastpunkt gibt ([Via13]). In Abbildung 3.4 wird ein LHD mit zwei Eingangsfaktoren gezeigt.

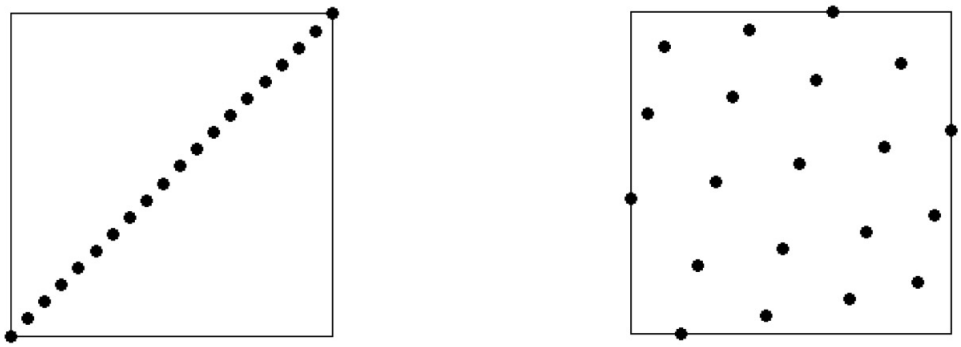


Abbildung 3.4: Verteilung der Abtastpunkte bei einem LHD mit 20 Abtastpunkten ([Via13]); die beiden Verteilungskonzepte passen zur Definition des LHD, es ist allerdings offensichtlich, dass es sich auf der linken Seite um ein Beispiel einer schlechten Verteilung handelt; auf der rechten Seite sorgt das Verteilungskonzept für eine bessere Abdeckung des Versuchsraums.

Ursprünglich wird das LHD durch einen Zufallsprozess erzeugt. Für die Erstellung eines LHD mit 2 Eingangsfaktoren und 20 Abtastpunkten muss der Algorithmus aus 10^{36} Möglichkeiten die beste Abtastpunktverteilung suchen, was eine hohe Anforderung an das Optimierungsverfahren stellt ([Via13]). Ein effizientes Verfahren für die Erstellung eines vernünftigen LHD ist noch ein Forschungsthema und wird in [Par94], [BST04] etc. behandelt.

Delaunay Triangulierung (DT)

Die *Delaunay Triangulierung* ist ein Verfahren für die Erstellung eines Dreiecknetzes und wurde in [Del34] eingeführt. In der Regel wird es für die Optimierung der Berechnungsnetze bei der Finite-Element-Methode eingesetzt ([ZTT77]). Im Bereich der Versuchsplanung kann das DT-Verfahren als ein Ansatz angesehen werden, der den Versuchsraum basierend auf den bestehenden Abtastpunkten durch Dreiecke möglichst gleichmäßig unterteilen kann. Die Dreiecke werden so erstellt, dass der Umkreis eines Dreiecks keine anderen Abtastpunkte außer den Dreieckpunkten enthalten darf ([DRS10]). Diese sogenannte Umkreisbedingung hat dafür gesorgt, dass der kleinste Innenwinkel aller Dreiecke maximiert wird ([DRS10]). Die dahintersteckende Idee ist, dass man dabei versucht, extrem schräge Dreiecke zu vermeiden, und hofft, dadurch eine gleichmäßige Unterteilung des Versuchsraums zu erreichen. In Abbildung 3.5 wird die Idee des DT-Verfahrens verdeutlicht.

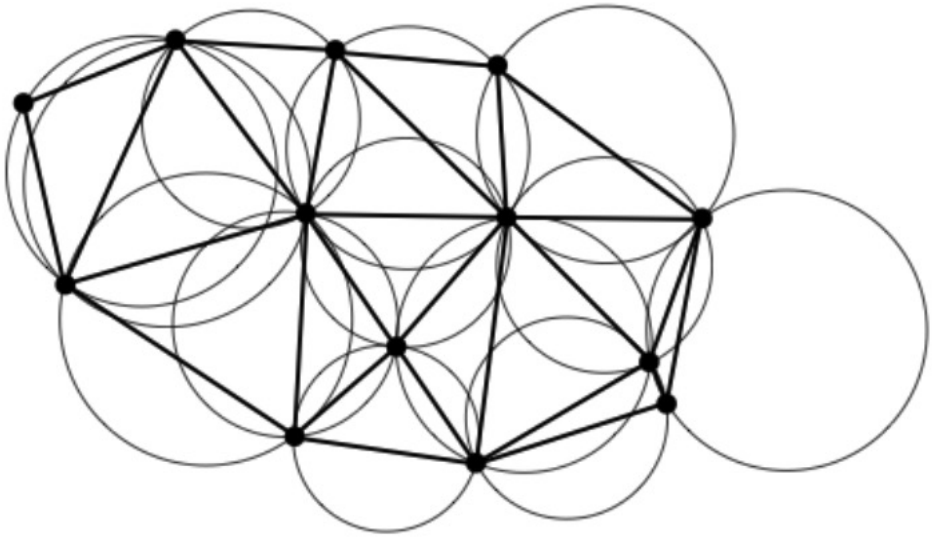


Abbildung 3.5: Dreieckvernetzung durch DT ([CDS12]); die Umkreise der Dreiecke werden durch graue Kreise dargestellt.

Bei der Versuchsplanung kann das DT-Verfahren offensichtlich nicht für die Erstellung eines passiven Versuchsplans verwendet werden. Im Gegensatz dazu ist das DT-Verfahren sehr leicht in die sequentielle Versuchsplanung zu integrieren und kann eingesetzt werden, um großen unbesetzten Raum zu identifizieren. Dafür kann z. B. die Fläche eines Dreiecks als Auswahlkriterium für den nächsten Abtastpunkt dienen ([HSB06] und [DI09]).

3.4 Optimal Design

Wenn ein stark nichtlineares Verhalten des Prozesses, z. B. ein Polynom höheren Grades, berücksichtigt werden muss oder ein dichter und kontinuierlicher Versuchsplan notwendig ist, sind die oben genannten klassischen stufigen Methoden nicht mehr einsetzbar. Dafür wurde das Konzept *Optimal Design* (optimale Versuchsplanung) in[KW59] eingeführt. Einer bestimmten Modellannahme folgend, beschäftigt sich die Methode der optimalen Versuchsplanung damit, die Varianz der Parameter oder die Varianz der Ausgangsprädiktion des angenommenen Modells zu minimieren. Sowohl bei einem linearen als auch nichtlinearen Modell wird ein ähnliches Verfahren verwendet, um einen optimalen Versuchsplan zu erstellen, aber die Details der Implementierung können sich unterscheiden und werden im Anschluss erklärt. In diesem Abschnitt wird das Konzept zunächst unter der Annahme eines linearen Modells erklärt und daraufhin beim Fall eines nichtlinearen Modells diskutiert.

3.4.1 Optimale Versuchsplanung für ein lineares Modell

In diesem Abschnitt wird die optimale Versuchsplanung für ein linear parametriertes Modell vorgestellt. Das Regressionsproblem für ein linear parametriertes Modell wurde schon in Abschnitt 2.3.2 eingeführt und analysiert. Unter der Annahme, dass die Modellkomplexität bereits bekannt ist, lässt sich ein lineares Modell mit dem Datensatz $\boldsymbol{D} = \{x_i, y_i | i \in \{1 \dots N\}\}$ durch folgende Formel beschreiben:

$$\hat{f}(x, \Theta) = \sum_{j=0}^{m} \theta_j \phi_j(x) \tag{3.4}$$

Wenn ein normalverteiltes Messrauschen $\epsilon \sim \mathcal{N}\ (0, \sigma^2 I)$ angenommen wird, kann der Parametersatz Θ mit der ML-Methode in Formel (2.11) geschätzt werden. Wenn der Versuchsplan $\xi = [x_1, x_2, \cdots, x_N]$[12] eingesetzt wird, ergibt sich die Kovarianzmatrix $\mathrm{cov}(\xi, \hat{\Theta})$ des geschätzten Parametersatzes zu [FL13]

$$\mathrm{cov}(\xi, \hat{\Theta}) = \hat{\sigma}^2 (\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X})^{-1} \tag{3.5}$$

wobei der Term $\boldsymbol{X}$ für die in Abschnitt 2.3.2 definierte Designmatrix steht und stark vom Versuchsplan ξ abhängt. Die Terme $\hat{\Theta}$ und $\hat{\sigma}$ sind jeweils der geschätzte Parametersatz und die geschätzte Standardabweichung des Messrauschens. Für den Parametersatz gilt $\hat{\Theta} = [\hat{\theta}_0, \hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2, \cdots, \hat{\theta}_m]$, und m ist als die Modellkomplexität zu interpretieren. Angenommen, dass der Prozess mit dem ausgewählten Modell ausreichend gut approximiert werden kann, lässt sich die Modellgüte durch die Varianz des Parametersatzes bestimmen[13], die wiederum vom Messrauschen und der Designmatrix $\boldsymbol{X}$ abhängig ist. Wenn die Varianz σ^2 des Messrauschens unkontrollierbar ist, um eine gute Modellgüte zu erreichen, soll der Term $(\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{X})^{-1}$ möglichst „klein“ gehalten werden. Somit kommt man schnell auf die Schlussfolgerung, dass der Versuchsplan so erstellt werden muss, dass die Varianz des Parametersatzes minimiert wird, was zu folgendem Optimierungsproblem führt ([FL13]):

$$\xi^* = \arg\min_{\xi} \mathrm{cov}(\xi, \hat{\Theta}) \tag{3.6}$$

Unter gewissen Bedingungen in [Cra16] kann die Kovarianzmatrix $\mathrm{cov}(\xi, \hat{\Theta})$ des Parametersatzes mit der invertierten Fisher-Informationsmatrix (FIM) approximiert werden ([SM08])

$$\mathrm{cov}(\xi, \hat{\Theta}) \cong \mathcal{F}^{-1}(\xi, \hat{\Theta}) \tag{3.7}$$

[12] Dieser Versuchsplan bedeutet, dass an jedem Stützpunkt $[x_1, x_2, \cdots, x_N]$ ein Messpunkt platziert wird.
[13] Der Maximum-Likelihood-Schätzer ist erwartungstreu.

wobei die FIM durch folgende Formel definiert wird ([Pap93]):

$$\mathcal{F}(\xi, \hat{\Theta})_{i,j} = E\left[\left(\frac{\partial \log p(y|x, \hat{\theta}_i)}{\partial \hat{\theta}_i}\right)\left(\frac{\partial \log p(y|x, \hat{\theta}_j)}{\partial \hat{\theta}_j}\right)\right] \tag{3.8}$$

Aus Formel (3.7) ist zu sehen, dass die Minimierung der Kovarianzmatrix $\mathrm{cov}(\xi, \hat{\Theta})$ des geschätzten Parametersatzes äquivalent zur Maximierung der FIM des Versuchsplans $\mathcal{F}(\xi, \hat{\Theta})$ ist. Damit kann das Optimierungsproblem für die Suche nach dem optimalen Versuchsplan in Formel (3.6) in folgendes Optimierungsproblem umgewandelt werden

$$\xi^* = \arg\max_{\xi} \Psi(\mathcal{F}(\xi, \hat{\Theta})) \tag{3.9}$$

wobei Ψ ein skalares Funktional der FIM $\mathcal{F}(\xi, \hat{\Theta})$ ist. Der Definition von FIM in Formel (3.8) ist leicht zu entnehmen, dass die FIM im Fall eines linearen Modells unabhängig vom Parametersatz $\hat{\Theta}$ ist, d. h. dabei gilt es, folgendes Optimierungsproblem zu lösen:

$$\xi^* = \arg\max_{\xi} \Psi(\mathcal{F}(\xi)) \tag{3.10}$$

Je nachdem, welches Funktional ausgewählt wird, werden verschiedene Optimalitätskriterien für die optimale Versuchsplanung eingeführt ([FL13] und [ADT07]):

- A-Optimalität minimiert die Spur der invertierten FIM, d.h. $tr(\mathcal{F}^{-1}(\xi))$, damit die gemittelte Varianz des geschätzten Parametersatzes minimiert wird.
- D-Optimalität minimiert die Determinante der invertierten Informationsmatrix, d.h. $|\mathcal{F}^{-1}(\xi)|$, was das Volumen des Konfidenzellipsoids des geschätzten Parametersatzes minimieren wird.
- E-Optimalität minimiert den größten Eigenwert der invertierten Informationsmatrix $\mathcal{F}^{-1}(\xi)$.

Darüber hinaus existiert eine Gruppe von Optimalitätskriterien, die auf die Minimierung der Varianz der Ausgangsprädiktion abzielen ([Won94]).

- G-Optimalität minimiert das Maximum der Varianz der Ausgangsprädiktion innerhalb des Eingangsbereichs $\mathcal{X}$ von Interesse. Das entsprechende Optimierungsproblem lautet

  $$\xi^* = \arg\min_{\xi} \max_{x \in \mathcal{X}} \hat{f}(x, \hat{\Theta})^T \mathcal{F} \hat{f}(x, \hat{\Theta}) \tag{3.11}$$

  wobei $\hat{f}(x, \hat{\Theta})$ für den prädizierten Ausgang an der Stelle x steht.

- I/V-Optimalität minimiert den Mittelwert bzw. das Integral der Varianz der Ausgangsprädiktion über den gesamten Eingangsbereich $\mathcal{X}$ von Interesse mit folgender Formel:

$$\xi^* = \arg\min_{\xi} \int_{\mathcal{X}} \hat{f}(x, \hat{\Theta})^T \mathcal{F} \hat{f}(x, \hat{\Theta}) \mathrm{d}x \tag{3.12}$$

  In der Praxis wird das Integral auf einem Gitter ausgewertet ([GJ11]).

Es ist weder möglich noch notwendig, hierbei alle Optimalitätskriterien in der Literatur zu nennen, siehe dazu das Review in [SH84] und [Das02].

3.4.2 Optimal Design für ein nichtlineares Modell

Wenn es um die optimale Versuchsplanung für ein nichtlineares Modell geht, das beschrieben wird als

$$\hat{f}(x, \Theta) = g(x, \Theta) \tag{3.13}$$

gilt derselbe Lösungsansatz wie bei der Versuchsplanung mit einem linearen Modell. Genauso wird die FIM wie in Formel (3.8) definiert und für die Approximation der Kovarianzmatrix $\mathrm{cov}(\xi, \hat{\Theta})$ wie in Formel (3.7) eingesetzt. Es wird allerdings problematisch, wenn man versucht, im Fall des nichtlinearen Modells ohne Weiteres mithilfe der Formel (3.9) nach einem optimalen Versuchsplan ξ^* zu suchen, da anders als beim Fall eines linearen Modells die FIM beim nichtlinearen Modell von dem zu schätzenden Parametersatz Θ abhängt ([FL13]). Um dieses Problem zu lösen bzw. zu mildern, werden in der Literatur überwiegend folgende Richtungen vorgeschlagen ([FL13], [DMP04] und [Dea+15]):

- Lokal optimale Versuchsplanung: Mit einem vorgegebenen oder vermuteten Parametersatz $\widetilde{\Theta}$ kann das Problem wie im Fall des linearen Modells gelöst werden ([DMP04]), und zwar als

$$\xi^* = \arg\max_{\xi} \Psi(\mathcal{F}(\xi, \widetilde{\Theta})) \tag{3.14}$$

  Der daraus resultierende Versuchsplan wird als „lokal optimal“ bezeichnet, da dieser Versuchsplan nur in der Nähe des ausgewählten Parametersatzes $\widetilde{\Theta}$ optimal ist ([DMP04]).

- Minimax-Versuchsplan: Dabei wird nach dem Versuchsplan gesucht, der unter einer Menge $\mathcal{P}$ von möglichen Parametersätzen das Maximum des Funktionals $\Psi(\mathcal{F}(\xi, \Theta))$

minimiert [Dea+15]. Das entsprechende Optimierungsproblem kann mit folgender Formel beschrieben werden [Dea+15]:

$$\xi^* = \arg\min_{\xi} \max_{\Theta \in \mathcal{P}} \Psi(\mathcal{F}(\xi, \Theta)) \tag{3.15}$$

In der Tat handelt es sich hierbei um einen robusten Versuchsplan ([PW88]).

- Bayessche optimale Versuchsplanung: In den vorigen zwei Ansätzen wurde eine Art Vorinformation über den Parametersatz eingeführt, um das Problem der Versuchsplanung beim nichtlinearen Modell zu lösen. Wenn die Idee, dem Parametersatz Θ eine a-priori-Verteilung $p(\Theta)$ zuzuweisen, verallgemeinert wird, kommt die bayessche Versuchsplanung mit folgender Formel zustande ([FL13]):

$$\xi^* = \arg\max_{\xi} \int U(\xi, \Theta) p(\Theta) \mathrm{d}\Theta \tag{3.16}$$

  Dabei steht der Term $U(\xi, \Theta)$ für die Nutzungsfunktion, welche die Zielsetzung des Experiments reflektiert. Wenn der Versuchsplan erstellt wird, um die a-posteriori-Verteilung $p(\hat{\Theta}|\boldsymbol{D})$ des Parametersatzes nach der Beobachtung der Messdaten mit hoher Genauigkeit zu schätzen, können folgende Nutzungsfunktionen Anwendung finden ([CV95a]):

  - KL-Divergenz zwischen der a-priori-Verteilung und der a-posteriori-Verteilung des Parametersatzes: Die KL-Divergenz wird durch folgende Formel definiert:

$$D_{\mathrm{KL}}(p(\hat{\Theta}|\boldsymbol{D})||p(\Theta)) = \int_{-\infty}^{+\infty} p(\hat{\Theta}|\boldsymbol{D}) \log \frac{p(\hat{\Theta}|\boldsymbol{D})}{p(\Theta)} \mathrm{d}\Theta \tag{3.17}$$

    Die entsprechende Nutzungsfunktion ist

$$U(\xi, \Theta) = \int \log p(\hat{\Theta}|\boldsymbol{D}) p(\boldsymbol{D}|\xi) \mathrm{d}\boldsymbol{D} \tag{3.18}$$

    wobei $p(\boldsymbol{D}|\xi)$ für die Likelihood nach der Beobachtung der Messdaten steht. Zugleich kann diese Nutzungsfunktion ebenfalls als Erhöhung der *Shannon-Information* über den zu schätzenden Parametersatz angesehen werden ([SW97]). Wenn diese Nutzungsfunktion im Rahmen eines lineares Regressionsmodells mit normalverteiltem Messrauschen verwendet wird, reduziert sich $U(\xi, \Theta)$ auf eine Funktion der Determinante der Designmatrix. Deswegen wird dieser Ansatz als bayessches D-optimal Design bezeichnet.

  - Quadratischer Abstand zwischen den Punktschätzungen des a-priori-Parametersatzes Θ und des a-posteriori-Parametersatzes $\hat{\Theta}$: Die entsprechende Nutzungsfunktion ist ([CV95a])

$$U(\xi, \Theta) = \int (\Theta - \hat{\Theta})^2 p(\boldsymbol{D}|\xi) \mathrm{d}\boldsymbol{D} \tag{3.19}$$

Dieser Ansatz kann als Verallgemeinerung des A-optimal Designs in der frequentistischen Sicht interpretiert werden und wird als bayessches A-optimal Design bezeichnet ([CV95a]).

– Es gibt noch das bayessche Design, das keine explizite Nutzungsfunktion verwendet, z. B. das bayessche E-optimal Design und das bayessche G-optimal Design. Sie teilen die Konzepte der Versuchsplanung und die Namen mit ihren frequentistischen Gegenstücken in Abschnitt 3.4.1.

Das Problem der bayesschen Versuchsplanung in Formel (3.16) kann nur dann exakt gelöst werden, wenn erstens eine bekannte und vernünftige a-priori-Verteilung $p(\Theta)$ des Parametersatzes vorhanden ist und zweitens das Integral in der Formel (3.16) analytisch exakt berechnet werden kann. Allerdings sind die zwei genannten Voraussetzungen normalerweise in der Realität nicht erfüllt. Mittels der sequentiellen Versuchsplanung kann das erste Problem teilweise gelöst werden. Für das zweite Problem können Approximationstechniken hilfreich sein, z. B. Laplace-Approximation, *Variational Inference* und die Samplingstechnik in Abschnitt 2.2.2.

3.5 Sequentielle Versuchsplanung

Anstatt die Hoffnung darauf zu setzen, dass man alle Information über das Untersuchungsobjekt durch ein einziges Experiment zur Verfügung stellen kann, erweist sich die sequentielle Versuchsplanung als ein zweckdienlicherer Ansatz für die Aufgabe, vor allem wenn die Charakteristik des zu ermittelnden Prozesses unbekannt bleibt. Hierbei handelt es sich um eine Art Versuchsplanung, die aus mehreren Iterationen besteht. In jeder Iteration wird versucht, aufgrund der bislang vorhandenen Information, z. B. des geschätzten Parametersatzes oder der abgeleiteten Modellstruktur, den Versuchsplan für die aktuelle Iteration zu erstellen. Dadurch kann das Ziel erreicht werden, die Abhängigkeit des optimalen Versuchsplans ξ^* vom Parametersatz Θ im Fall des nichtlinearen Modells aufzulösen. Außerdem bietet die sequentielle Versuchsplanung auch die Möglichkeit, rechtzeitig aufzuhören. Im Prinzip setzt sich ein sequentieller Versuchsplan aus drei Komponenten zusammen, die durch folgende Arbeitsprozesse miteinander verbunden werden.

- Anfängliche Versuchsplanung: Der sequentielle Versuchsplan fängt mit einem anfänglichen Versuchsplan an, der darauf abzielt, eine vorläufige Übersicht über die Parameter oder den zu approximierenden Prozess zu erlangen. Der dabei eingesetzte Versuchsplan kann aufgrund der Vorinformation, die aus Vorwissen oder Erfahrungen bei anderen, ähnlichen Aktivitäten hervorgegangen ist, erstellt werden. Wenn

keine Vorinformation vorhanden ist, können die in Abschnitt 3.3 dargestellten raumfüllenden Versuchspläne verwendet werden.

- Adaptive Versuchsplanung: In diesem Arbeitsschritt werden die anfänglichen Parameter als wahre Parameter genommen, um den optimalen Versuchsplan in dieser Iteration zu erstellen. Der Versuchsplan in dieser Phase wird als adaptiv bezeichnet, weil sich das geschätzte Modell im Verlauf der gesamten Versuchsplanung ändert. In der Tat lässt sich die sequentielle Versuchsplanung vom Prinzip her auf unkomplizierte Weise mit der bayesschen Versuchsplanung kombinieren. In diesem Fall kann das bisher erzielte Wissen als Vorinformation eingesetzt werden, um den adaptiven Versuchsplan für die aktuelle Iteration zu konstruieren. Durch Einsatz des Satzes von Bayes kann die daraus resultierende a-posteriori-Information als Vorinformation für die nächste Iteration verwendet werden, siehe für weitere Information in [BG16], [EC14], [BT12] und [RS12].

  Die Anzahl der Messpunkte in einem lokal optimalen[14] Versuchsplan, einzelne oder mehrere, ist ein offener Punkt der Forschung und wird in [Set10] behandelt, wobei in der Regel ein Kompromiss zwischen der Effizienz und der Leistungsfähigkeit des adaptiven Versuchsplans getroffen wird. Bei mehreren Messpunkten wird normalerweise von *Batch Sampling* gesprochen ([Har14]). Wegen des eingeschränkten Budgets für den Messaufwand soll der Informationsgehalt jedes Messpunkts bei der Versuchsplanung ans Maximum getrieben werden, weshalb bei unserem Anwendungsfall nur das Verfahren mit Einzelmesspunkt in Frage kommt.

- Stopp-Kriterium: Der Prozess sequentieller Versuchsplanung wird beendet, wenn ein Stopp-Kriterium erfüllt wird. Ein Beispiel eines Stopp-Kriteriums kann die maximale Anzahl von Messpunkten sein, der maximale Zeitaufwand etc. Außerdem können auch raffiniertere Kriterien eingesetzt werden, die auf dem Zustand des Modells basieren, damit ein vollautomatisierter Prozess möglich wird. Dies ist noch ein aktuelles Forschungsthema, siehe [WCZ14], [Vla08] und [ZWH08] für mögliche Ansätze.

[14] Dieser Versuchsplan ist lokal optimal in dem Sinn, dass er in der aktuellen Iteration aufgrund der aktuellen Parameter optimal erstellt wird.

4 Algorithmus für optimierte und automatisierte Applikation

Wie es schon in Abschnitt 1.3 klargemacht wurde, geht es in dieser Arbeit darum, einen Algorithmus zu entwickeln, der ein Netzwerk von *Grey-Box*-Modellen mit möglichst geringem Messaufwand applizieren kann. In den Abschnitten 4.1, 4.2 und 4.3 konzentrieren wir uns zunächst auf die optimale Applikation eines einzelnen *Grey-Box*-Modells, was als Basis der weiteren Entwicklungsaktivitäten dienen soll. Daraufhin beschäftigt sich Abschnitt 4.4 mit der Applikation eines Netzwerks von *Grey-Box*-Modellen. Zu beachten ist, dass es sich in diesem Kapitel lediglich um eine theoretische und abstrakte Darstellung des entwickelten Algorithmus handelt. Die konkreten Anwendungsfälle werden in Kapitel 5 dargestellt.

4.1 Optimale Applikation eines einzelnen *Grey-Box*-Modells

In diesem Abschnitt wird in die grundlegende Problemstellung eingeführt und werden mögliche Lösungsansätze diskutiert. Als Zielsetzung versuchen wir, ein einzelnes *Grey-Box*-Modell automatisch und mit möglichst geringem Messaufwand zu applizieren. Wie sich in Abbildung 4.1 zeigt, besteht das zu applizierende *Grey-Box*-Modell normalerweise aus physikalischen Gleichungen $y = f(\boldsymbol{x}, A, \boldsymbol{Q})$ mit ihrem Eingangsvektor $\boldsymbol{x}$ und einem empirischen Modell $A = \mathrm{EM}(\mathbf{u})$ mit seinem Eingangsvektor $\mathbf{u}$. Ein *Grey-Box*-Modell lässt sich dann darstellen als

$$\begin{aligned} y &= f(\boldsymbol{x}, A, \boldsymbol{Q}) \\ A &= \mathrm{EM}(\mathbf{u}) \end{aligned} \tag{4.1}$$

wobei die Terme y und A jeweils für den Ausgang der physikalischen Gleichung f und des empirischen Modells EM stehen. Der Term $\boldsymbol{Q}$ ist die Menge der Umgebungsgrößen. Das empirische Modell wird verwendet, um den physikalisch schwer abbildbaren Zusammenhang zwischen Eingangsvektor $\mathbf{u}$ und Ausgang A zu beschreiben. In dieser Arbeit ist, wenn von der Applikation eines *Grey-Box*-Modells die Rede ist, die Ermittlung und die Approximation des dazugehörigen empirischen Modells durch Experimente gemeint. Zu beachten ist, dass es in der vorliegenden Abhandlung lediglich um empirische Modelle mit einem ein- bis zweidimensionalen[15] Eingangsvektor geht. Wenn das empirische Modell ein skalarer Parameter ist, reduziert sich das Problem auf das klassische Problem der Parameteridentifikation.

Um das empirische Modell zu ermitteln, werden durch Variation des Eingangsvektors $\mathbf{u}$ Messdaten $\boldsymbol{D}_{\mathrm{Sen}}$ (Beobachtungsmesspunkte) gesammelt, die alle messbare Größen in der

[15] Die Dimension in der ECU-Funktionsapplikation liegt normalerweise bei eins oder zwei. Bei Aufgaben wie der Motorapplikation kann ein Problem mit mehr Dimensionen vorkommen.

physikalischen Gleichung f und den entsprechenden Eingangsvektor $\mathbf{u}$ beinhalten, und zwar gilt $\boldsymbol{D}_{\text{Sen}} = \{\boldsymbol{x}_i, y_i, \boldsymbol{Q}_i, \mathbf{u}_i | i \in \{1 \ldots N\}\}$, wobei N für die Anzahl der Experimente steht. Mittels der physikalischen Gleichung $y = f(\boldsymbol{x}, A, \boldsymbol{Q})$ kann der Ausgang des empirischen Modells MP_i, normalerweise ein Applikationsparameter, berechnet werden. Parallel lässt sich die Unsicherheit $\sigma^2_{\text{MP}_\text{i}}$ davon mithilfe der Toleranzen $\sigma^2_{x_i}$ und $\sigma^2_{y_i}$ der Sensoren für die Messgrößen $\boldsymbol{x}$ und y durch die Regel der Fehlerfortpflanzung ([Cli73]) berechnen. Zu beachten ist, wenn es sich dabei um eine nichtlineare Gleichung handelt, dass die Gleichung f an dem entsprechenden Arbeitspunkt, der durch $\boldsymbol{x}$ und y repräsentiert wird, linearisiert werden muss, bevor die Berechnung der Fehlerfortpflanzung ausgeführt wird, siehe [OB06] für mehr Information. So wird mit einem Experiment ein Applikationsmesspunkt für das empirische Modell $D_{\text{App,i}} = [\mathbf{u}_i, \text{MP}_\text{i}, \sigma^2_{\text{MP}}]$ erzeugt. Der Applikationsmesspunkt ist die Basis der ECU-Funktionsapplikation und wird eingesetzt, um den gesuchten empirischen Zusammenhang $A = \text{EM}(\mathbf{u})$ zu ermitteln. Der Signalfluss, der die Berechnung eines $D_{\text{App,i}}$ aufgrund eines Beobachtungsmesspunkts $D_{\text{Sen,i}}$ beschreibt, wird in Abbildung 4.1 gezeigt.

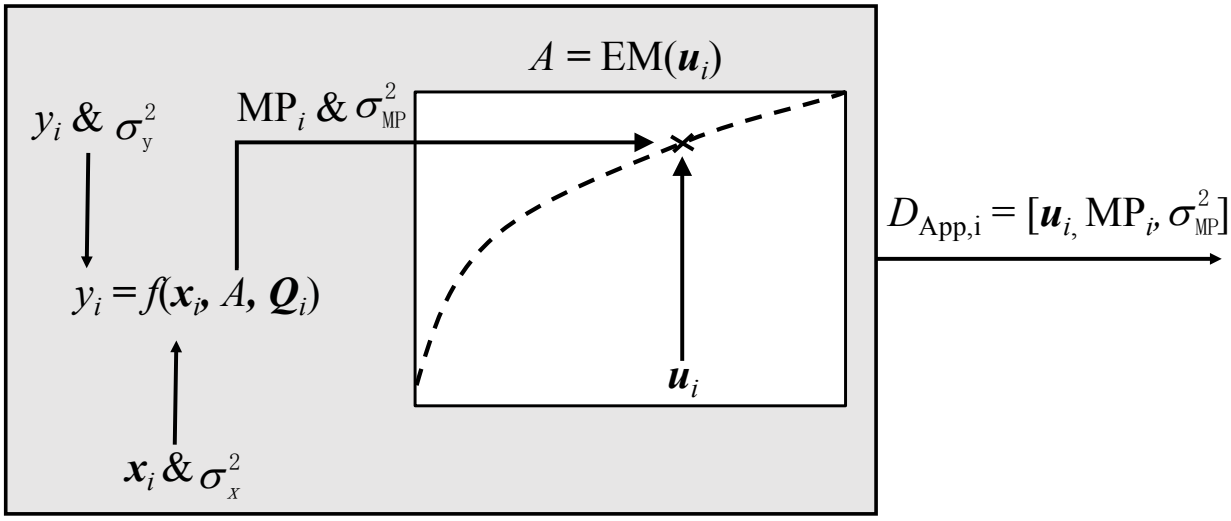


Abbildung 4.1: Signalfluss für die Generierung eines Applikationsmesspunkts für die Applikation des empirischen Modells $A = \text{EM}(\mathbf{u})$; es wird dabei sowohl der Wert des Applikationsparameters MP_i als auch die Unsicherheit $\sigma^2_{\text{MP}_\text{i}}$ des Applikationsparameters berechnet.

Im weiteren Verlauf der Arbeit wird der Prozess der Generierung eines Applikationsmesspunkts im Rahmen eines *Grey-Box*-Modells durch folgende Formel beschrieben:

$$y = f(\boldsymbol{x}, A, \boldsymbol{Q}) \rightarrow \text{EM}(\mathbf{u}) \tag{4.2}$$

Dieser Abschnitt zielt darauf ab, das empirische Modell $A = \text{EM}(\mathbf{u})$ eines *Grey-Box*-Modells durch Messdaten aus Experimenten zu identifizieren, und zwar automatisch und mit mög-

lichst geringem Messaufwand. Anders formuliert, wird nach einem optimalen Versuchsplan $\boldsymbol{U}^*$ gesucht, der die Informationsgehalte der gesammelten Applikationsmesspunkte für die Applikation des empirischen Modells maximieren kann. Unter dieser Rahmenbedingung lässt sich das zu lösende Optimierungsproblem mathematisch wie folgt darstellen

$$\boldsymbol{U}^* = \arg\max_{\boldsymbol{U}} \mathrm{IG}(\boldsymbol{U}) \tag{4.3}$$

wobei $\boldsymbol{U} = [u_1, u_1, u_1, \cdots, u_N]$ der Versuchsplan für das Experiment ist. Der Term $\mathrm{IG}(\boldsymbol{U})$ steht für den Informationsgehalt des Versuchsplans für die Applikation des entsprechenden *Grey-Box*-Modells. Die Funktion $\mathrm{IG}(\boldsymbol{U})$, die dem Versuchsplan seinen Informationsgehalt zuordnet, stellt den wichtigsten Bestandteil des Algorithmus dar und muss klar definiert werden. Wie bereits in Abschnitt 3.4 erwähnt wurde, hängt der Informationsgehalt eines Versuchsplans bzw. eines Messpunkts sehr stark vom eingesetzten Regressionsmodell ab. Um auf eine geeignete Informationsfunktion zu kommen, soll infolgedessen ein zielführendes Regressionsmodell festgelegt werden, bevor ein Versuchsplan dazu erstellt wird. Die Lösung des Optimierungsproblems in Formel (4.3) gliedert sich im Prinzip in zwei Bestandteile:

- Ein Regressionsmodell für die Approximation des unbekannten und physikalisch schwer abbildbaren Zusammenhangs im empirischen Modell. Dafür wird in Abschnitt 4.2 ein Gaußprozessmodell entwickelt, das die in dem Zusammenhang gegebenenfalls auftretende Nichtstationarität erkennen und beherrschen kann.
- Ein Versuchsplan, der das Experiment so gestaltet, dass die Applikation automatisch und mit möglichst geringem Messaufwand erfolgen kann. Dazu wird in Abschnitt 4.3 eine Hybride Abtaststrategie konzipiert, die sowohl die Abdeckung des Versuchsraums als auch die Ermittlung der Regionen von Interessen[16] berücksichtigt. Außerdem wird in Abschnitt 4.3.3 ein Stopp-Kriterium für den automatischen Abbruch des Vermessungsvorgangs entwickelt.

4.2 Nichtstationäres Gaußprozessmodell

Bei der Modellbildung mit dem Gaußprozessmodell gehört unter anderem die Stationarität zu den standardmäßigen Annahmen. Allerdings ist ein stationäres Gaußprozessmodell in vielen Situationen nicht in der Lage, der räumlich stark variierenden Charakteristik des zu untersuchenden Prozesses gerecht zu werden, wie in Abschnitt 2.4.1 aufgezeigt wurde. Ein typisches Beispiel ist die Approximation einer Funktion wie in Abbildung 4.2, die durch starkes nichtlineares Verhalten in einer Region und ruhigen Verlauf in einer anderen Region gekennzeichnet ist. Während der Applikation der ECU-Funktion kann es durchaus

[16] Was Region von Interessen hierbei bedeutet, wird in Abschnitt 4.3.2 erklärt.

vorkommen, dass der zu applizierende Zusammenhang so komplex ist, dass eine Stationaritätsannahme nicht zulässig ist, um die Realität zu modellieren. Deshalb soll das in der vorliegenden Arbeit eingesetzte Regressionsmodell so ausgelegt werden, dass es mit Nichtstationarität im Prozess umgehen kann.

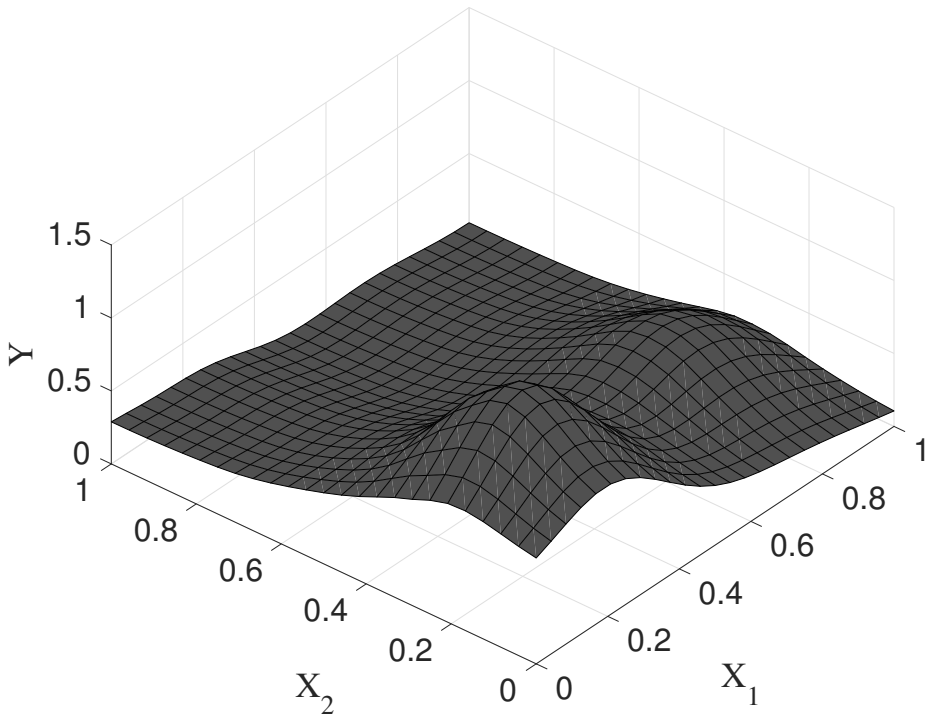


Abbildung 4.2: Eine typische Funktion mit räumlich variierenden Eigenschaften.

Zunächst wird in Abschnitt 4.2.1 eine Definition eines stationären Gaußprozessmodells geliefert. Anschließend wird in Abschnitt 4.2.2 eine Übersicht über die in der Literatur vorgeschlagenen Ansätze für die Konstruktion von Nichtstationarität im Gaußprozessmodell zur Verfügung gestellt. Zugleich werden die erwähnten Methoden einander gegenübergestellt und bewertet. Daraufhin wird in Abschnitt 4.2.3 ein neuer Ansatz vorgestellt, der für unseren Anwendungsfall am besten passt. Zuletzt wird in Abschnitt 4.2.4 die Leistungsfähigkeit des neu entwickelten Ansatzes durch simulative Experimente validiert.

4.2.1 Stationäres Gaußprozessmodell

Nach der Definition in [RW06] fällt ein Gaußprozess $\mathcal{GP}(m(x), k(x, x'))$, der auf einem räumlichen Feld definiert wird, in die Kategorie stationärer[17] stochastischer Prozesse, wenn folgende Bedingungen erfüllt werden ([Jaz07]):

[17] In diesem Fall handelt es sich um einen schwach stationären stochastischen Prozess. Siehe [Gil06] für weitere Information zu den Unterschieden zwischen schwach und stark stationärem stochastischem Prozess.

- Der Erwartungswert des Gaußprozesses bleibt konstant innerhalb des gesamten Eingangsraums, und zwar gilt $E(x) = \mu$ für alle $x \in \mathcal{X}$, wobei $\mathcal{X}$ und μ jeweils für das räumliche Feld und den Mittelwert des stochastischen Prozesses stehen.
- Die Varianz ist endlich.
- Die Kovarianz $k(x, x')$ zwischen zwei Positionen im räumlichen Feld hängt nicht von der absoluten Positionen der zwei Positionen x und x' ab, sondern nur vom relativen Abstand $|x - x'|$[18] zwischen den beiden Positionen. Mathematisch kann diese Eigenschaft beschrieben werden als

$$k(x, x') = k(x + v, x' + v) \tag{4.4}$$

  wobei v für eine beliebige Verschiebung des Eingangs steht. Außerdem muss beachtet werden, dass die Richtung bei der Berechnung der Kovarianz auch keine Rolle spielen darf, d. h. es gilt: $k(x, x') = k(x', x)$.

4.2.2 Konstruktion eines nichtstationären Gaußprozessmodells

Die Konstruktion eines nichtstationären Gaußprozessmodells erfolgt durch die Verletzung der oben aufgelisteten Bedingungen. Wenn man beispielsweise bei der GPR statt einer Null-Mittelwertfunktion eine lineare Mittelwertfunktion wie etwa $m(x) = ax + b$ benutzt, wird die erste Bedingung verletzt, und dadurch entsteht ein nichtstationäres Gaußprozessmodell ([Mor80]). In der vorliegenden Arbeit konzentrieren wir uns auf die Erzeugung der Nichtstationarität durch die Anpassung der Kovarianzfunktion, d. h. die Verletzung der dritten Bedingung. In diesem Abschnitt werden zuerst die verwandten Arbeiten vorgestellt.

Kernglättung

Dies ist der erste Ansatz, mit dem man dem Gaußprozess Nichtstationarität geben kann. Im Wesentlichen wird der gesamte Eingangsraum in mehrere kleine Unterräume aufgeteilt, und in jedem Unterraum wird mittels der dazugehörigen Messpunkte eine stationäre Kovarianzfunktion gelernt ([Fue01]). Eine grundlegende Voraussetzung ist, dass die lokale stationäre Kovarianzfunktion ausreicht, um die entsprechenden lokalen Regionen darzustellen. Die nichtstationäre Kovarianzfunktion wird dann durch Zusammenbauen der stationären Kovarianzfunktionen aus den Unterräumen produziert, und zwar mit Gewichtung und Glättung ([Fue01]). In [FS01] wird die Summierung der gewichteten stationären Kovarianzfunktionen durch Integration realisiert. Ein verbreiteter Einsatz der Kernglättung wird durch die Notwendigkeit der Einführung des MCMC-Verfahrens für das Modelltraining beschränkt ([DF10]).

[18] Die Definition des Abstands zwischen verschiedenen Positionen kann variieren, siehe [BD13] für weitere Verweise.

Modellglättung

Dieser Ansatz verfolgt die Idee der Unterteilung des Eingangsraums. Allerdings wird hierbei statt der Kovarianzfunktion das Gaußprozessmodell selbst aus mehreren lokalen Gaußprozessmodellen (*Mixtures of Local Experts*) zusammengebaut ([PKR06]). Durch ein sogenanntes *Gating Network* wird die lokale Region dem Gaußprozessmodell zugewiesen. Ähnliche Ansätze werden auch in der Geographie eingesetzt, siehe [AL07]. Während dieser Ansatz bezüglich der Struktur und der Interpretierbarkeit einfach ist, erweist sich das Modellverhalten beim Übergang zwischen den lokalen Gaußprozessmodellen als problematisch.

Kernkonvolution

In [HSK99] wird dieser Ansatz eingeführt, um aus einer stationären Kovarianzfunktion eine nichtstationäre Kovarianzfunktion zu konstruieren. In [HSK99] wird vorgeschlagen, eine nichtstationäre Kovarianzfunktion $k_{\mathrm{NS}}(x_i, x_j)$ zwischen x_i und x_j[19] mit Konvolution der Kerne zu erstellen als

$$k_{\mathrm{NS}}(x_i, x_j) = \int_{\mathbb{R}} k_{x_i}(u) k_{x_j}(u) \mathrm{d}u \tag{4.5}$$

wobei x_i, x_j und u Positionen im Eingangsraum sind und $k_{x_i}(\cdot)$ für eine Kernfunktion steht, die im Punkt x_i zentriert. Die Kernfunktion kann verschiedene Formen annehmen, z. B. Gaußfunktion [HSK99] und Matérn-Kovarianzfunktion, die eine größere Flexibilität erlaubt [PS04]. Während die Methode der Kernkonvolution eine allgemeine und flexible Rahmenbedingung für die Erzeugung von Nichtstationarität in GPR darstellt, wird die praktische Anwendung von der anspruchsvollen Anforderung an die Rechenleistung stark limitiert ([PKB08]).

Nichtlineare Verformung des Eingangsraums

Bei diesem Ansatz handelt es sich im Prinzip darum, den Eingangsraum eines nichtstationären Prozesses so zu verzerren, dass der resultierende Prozess wieder unter der Annahme der Stationarität mit ausreichend guter Genauigkeit modelliert werden kann. In Abbildung 4.3 wird die Funktionsweise dieses Ansatzes schematisch dargestellt.

Die Idee, durch Verformung des Eingangsraums die Nichtstationarität beim realen Anwendungsfall zu behandeln, geht auf die Arbeiten von [Gib98] und [DSG01] zurück. In [Xio+07] wird die von [Gib98] entwickelte Methode modifiziert und vereinfacht, um den Rechenaufwand zu reduzieren. Die Methode in [Xio+07] zeichnet sich durch Interpretierbarkeit und einen geringen Rechenaufwand aus und gilt als Basis für das in dieser Abhandlung eingesetzte Regressionsmodell.

[19] Hier wird lediglich der eindimensionale Fall dargestellt, allerdings gilt das Prinzip auch für multidimensionale Probleme.

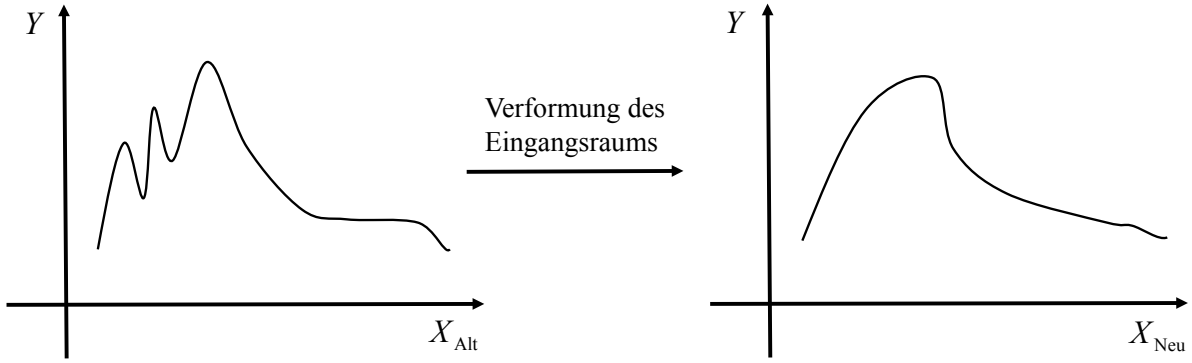


Abbildung 4.3: Transformation des Koordinatensystems durch Raumverformung; nach der Verformung wird die Glattheit der Funktion offensichtlich gleichmäßiger, was die Modellierung mit der stationären GPR wieder ermöglicht.

4.2.3 Neuartiges Gaußprozessmodell mit nichtstationärer Kovarianzfunktion

In diesem Abschnitt wird zuerst der Ansatz für die Erzeugung von Nichtstationarität bei GPR in [Xio+07] dargestellt. Darauf folgen die Erweiterung und die Modifikation des Ansatzes, um unseren Anforderungen gerecht zu werden.

Xiongs Ansatz

Für die Konvertierung des alten Koordinatensystems ins neue Koordinatensystem werden in [Xio+07] auf dem Eingangsraum $M+1$ Stützpunkte $\mathbf{s} = [s_0, s_1, s_2, s_3, \cdots, s_M]$[20] für die Erzeugung von M Subräumen festgelegt. Basierend darauf wird eine sogenannte Dichtefunktion $d(x)$ definiert. Die Dichtefunktion wird eingesetzt, um die Glattheit der Nachbarschaft des entsprechenden Stützpunkts zu beschreiben. Ein hoher Wert der Dichtefunktion signalisiert, dass das Modellverhalten im entsprechenden Bereich starke Nichtlinearität besitzt. Ein niedriger Wert deutet auf ein ruhiges Modellverhalten hin. Zwischen den Stützpunkten werden die Werte der Dichtefunktion einfach durch lineare Interpolation berechnet. Zusammengefasst kann basierend auf den vordefinierten Stützpunkten $\mathbf{s}$ als Parameter die Dichtefunktion $d(x)$ im alten Koordinatensystem mit M Subräumen wie folgt formuliert werden:

$$d(x) = \sum_{i=1}^{M} d_i(x, a_i, b_i) \tag{4.6}$$

Die Formel (4.6) beschreibt die Darstellung der Dichtefunktion $d(x)$ durch die Summierung der Teildichtefunktionen $d_i(x, a_i, b_i)$. Die zusätzlichen Parameter a_i und b_i sind die Funktionswerte der Dichtefunktion an den Stützpunkten, die um den Eingang x herum liegen. In Abbildung 4.4 wird die Dichtefunktion dargestellt.

[20] Hier wird nochmals nur der eindimensionale Fall dargestellt, jedoch gilt das Prinzip auch für multidimensionale Probleme.

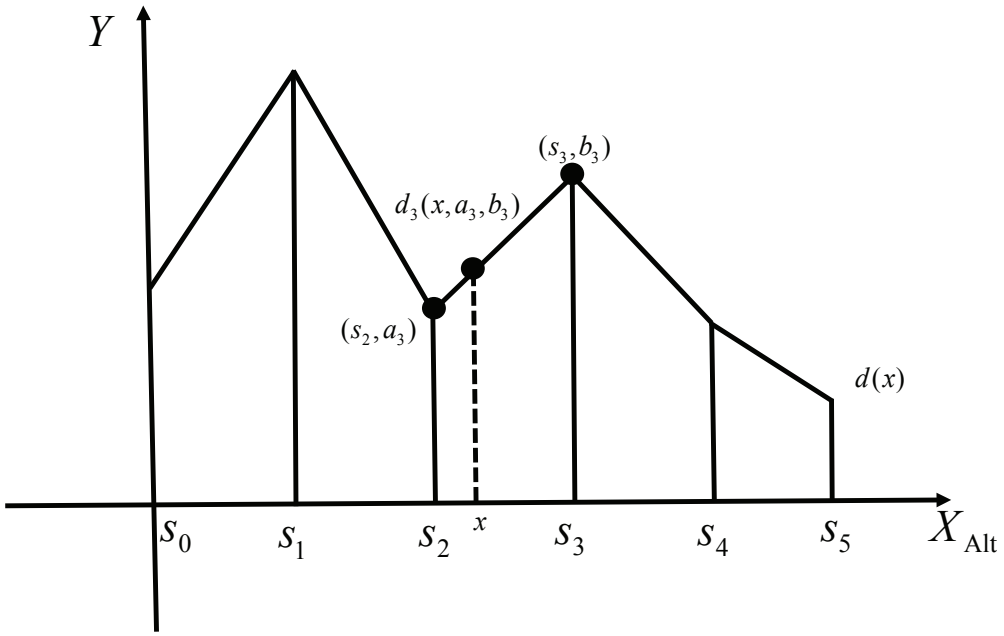


Abbildung 4.4: Funktionswert $d(x)$ der Dichtefunktion an der Stelle x; die dargestellte Teildichtefunktion $d_3(x, a_3, b_3)$ wird zwischen den Stützpunkten s_2 und s_3 definiert; außerhalb des Definitionsbereichs gilt $d_3(x, a_3, b_3) = 0$.

Wie Abbildung 4.4 zeigt, wird die Teildichtefunktion $d_3(x, a_3, b_3)$ innerhalb des Subraums $x \in [s_2, s_3]$ definiert und ist eine lineare Funktion mit den zwei Endpunkten (s_2, a_3) und (s_3, b_3), d. h. außerhalb des Subraums ist der Funktionswert null. Somit lässt sich die Teildichtefunktion durch folgende Formel darstellen:

$$d_i(x, a_i, b_i) = \begin{cases} \frac{b_i - a_i}{s_i - s_{i-1}} x + a_i, & x \in [s_{i-1}, s_i] \\ 0, & x \notin [s_{i-1}, s_i] \end{cases} \tag{4.7}$$

Aufgrund der Dichtefunktion $d(x)$ kann die Transformationsfunktion $t(x)$, die den alten Eingangsraum X_{alt} auf den neuen Eingangsraum $X_{\text{neu}} = t(X_{\text{alt}})$ abbildet, durch Integration erzeugt werden

$$t(x) = \int_{s_0}^{x} d(x) \mathrm{d}x \tag{4.8}$$

wobei s_0 der erste Stützpunkt und in der Regel auch der Anfangspunkt des Eingangsraums ist. Aus Formel (4.8) ist ersichtlich, dass der Wert $t(x)$ der Transformationsfunktion an der Stelle x also durch die Integration der Dichtefunktion vom Anfang des Eingangsraums bis zu der gewünschten Stelle berechnet wird. Die Berechnung ist wegen der stückweise linearen Struktur der Dichtefunktion relativ trivial. In Abbildung 4.5 wird die Konstruktion der Transformation $t(x)$ aus der Dichtefunktion $d(x)$ verdeutlicht.

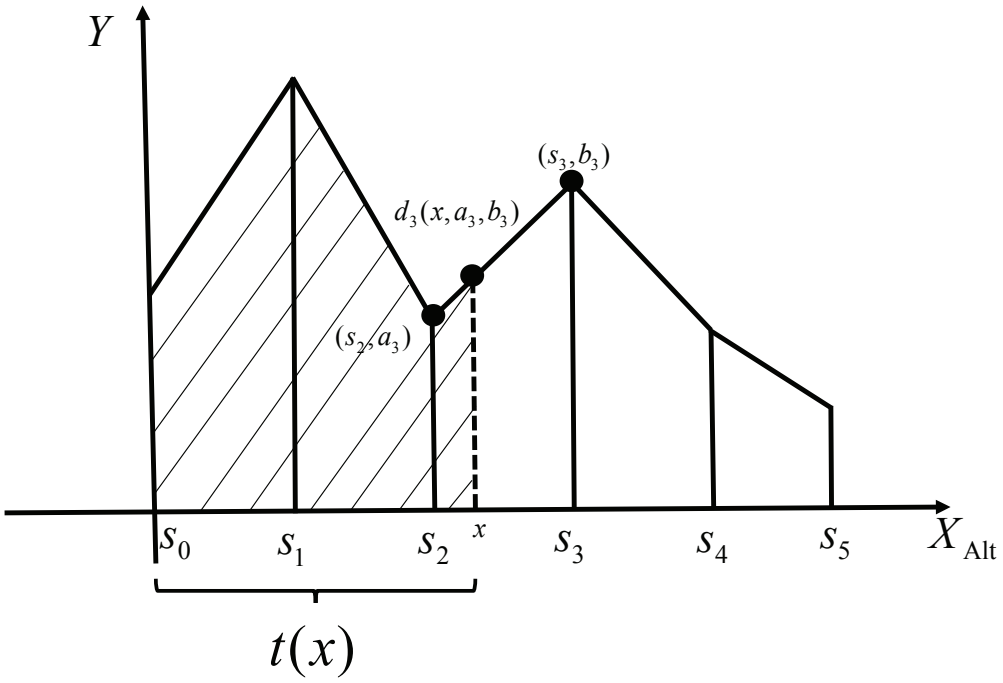


Abbildung 4.5: Funktionswert $t(x)$ der Transformationsfunktion an der Stelle x; der Wert der Transformationsfunktion wird in der Abbildung durch die schraffierte Fläche dargestellt.

Mit der Transformationsfunktion lassen sich die Messpunkte im neuen Koordinatensystem schnell umrechnen. Außerdem führt die Transformation des Eingangsraums auch zu einer neuen Kovarianzmatrix; wenn ebenfalls die klassische SE-Kovarianzfunktion wie in Formel (2.53) verwendet wird, ergibt sich die neue nichtstationäre Kovarianzfunktion $k_{\text{NS}}(x, x')$ zu

$$k_{\text{NS}}(x, x') = \sigma_f \exp\left(\frac{||t(x) - t(x')||^2}{-2l^2}\right) \tag{4.9}$$

wobei der Term $t(x)$ für die Position x im neuen Eingangsraum steht.

Treed Gaussian Process Model with Nonstationary Covariance Function (TGPRNS)

Der Ansatz in [Xio+07] zeichnet sich durch eine einfache Implementierung und die Fähigkeit aus, mit der Nichtstationarität im Prozess umgehen zu können. Allerdings kommen diese Vorteile erst zustande, wenn die Partitionierung des Eingangsraums vernünftig behandelt wird, was bei Xiongs Ansatz fehlt. Dabei wird der Eingangsraum direkt in Subräume gleicher Größe unterteilt. Um eine intelligente Partitionierung des Eingangsraums zu realisieren, die sich automatisch an die Eigenschaft des Zusammenhangs anpassen kann, wird in dieser Arbeit Xiongs Ansatz um das Partitionsverfahren aus LOLIMOT in [Nel97] erweitert. Der daraus resultierende Ansatz wird in dieser Abhandlung als *Treed Gaussian Process Model with Nonstationary Covariance Function* (TGPRNS) bezeichnet. Die Partitionierung des Eingangsraums erfolgt durch die Beantwortung folgender zwei Fragen:

- In wie viele Subräume soll der gesamte Eingangsraum partitioniert werden?

  Hierbei geht es um die Bestimmung der Anzahl M der Subräume. Einerseits ist es selbstverständlich, dass je mehr Subräume erzeugt werden, umso mehr Freiheitsgrade entstehen, damit die Nichtstationarität aus dem alten Koordinatensystem im neuen Koordinatensystem untergebracht werden kann. Allerdings kann andererseits ein zu hoch gewähltes M die Wahrscheinlichkeit von *Overfitting* erhöhen, da das Minimierungsproblem in Formel (4.12) im Fall von zu vielen unabhängigen Variablen sehr leicht in einem lokalen Optimum steckenbleibt. Zuletzt wird ein hohes M immer zu einem erhöhten Rechenaufwand führen.

- Wo sollen die Stützpunkte $\mathbf{s}$ bezogen auf den Eingangsraum liegen?

  Durch die Einführung der Dichtefunktion soll eine äquidistante Verteilung der Stützpunkte ausreichen, um eine gemäßigte Nichtstationarität im Prozess zu neutralisieren, wie es in Xiongs Ansatz gemacht wird. Wenn es jedoch um die Approximation eines stark räumlich variierenden Zusammenhangs geht, soll eine inhomogene Verteilung der Stützpunkte aufgrund der lokalen Charakteristik für eine bessere Modellgenauigkeit sorgen. Und zwar sollen im Rahmen einer begrenzten Anzahl von Stützpunkten in Regionen starker Nichtlinearität mehr Stützpunkte platziert werden als in Regionen mit ruhigem Modellverhalten.

In der Praxis soll die Partitionierung des Eingangsraums vor der Bestimmung des Hyperparametersatzes $\mathcal{H}_{\mathrm{NS}}$, z. B. die l und σ_f in der Kovarianzfunktion, durchgeführt werden. D.h. die Festlegung der Anzahl M der Subräume und der Verteilung der Stützpunkte $\mathbf{s}$ liegt eine Ebene höher in der Struktur des Modelltrainings als $\mathcal{H}_{\mathrm{NS}}$. Im Prinzip benutzt TGPRNS das Partitionierungsverfahren aus LOLIMOT, um die Anzahl und die Verteilung der Stützpunkte auf dem Eingangsraum automatisch und adaptiv aufgrund des Modellverhaltens zu bestimmen. Dessen Arbeitsprozess lässt sich in folgenden Schritten beschreiben.

- Partitionierung des Eingangsraums

  Zunächst wird das Partitionierungsverfahren aus LOLIMOT eingesetzt, das bereits in Abschnitt 2.3.5 durch Abbildung 2.10 geschildert wurde, um den Eingangsraum aufzuteilen. Dabei wird versucht, die Messdaten durch ein lokales lineares Modell zu interpretieren. Die Fehler zwischen den gefitteten lokalen Modellen und den dazugehörigen Messdaten werden als das Maß der Komplexität des lokalen Modellverhaltens betrachtet. Wenn ein komplexer Subraum entdeckt wird, wird er in zwei kleinere Subräume unterteilt. Das Verfahren setzt sich fort, bis eine vordefinierte Fehlergrenze erreicht wird.

In TGPRNS wird das Ergebnis der Partition nicht direkt, sondern nach Modifikation verwendet. Für die Modifikation werden die Partitionslinien aus allen Schnittpunkten in jeder Dimension verlängert, bis sie sich mit den entsprechenden Achsen schneiden. Die Schnittpunkte der verlängerten Partitionslinien und der Achsen werden als Stützpunkte der Dichtefunktion für die Verformung des Eingangsraums benutzt. In Abbildung 4.6 wird die Modifikation beispielhaft dargestellt.

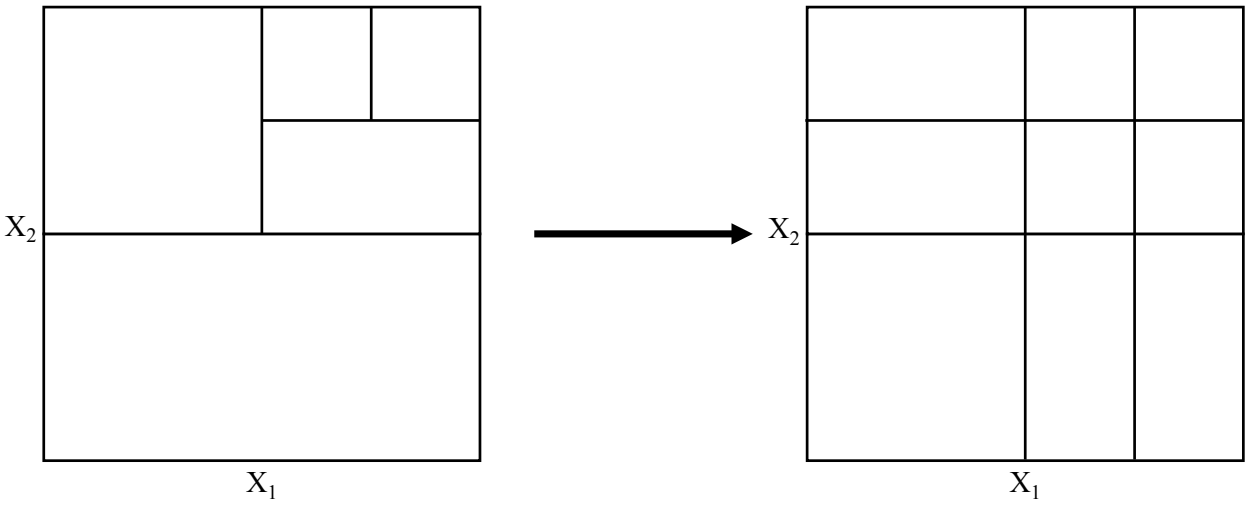


Abbildung 4.6: Modifikation der Partition; auf der linken Seite ist die Partition aus LOLIMOT zu sehen; auf der rechten Seite wird die Partition nach der Modifikation aufgezeigt.

- Modelltraining

Während die Verformung des Eingangsraums dem Gaußprozessmodell erlaubt, die Nichtstationarität in einem Zusammenhang modellieren zu können, bringt diese Methode weitere Freiheitsgrade bzw. Hyperparameter beim Modelltraining, z. B. die Funktionswerte $\boldsymbol{c} = [a_1, a_2, a_3, \cdots, a_M] \cup [b_1, b_2, b_3, \cdots, b_M]$ der Dichtefunktion. Dadurch ergibt sich der zu schätzende Hyperparametersatz zu $\mathcal{H}_{\mathrm{NS}} = [\sigma_f, l, \boldsymbol{c}]$. Nachdem die Stützpunkte festgelegt wurden, kann anschließend $\mathcal{H}_{\mathrm{NS}}$ wie beim Modelltraining des stationären Gaußprozessmodells durch die Maximierung der *Log Marginal Likelihood* in Formel (2.59) gelernt werden. Allerdings wird die stationäre Kovarianzmatrix $K(\mathbf{x}, \mathbf{x})$ durch die nichtstationäre Kovarianzmatrix $K_{\mathrm{NS}}(\mathbf{x}, \mathbf{x})$ ersetzt:

$$K_{\mathrm{NS}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = K(t(\mathbf{x}), t(\mathbf{x})) \tag{4.10}$$

Wenn die Varianzen der Messpunkte geschätzt werden, ergibt sich die Kovarianzmatrix zu $K_{\mathbf{y},\mathrm{NS}} = K_{\mathrm{NS}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}) + \mathbf{V}$, wobei $\mathbf{V}$ die Diagonalmatrix ist, die durch die Menge der geschätzten Varianzen folgendermaßen gebildet wird:

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \sigma_i^2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \sigma_N^2 \end{pmatrix} \tag{4.11}$$

Der Term σ_i^2 steht für die geschätzte Varianz des i-ten Messpunkts. Dadurch ergibt sich die *Log Marginal Likelihood* zu

$$\log p(\mathbf{y}|\mathcal{H}_{\mathrm{NS}}) = -\frac{1}{2}\mathbf{y}K_{\mathbf{y},\mathrm{NS}}^{-1}\mathbf{y} - \frac{1}{2}\log|K_{\mathbf{y},\mathrm{NS}}| - \frac{N}{2}\log(2\pi) \tag{4.12}$$

wobei $K_{\mathbf{y},\mathrm{NS}} = K_{\mathrm{NS}}(\mathbf{x},\mathbf{x}) + \mathbf{V}$ und $K_{\mathrm{NS}}(\mathbf{x},\mathbf{x})$ die identische Struktur wie $K(\mathbf{x},\mathbf{x})$ in Formel (2.55) besitzen. Bei der Maximierung der Formel (4.12) kommt die Methode der *Multilevel Coordinate Search* in [HN99] für globale Optimierung zum Einsatz. Nachdem der Hyperparametersatz $\mathcal{H}_{\mathrm{NS}}$ gelernt wurde, kann man damit den Modellausgang und dessen Varianz an beliebigen Stellen prädizieren, und zwar mittels der Formeln (2.57) und (2.58). Im Rahmen des neuen Koordinatensystems lassen sich die Berechnungen an der Stelle x^* folgendermaßen umformulieren:

$$\mathrm{m}(x^*) = K_{\mathrm{NS}}(x^*,\mathbf{x})[K_{\mathrm{NS}}(\mathbf{x},\mathbf{x}) + \sigma_n^2\mathbf{I}]^{-1}\mathbf{y} \tag{4.13}$$

$$\mathrm{cov}(x^*) = K_{\mathrm{NS}}(x^*,x^*) - K_{\mathrm{NS}}(x^*,\mathbf{x})[K_{\mathrm{NS}}(\mathbf{x},\mathbf{x}) + \sigma_n^2\mathbf{I}]^{-1}K_{\mathrm{NS}}(\mathbf{x},x^*) \tag{4.14}$$

4.2.4 Simulative Experimente mit synthetischen Daten

Nachdem die Modellstruktur und die Methode für das Modelltraining von TGPRNS in Abschnitt 4.2.2 vorgestellt wurden, wird in diesem Abschnitt versucht, die Leistungsfähigkeit von TGPRNS im Vergleich mit Xiongs Ansatz für eine globale Approximation zu testen.

Vorgehensweise des Experiments

Die Vorgehensweise für das Testen kann durch folgende Schritte zusammengefasst werden:

1. Mittels der analytisch bekannten Testfunktion $m(x)$ werden Funktionswerte $m(\mathcal{X}_{\mathrm{Ori}})$ auf dem vordefinierten Gitter $\mathcal{X}_{\mathrm{Ori}}$ im Eingangsraum berechnet, die als Wahrheit und Basis für die Fehlerberechnung betrachtet werden.

2. Auf einem anderen vordefinierten Gitter $\mathcal{X}_{\text{Mess}}$[21] im Eingangsraum werden gleichfalls die Funktionswerte $m(\mathcal{X}_{\text{Mess}})$ berechnet. Anschließend kann mithilfe des Matlab-Befehls *randn* normalverteiltes Messrauschen generiert und auf die Elemente in $m(\mathcal{X}_{\text{Mess}})$ addiert werden. Dadurch werden die verrauschten Messdaten künstlich generiert.

3. Aufgrund der künstlichen Messdaten wird ein statistisches Modell $\hat{f}(x)$ jeweils durch die zwei Ansätze TGPRNS und Xiongs Ansatz gelernt. Anschließend wird $\hat{f}(x)$ eingesetzt, um die geschätzten Modellwerte $\hat{f}(\mathcal{X}_{\text{Ori}})$ auf dem Gitter $\mathcal{X}_{\text{Ori}}$ zu berechnen. Zum Schluss wird die Modellgenauigkeit des gewählten Ansatzes durch den Vergleich zwischen $\hat{f}(\mathcal{X}_{\text{Ori}})$ und $m(\mathcal{X}_{\text{Ori}})$ durchgeführt. Hierbei wird als die Fehlermetrik der gemittelte Quadratfehler MSE benutzt, der durch folgende Formel definiert ist:

$$\text{MSE} = \text{mean}(\hat{f}(\mathcal{X}_{\text{Ori}}) - m(\mathcal{X}_{\text{Ori}}))(\hat{f}(\mathcal{X}_{\text{Ori}}) - m(\mathcal{X}_{\text{Ori}}))^T \tag{4.15}$$

4. Für jede Testfunktion werden die Schritte 1 bis 3 mehrfach durchgeführt, damit das Ergebnis MSE robuster gegen die Zufälligkeit bei der Generierung von künstlichen Messdaten wird.

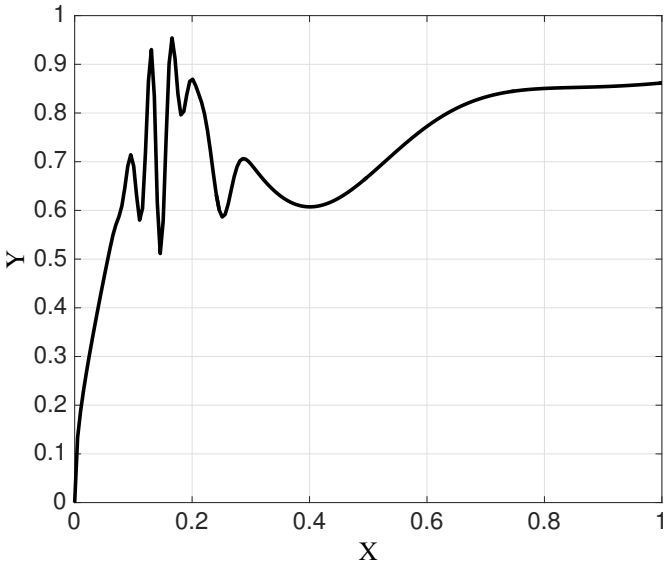
Um die Leistungsfähigkeit der Modellierungsansätze auf eine facettenreiche Art und Weise zu testen, werden hier ein- und zweidimensionale Testfunktionen mit verschiedensten Charakteristiken für die simulativen Experimente ausgewählt. Zur Menge der Testfunktionen gehören z. B. flache Testfunktionen, Testfunktionen mit starker Nichtlinearität und Testfunktionen mit räumlich stark variierenden Eigenschaften. In den Abbildungen 4.7 und 4.8 werden jeweils die ein- und zweidimensionalen Testfunktionen gezeigt.

Bei Xiongs Ansatz wird die Anzahl der Stützpunkte für jede Dimension auf 3 (dies bedeutet: $M = 2$) gesetzt, d. h. die Anzahl der Subräume bei einer zweidimensionalen Funktion ist 4. Bei TGPRNS wird die Partition wie oben beschrieben automatisch durchgeführt. Mit zufällig generierten Messdaten werden für jede Testfunktion die Schritte 1 bis 3 elfmal wiederholt. Die gemittelten Modellgenauigkeiten der zwei Modellierungsansätze für jede Testfunktion sind in Tabelle 4.1 angegeben.

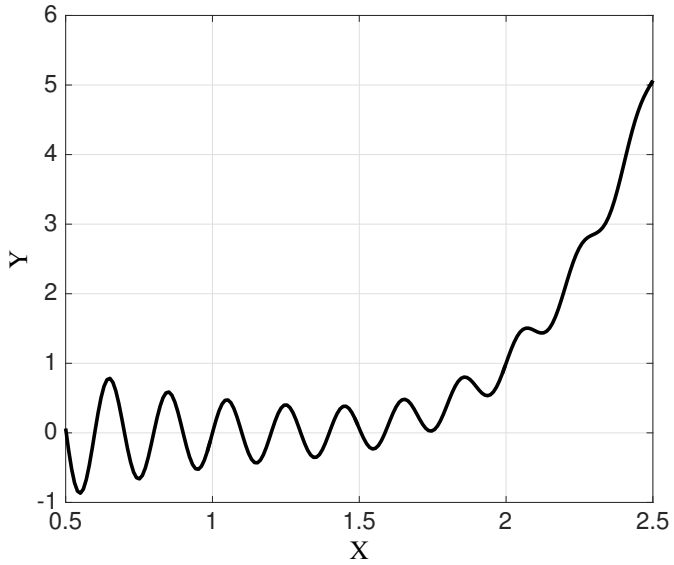
Ergebnis und Analyse

Zusammengefasst hat TGPRNS bei den meisten Testfunktionen eine bessere Modellgenauigkeit als Xiongs Ansatz erreicht. Vor allem bei Testfunktionen mit räumlich stark variierender Charakteristik, z. B. bei 1D-T1 und 2D-T4, ist die Überlegenheit signifikant. Bei der Testfunktion mit relativ flachem Verlauf, z. B. 1D-T3, hat sich TGPRNS erfolgreich automatisch angepasst, was in Abbildung 4.9 dargestellt wird. Während TGPRNS z. B. bei der

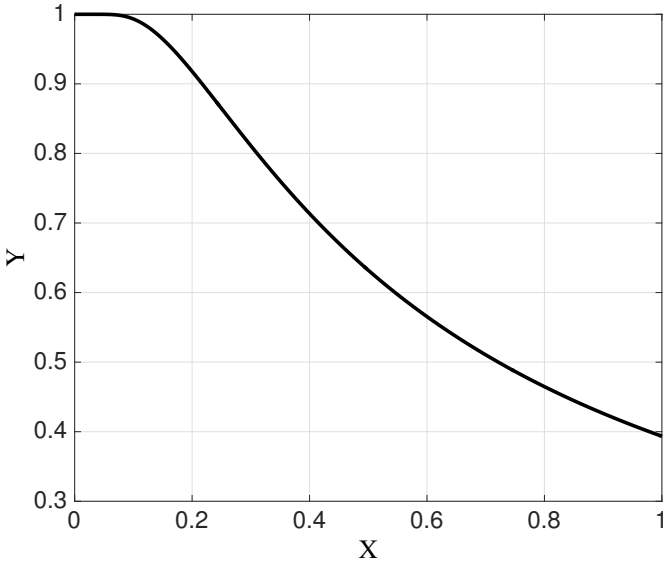
[21] $\mathcal{X}_{\text{Mess}}$ soll eine Untermenge des Gitters $\mathcal{X}_{\text{Ori}}$ sein.



(a) Testfunktion 1D-T1; räumlich variierende Funktion.

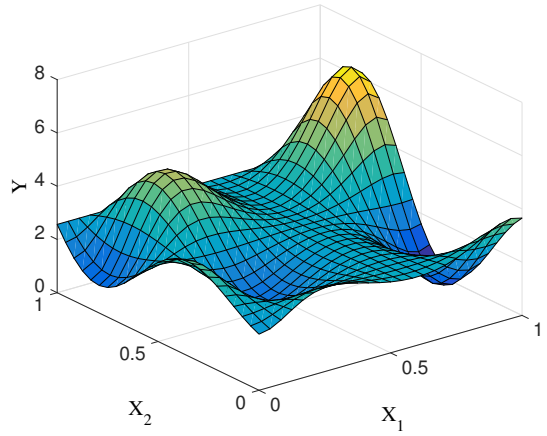


(b) Testfunktion 1D-T2; nichtlineare Funktion.

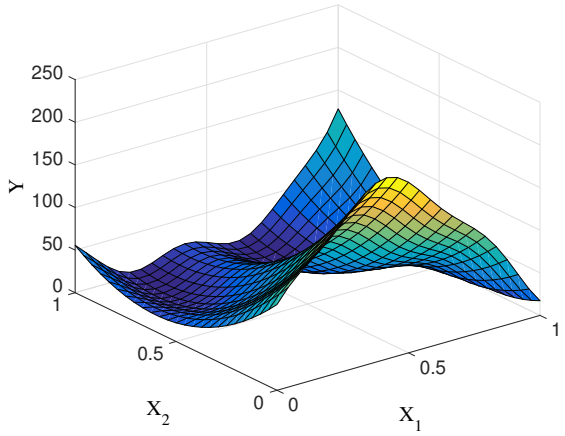


(c) Testfunktion 1D-T3; flache Funktion.

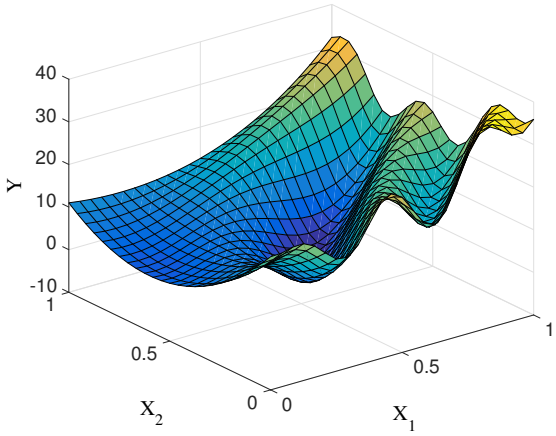
Abbildung 4.7: Übersicht über die eindimensionalen Testfunktionen.



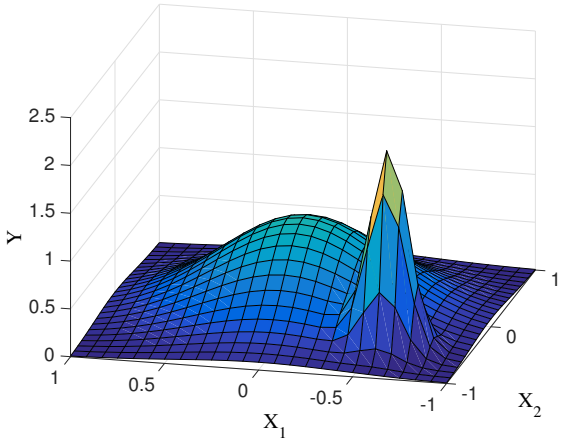
(a) Testfunktion 2D-T1; nichtlineare Funktion.



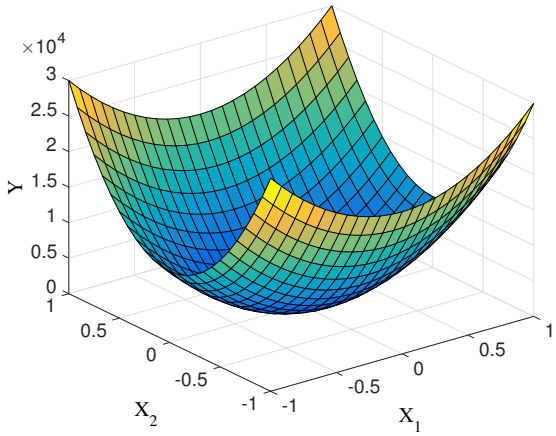
(b) Testfunktion 2D-T2; flache Funktion.



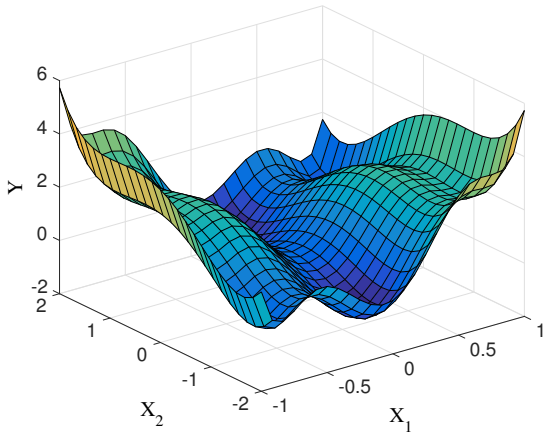
(c) Testfunktion 2D-T3; nichtlineare Funktion.



(d) Testfunktion 2D-T4; räumlich variierende Funktion.

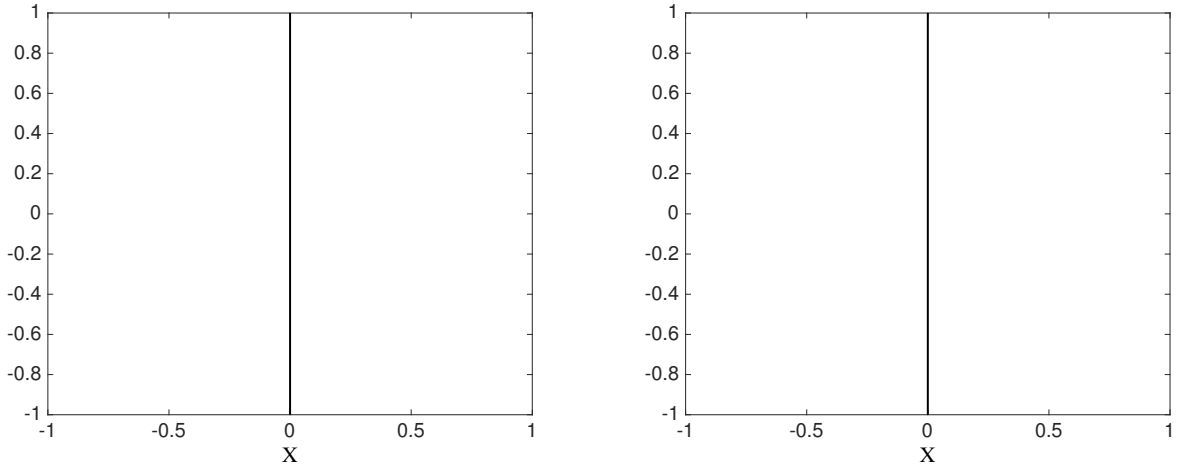


(e) Testfunktion 2D-T5; flache Funktion.



(f) Testfunktion 2D-T6; nichtlineare Funktion.

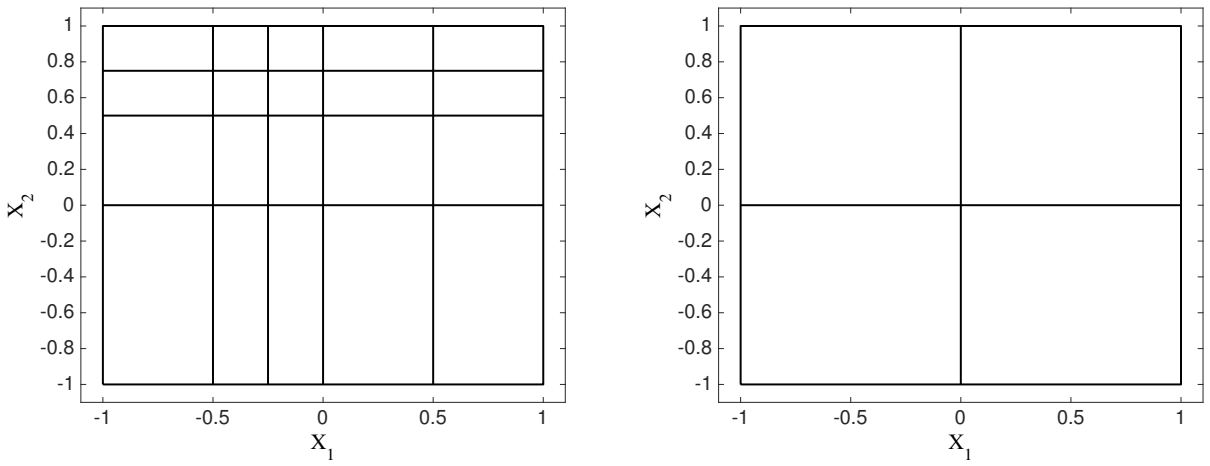
Abbildung 4.8: Übersicht über die zweidimensionalen Testfunktionen.



(a) Partitionierung des Eingangsraums durch TNSGPR für die Testfunktion 1D-T3.

(b) Partitionierung des Eingangsraums durch Xiongs Ansatz für die Testfunktion 1D-T3.

Abbildung 4.9: Partitionierung des Eingangsraums durch verschiedene Ansätze für die Testfunktion 1D-T3; für diese flache Testfunktion wird durch TNSGPR und Xiongs Ansatz eine identische Partitionierung des Eingangsraums erzeugt.



(a) Partitionierung des Eingangsraums durch TNSGPR für die Testfunktion 2D-T4.

(b) Partitionierung des Eingangsraums durch Xiongs Ansatz für die Testfunktion 2D-T4.

Abbildung 4.10: Partitionierung des Eingangsraums durch verschiedene Ansätze für die Testfunktion 2D-T4; für diese komplexe Testfunktion wird durch TNSGPR eine ungleichmäßigere und feinere Partitionierung des Eingangsraums im Vergleich zu Xiongs Ansatz erzeugt.

Testfunktion	Modellgenauigkeit Xiongs Ansatz	Modellgenauigkeit TNSGPR
1D-T1	0,3877±0,0587	0,2906±0,0273
1D-T2	9,9625±2,3328	0,7940±0,4353
1D-T3	0,0718±0,0427	0,044±0,0232
2D-T1	11,6519±0,3655	8,0412±1,5936
2D-T2	6324±668	1941±929
2D-T3	328,4±34,5	312,0±32,3
2D-T4	5,9829±0,7015	3,9811±1,5700
2D-T5	1,05e11±2,08e7	2,71e7±8,98e6
2D-T6	7,75±2,04	6,61±2,34

Tabelle 4.1: Modellgenauigkeit der Modellierungsansätze.

Testfunktion 2D-T4 die komplizierte Struktur mit verfeinerter Partition beherrschen kann, wird die Leistungsfähigkeit von Xiongs Ansatz durch das feste Partitionsschema wesentlich beschränkt, wie sich in Abbildung 4.10 zeigt.

4.3 Optimale Versuchsplanung für das Gaußprozessmodell

In diesem Abschnitt wird versucht, einen Versuchsplan $\boldsymbol{U} = [u_1, u_2, \cdots, u_N]$, der die Informationsfunktion $\mathrm{IG}(\boldsymbol{U})$ maximieren kann, basierend auf dem in Abschnitt 4.2 eingeführten nichtstationären Gaußprozessmodell TGPRNS zu erstellen. Dabei stellt sich die Frage, wie die Informationsfunktion definiert werden soll, wenn das Gaußprozessmodell für die Aufgabe von globaler Approximation eingesetzt wird. Da das Gaußprozessmodell zur Klasse der nichtparametrischen Modelle gehört, gibt es für das Modell keine a priori festgelegte analytische Formel, wie es beim Polynom-Ansatz der Fall ist. Außerdem sind die Messdaten bei nichtparametrischen Modellen in die Modellstruktur eingebettet. Beispielsweise wird beim Gaußprozessmodell die Kovarianzmatrix von den Messdaten und dem Hyperparametersatz bestimmt, wie sich in Formel (2.53) zeigt. Infolgedessen hängt die Leistungsfähigkeit des Gaußprozessmodells bezüglich der Modellgenauigkeit sehr stark von den gesammelten Messdaten ab. Wenn das Gaußprozessmodell für die optimale Applikation eines *Grey-Box*-Modells eingesetzt wird, ist es unmöglich und auch sinnlos, das Optimierungsproblem in Formel (4.3) direkt zu lösen. Stattdessen kommt die Idee der sequentiellen Versuchsplanung, die auf dem Konzept von *Active Learning* oder *Active Sampling* basiert, als eine praktikable Lösung in Frage. Dabei wird der Versuchsplan nicht von Anfang an vollständig festgelegt, sondern während des Prozesses Schritt für Schritt erstellt. Wie in Abschnitt 3.5 erörtert wurde, umfasst die sequentielle Versuchsplanung in der Regel zwei

Phasen:

In der ersten Phase, der anfänglichen Versuchsplanung, wird in dieser Arbeit ein anfänglicher Versuchsplan $\boldsymbol{U}_0$ erstellt, der von einer lockeren und äquidistanten Messpunktverteilung (Gittersampling) geprägt wird. Die Gründe dafür sind folgende: Erstens ist die Implementierung des Gittersamplings einfach, und die niedrige Dichte der Abtastpunkte im anfänglichen Versuchsplan soll auch nicht für eine erhebliche Rechenbelastung sorgen. Zweitens kann das Gittersampling sicherstellen, dass die Eckpunkte und die Ränder des Eingangsraums abgedeckt werden, damit in der weiteren Phase keine Extrapolation notwendig ist. Nach der Durchführung des anfänglichen Versuchs werden die anfänglichen Beobachtungsmesspunkte $\boldsymbol{D}_{\text{Sen},0}$ durch die physikalische Sensoren erfasst und aufgezeichnet. Anschließend werden die entsprechenden anfänglichen Applikationsmesspunkte $\boldsymbol{D}_{\text{App},0}$ berechnet. Basierend auf $\boldsymbol{D}_0$[22] wird TGPRNS eingesetzt, um das anfängliche Gaußprozessmodell GPM_0 für den zu applizierenden Zusammenhang zu trainieren. Dabei wird auch die Unsicherheit $\sigma^2_{\text{GPM}_0}$ von GPM_0 bestimmt.

Im nächsten Schritt, der adaptiven Versuchsplanung, soll eine Abtaststrategie entworfen werden, die aufgrund des aktuellen Gaußprozessmodells den nächsten optimalen Abtastpunkt identifiziert. Es wird angenommen, dass nach i Iterationen bereits die Menge $\boldsymbol{D}_{0:i} = \boldsymbol{D}_0 \cup \boldsymbol{D}_{1:i}$ von Applikationsmesspunkten gesammelt und eingesetzt wurde, um das aktuelle Gaußprozessmodell GPM_i zu generieren. Der aktuelle Zustand des Problems wird dann in Abbildung 4.11 dargestellt. Die Aufgabe der Abtaststrategie besteht nun darin, den optimalen Applikationsmesspunkt $D_{i+1} = [u_{i+1}, \text{MP}_{i+1}, \sigma^2_{\text{MP}_{i+1}}, A_{i+1}, \sigma^2_{A_{i+1}}]$ für die nächste Iteration zu erzeugen, der die Informationsfunktion IG maximieren kann. Der Informationsgehalt eines Applikationsmesspunkts wird durch dessen Komponenten oder Eigenschaften bestimmt, die in dieser Arbeit wie folgt definiert werden:

- u_{i+1}: Ein möglicher Eingang für die $(i+1)$-te Iteration.
- MP_{i+1}: Der Wert des Applikationsparameters an der Stelle u_{i+1}, der mittels des Berechnungsprozesses in Abbildung 4.1 berechnet wird.
- $\sigma^2_{\text{MP}_{i+1}}$: Varianz von MP_{i+1}. Sie wird auch geschätzt nach dem Berechnungsprozess in Abbildung 4.1.
- A_{i+1}: Der geschätzte Mittelwert des Applikationsparameters an der Stelle u_{i+1}, der basierend auf GPM_i mittels der Formel (2.57) berechnet wird.
- $\sigma^2_{A_{i+1}}$: Die geschätzte Varianz von A_{i+1}, die basierend auf GPM_i mittels der Formel (2.58) berechnet wird.

[22] Um unnötig komplizierte Formulierungen zu vermeiden, wird der Index App in $\boldsymbol{D}_{\text{App},0}$ innerhalb dieses Abschnitts weggelassen. D.h. wenn keine speziellen Hinweise vorliegen, wird im weiteren Verlauf des Abschnitts $\boldsymbol{D}_{\text{App},0}$ durch $\boldsymbol{D}_0$ ersetzt.

In Abbildung 4.11 wird die Beziehung zwischen den verschiedenen Komponenten in einem Applikationsmesspunkt dargestellt.

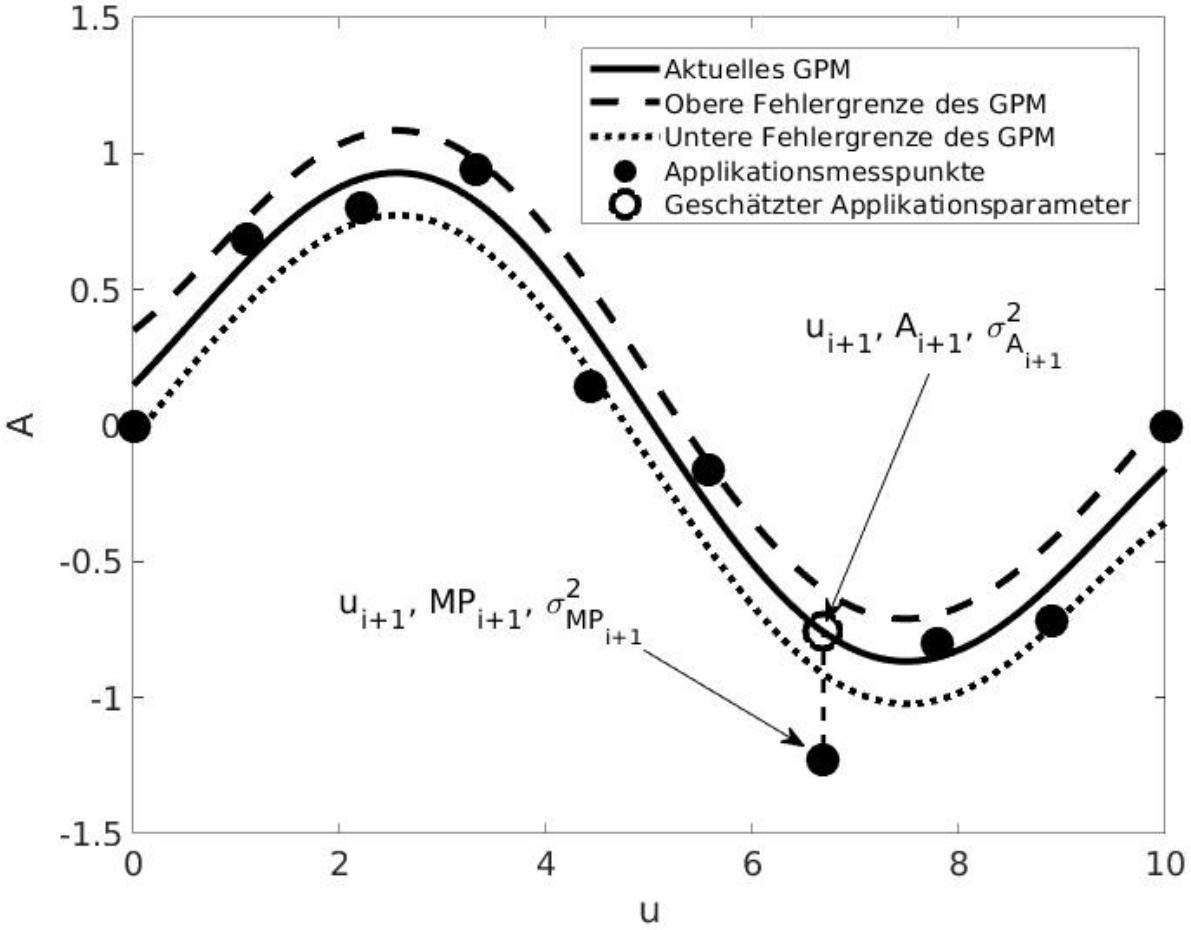


Abbildung 4.11: Problemzustand während der adaptiven Versuchsplanung; dabei umfasst die Menge der Applikationsmesspunkte die schwarzen Punkte; außerdem werden das aktuelle Gaußprozessmodell und seine Fehlerschranken gezeigt, die mit Hilfe der Applikationsmesspunkte bestimmt werden; daneben werden die verschiedenen Komponenten $[u_{i+1}, \mathrm{MP}_{i+1}, \sigma^2_{\mathrm{MP}_{i+1}}, A_{i+1}, \sigma^2_{A_{i+1}}]$ eines Applikationsmesspunkts dargestellt.

Wie schon in Kapitel 3 diskutiert wurde, basiert die Erstellung einer optimalen Versuchsplanung in der Regel auf der zugrundeliegenden Modellannahme. Deswegen soll bei der Bestimmung der Informationsfunktion abgesehen vom Eingang u_{i+1}, dem einzigen Element, das man bei der Versuchsplanung verstellen kann, ebenfalls Rücksicht auf das zugrundeliegende GPM_i genommen werden. Das entsprechende Optimierungsproblem lässt sich wie folgt formulieren:

$$u^*_{i+1} = \underset{u_{i+1} \in \mathcal{U}}{\arg\max}\, \mathrm{IG}(\mathrm{GPM}_i, u_{i+1}) \tag{4.16}$$

Der Term $\mathcal{U}$ steht für die zulässige Menge des Optimierungsproblems in Formel (4.16), in diesem Fall ein Gitter $\mathcal{U} = (u_{\min}, u_{\max})$ im Eingangsraum. Zu beachten ist, dass in Formel

(4.16) statt D_{i+1}, des Symbols für einen Applikationsmesspunkt, der Eingang u_{i+1} eines Applikationsmesspunkts als unabhängige Variable in die Informationsfunktion eingetragen wird. Der Grund ist folgender: Erstens ist der Eingang die einzige Komponente in D_{i+1}, welche die Abtaststrategie überhaupt kontrollieren oder verstellen kann; die anderen vier Komponenten ergeben sich erst bzw. können erst berechnet werden, nachdem der Eingang eingestellt wurde. Zweitens kann dadurch eine konsistente Formulierung im Einklang mit Formel (4.3) erzeugt werden. Obwohl bei der Beschreibung der Informationsfunktion (Formel (4.16)) nur der Eingang des Applikationsmesspunkts auftritt, berücksichtigt die Abtaststrategie allerdings auch andere Eigenschaften von D_{i+1}, zum Beispiel die Unsicherheit $\sigma^2_{\mathrm{MP}_{i+1}}$ und den Modellausgang A_{i+1}, was in Abschnitt 4.3.1 diskutiert und erklärt wird.

Der weitere Verlauf dieses Abschnitts wird wie folgt gegliedert: Zunächst wird in Abschnitt 4.3.1 eine Übersicht über die bestehenden Abtaststrategien für die adaptive Versuchsplanung beim Gaußprozessmodell bereitgestellt und bewertet. Dann wird in Abschnitt 4.3.2 eine neue Abtaststrategie für unseren Anwendungsfall vorgestellt. Zum Schluss wird in Abschnitt 4.3.3 ein automatisches Stopp-Kriterium für den automatischen Abbruch des Applikationsvorgangs vorgestellt.

4.3.1 Verwandte Arbeiten

Für die Versuchsplanung bei einem Gaußprozessmodell können die raumfüllenden Ansätze in Frage kommen, die schon in Abschnitt 3.3 vorgestellt wurden, z. B. die *Sobol Sequence*, LHD etc. In [PM12] und [LS08] werden ebenfalls solche Strategien verfolgt. Bei der modellfreien raumfüllenden Versuchsplanung wird allerdings die Information aus der Modellstruktur, z. B. die Unsicherheit des Modellausgangs und die Korrelation zwischen den Modellwerten, nicht ausgenutzt. Deswegen konzentrieren wir uns in diesem Abschnitt eher auf die modellbasierten Ansätze. In diesen wird eine Nutzungsfunktion abhängig vom Versuchsplan definiert, und die Suche nach dem optimalen Versuchsplan erfolgt durch die Optimierung der Nutzungsfunktion. Je nachdem, welches Ziel die Versuchsplanung verfolgt, können verschiedene Nutzungsfunktionen konstruiert werden.

- Entropieansatz: In [Sha01] wird der Begriff Entropie eingeführt, um den gemittelten Informationsgehalt einer Zufallsvariable zu beschreiben. Die Entropie $\mathrm{H}(X)$ einer kontinuierlichen Zufallsvariablen X wird durch folgende Formel

$$\mathrm{H}(X) = -\int p(x) \log p(x) \mathrm{d}x \tag{4.17}$$

  definiert, wobei der Term $p(x)$ für die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der Zufallsvariablen X steht. Im Paradigma der Informationstheorie kann der Informationsgehalt eines neuen Applikationsmesspunkts $D_{i+1} = [u_{i+1}, \mathrm{MP}_{i+1}, \sigma^2_{\mathrm{MP}_{i+1}}, A_{i+1}, \sigma^2_{A_{i+1}}]$ basierend auf dem aktuellen Gaußprozessmodell wie folgt berechnet werden:

$$\mathrm{IG}_{\mathrm{En}}(\mathrm{GPM}_i, u_{i+1}) = \mathrm{H}(\boldsymbol{A}_{0:i} \cup A_{i+1}) - \mathrm{H}(\boldsymbol{A}_{0:i}) \tag{4.18}$$

Dabei gilt $\boldsymbol{A}_{0:i} = \boldsymbol{A}_0 \cup A_1 \cup A_2 \cup A_3 \cup \cdots \cup A_i$[23]. A_i entspricht dem Modellausgang von GPM_i an der Stelle u_i. Der Term u_i ist der Eingang des i-ten Applikationsmesspunkts in $\boldsymbol{D}_{0:i}$. Unter A_i kann eine gaußverteilte Zufallsvariable verstanden werden, deren Mittelwert und Varianz jeweils durch die Formeln (2.57) und (2.58) berechnet werden. Im Rahmen der Gaußprozessmodellierung kann $\boldsymbol{A}_{0:i}$ als eine gaußverteilte multivariate Zufallsvariable angesehen werden.

Die Informationsfunktion in Formel (4.18) beschreibt die Zunahme des Informationsgehalts in der Zufallsvariable $\boldsymbol{A}_{0:i}$, die durch das Hinzufügen des neuen Applikationsmesspunkts D_{i+1} bewirkt wird. Wie oben beschrieben, steht D_{i+1} für den Applikationsmesspunkt, der sich durch den Eingang u_{i+1} ergibt. Durch Einsatz der Rechenregel der bedingten Entropie $\mathrm{H}(Y|X) = \mathrm{H}(Y \cup X) - \mathrm{H}(X)$ kann die Informationsfunktion in Formel (4.18) in folgende Formel umgewandelt werden ([Kra08]):

$$\begin{aligned}\mathrm{IG}_{\mathrm{En}}(\mathrm{GPM}_i, u_{i+1}) =& \mathrm{H}(\boldsymbol{A}_{0:i} \cup A_{i+1}) - \mathrm{H}(\boldsymbol{A}_{0:i}) \\ =& \mathrm{H}(A_{i+1}|\boldsymbol{A}_{0:i}) \\ =& \frac{1}{2}\log \sigma^2_{A_{i+1}|\boldsymbol{A}_{0:i}}\end{aligned} \tag{4.19}$$

Dabei steht $\sigma^2_{A_{i+1}|\boldsymbol{A}_{0:i}}$ für die durch die Formel (2.58) prädizierte Varianz an dem ausgewählten Eingang u_{i+1}. Nach der Formel (2.58) lässt sich $\sigma^2_{A_{i+1}|\boldsymbol{A}_{0:i}}$ wie folgt berechnen:

$$\begin{aligned}\sigma^2_{A_{i+1}|\boldsymbol{A}_{0:i}} =& K(u_{i+1}, u_{i+1}) - K_i(u_{i+1}, \mathbf{u}_{0:i})[K_i(\mathbf{u}_{0:i}, \mathbf{u}_{0:i}) + \sigma_n^2\mathbf{I}]^{-1}K_i(\mathbf{u}_{0:i}, u_{i+1}) \\ =& \sigma^2_{\mathrm{MP}_{i+1}} + \sigma_f - K_i(u_{i+1}, \mathbf{u}_{0:i})[K_i(\mathbf{u}_{0:i}, \mathbf{u}_{0:i}) + \sigma_n^2\mathbf{I}]^{-1}K_i(\mathbf{u}_{0:i}, u_{i+1})\end{aligned} \tag{4.20}$$

Dabei steht der Term $K_i(\mathbf{u}_{0:i}, \mathbf{u}_{0:i})$ für die Kovarianzmatrix des aktuellen Gaußprozessmodells GPM_i. $\mathbf{u}_{0:i}$ sind die Eingänge der bestehenden Menge der Applikationsmesspunkte $\boldsymbol{D}_{0:i}$. In der Tat gleicht $\sigma^2_{A_{i+1}|\boldsymbol{A}_{0:i}}$ der Varianz $\sigma^2_{A_{i+1}}$ in Abbildung 4.11. Hier wird die Abhängigkeit von $\boldsymbol{A}_{0:i}$ betont. Zusammengefasst wählt der Entropieansatz den höchsten unsicheren Ort im aktuellen Gaußprozessmodell als den nächsten Abtastpunkt aus. In der Literatur wird der Entropieansatz auch als bayessche D-optimale Versuchsplanung bezeichnet ([CV95a]), in [Mac92] wird dieser Ansatz ALM genannt.

- Varianzreduktion: Dieser Ansatz stammt aus der Analyse des Generalisierungsfehlers eines Schätzers in Formel (2.18). Dabei wird der Generalisierungsfehler in drei Komponenten zerlegt: den Bias des Schätzers, die Varianz des Schätzers und das Messrauschen. Im Regressionsproblem besteht die Aufgabe darin, die Summe der

[23] $\boldsymbol{A}_0$ steht für die Menge der Modellausgänge von GPM_i an $\boldsymbol{U}_0$.

drei Komponenten zu minimieren. Zunächst ist das Messrauschen bei der Versuchsplanung nicht zu beeinflussen. Wenn eine Modellklasse für die Lösung des Regressionsproblems festgelegt ist, kann die Komponente für den Bias näherungsweise als eine Konstante behandelt werden. Außerdem erweist sich im Vergleich zu Berechnung der Varianz des Schätzers die Quantifizierung des Bias als eine schwierige Aufgabe, vor allem im Fall der Gaußprozessmodellierung. Infolgedessen wird in diesem Ansatz versucht, den Messpunkt so auszuwählen, dass die Varianz des Schätzers minimiert wird. Diese Methode wurde zunächst in [CGJ96] eingeführt und als ALC bezeichnet. In [Seo+00] wurde dieser Ansatz im Paradigma der Gaußprozessmodellierung implementiert, um einen besseren Abtastpunkt auszuwählen.

Was die konkrete Implementierung angeht, zielt der Ansatz darauf ab, die Reduzierung der Varianz in einem vordefinierten Bereich $\mathcal{U}$ durch das Hinzufügen eines neuen Applikationsmesspunkts zu maximieren. Sei das aktuelle Gaußprozessmodell GPM_i gegeben, kann die Varianz $\sigma^2_{u^*}$ an einer Referenzstelle u^* wie folgt berechnet werden:

$$\sigma^2_{u^*} = K(u^*, u^*) - K_i(u^*, \mathbf{u}_{0:i})[K_i(\mathbf{u}_{0:i}, \mathbf{u}_{0:i}) + \sigma_n^2 \mathbf{I}]^{-1} K_i(\mathbf{u}_{0:i}, u^*) \tag{4.21}$$

Nachdem der ausgewählte Applikationsmesspunkt D_{i+1} zu $\boldsymbol{D}_{0:i}$ hinzugefügt wurde, ergibt sich die Kovarianzmatrix $K_{i+1}(\mathbf{u}_{0:i+1}, \mathbf{u}_{0:i+1})$ zu

$$K_{i+1}(\mathbf{u}_{0:i+1}, \mathbf{u}_{0:i+1}) = \begin{pmatrix} K_i(\mathbf{u}_{0:i}, \mathbf{u}_{0:i}) & K_{i+1}(u_{\mathrm{i}+1}, \mathbf{u}_{0:i}) \\ K^T_{i+1}(u_{\mathrm{i}+1}, \mathbf{u}_{0:i}) & K(u_{\mathrm{i}+1}, u_{\mathrm{i}+1}) \end{pmatrix} \tag{4.22}$$

Zu beachten ist, dass die Berechnung von $K_{i+1}(\mathbf{u}_{0:i+1}, \mathbf{u}_{0:i+1})$ mit Hilfe des Hyperparametersatzes des *aktuellen* Gaußprozessmodells GPM_i erfolgt und dass $\mathbf{u}_{0:i+1} = [\mathbf{u}_{0:i}, u_{\mathrm{i}+1}]$ gilt. D.h. dabei wird kein neues Modell gefittet. Anhand der erweiterten Menge der Applikationsmesspunkte lässt sich die Varianz $\tilde{\sigma}^2_{u^*}$ an derselben Referenzstelle u^* wie folgt berechnen:

$$\tilde{\sigma}^2_{u^*} = K(u^*, u^*) - K_{i+1}(u^*, \mathbf{u}_{0:i+1})[K_{i+1}(\mathbf{u}_{0:i+1}, \mathbf{u}_{0:i+1}) + \sigma_n^2 \mathbf{I}]^{-1} K_{i+1}(\mathbf{u}_{0:i+1}, u^*) \tag{4.23}$$

Es ist darauf zu achten, dass man die Referenzstelle u^* nicht mit dem neuen Messpunkt D_{i+1} verwechselt. Zum Schluss kann daraus folgende Informationsfunktion konstruiert werden:

$$\mathrm{IG}_{\mathrm{ALC}}(\mathrm{GPM}_i, u_{i+1}) = \operatorname*{mean}_{\mathcal{U}}(\sigma^2_{u^*} - \tilde{\sigma}^2_{u^*}) \tag{4.24}$$

Diese Informationsfunktion beschreibt die gemittelte Reduktion der Varianz des Schätzers auf dem Bereich der Referenzstellen $\mathcal{U}$. Dieser Bereich kann entweder der

gesamte Versuchsraum oder ein Teil des Versuchsraums sein. Darüber hinaus kann die Informationsfunktion durch eine Gewichtungsfunktion $w(u^*)$ erweitert werden, um die verschiedenen Bedeutungen[24] der Referenzstellen zum Ausdruck zu bringen, und es ergibt sich

$$\mathrm{IG}_{\mathrm{ALC}}(\mathrm{GPM}_i, u_{i+1}) = \underset{\mathcal{U}}{\mathrm{mean}}[(\sigma^2_{u^*} - \tilde{\sigma}^2_{u^*})w(x^*))] \tag{4.25}$$

- Mutual Information: Während sich der Entropieansatz durch eine intuitive Idee und leichte Implementierung auszeichnet, tendiert der Versuchsplan mit dem Entropieansatz dazu, Messpunkte auf die Kanten und Ecken des Versuchsraums zu platzieren, was zu einer Verschwendung der Messpunkte und einer schlechten Abdeckung des Versuchsraums führen kann ([KSG08]). Ein weiteres Kriterium basierend auf der Informationstheorie, das für die Versuchsplanung eingesetzt werden kann, ist die Mutual Information (MI). MI ist ein Konzept, das die Beziehung zwischen zwei Zufallsvariablen beschreibt. Beispielsweise für zwei Zufallsvariablen X und Y quantifiziert die MI dazwischen $\mathrm{MI}(X:Y)$, wie viel Unsicherheit über Y reduziert wird, wenn X bekannt ist. Mathematisch wird die $\mathrm{MI}(X:Y)$ wie folgt definiert [Bis06]:

$$\mathrm{MI}(X:Y) = \int\int p(x,y)\log(\frac{p(x,y)}{p(x)p(y)})\mathrm{d}x\mathrm{d}y \tag{4.26}$$

Dabei sind $p(x)$ und $p(y)$ jeweils die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen von X und Y. $p(x,y)$ steht für die Verbundwahrscheinlichkeitsdichtefunktion von X und Y. Im Rahmen der GPR kann MI genutzt werden, um anhand der vermessenen Region die Reduzierung der Unsicherheit über die unvermessene Region im Versuchsraum mathematisch darzustellen. Die entsprechende Informationsfunktion lässt sich wie folgt formulieren:

$$\mathrm{IG}_{\mathrm{MI}}(\mathrm{GPM}_i, u_{i+1}) = \mathrm{MI}(\boldsymbol{A}_{\mathrm{Mess}} \cup A_{i+1} : \boldsymbol{A}_{\mathrm{Unmess}}) - \mathrm{MI}(\boldsymbol{A}_{\mathrm{Mess}} : \boldsymbol{A}_{\mathrm{Unmess}}) \tag{4.27}$$

Dabei steht der Term $\boldsymbol{A}_{\mathrm{Mess}}$, ähnlich wie oben im Entropieansatz, für eine multivariate gaußverteilte Zufallsvariable $\boldsymbol{A}_{\mathrm{Mess}} = \boldsymbol{A}_{0:i}$. $\boldsymbol{A}_{\mathrm{Unmess}}$ ist die Vereinigungsmenge der unvermessenen Regionen und kann als die Komplementärmenge von $\boldsymbol{A}_{\mathrm{Mess}} \cup A_{i+1}$ in $\mathcal{U}$ verstanden werden. Es gilt: $\boldsymbol{A}_{\mathrm{Unmess}} = \boldsymbol{A}_{\mathcal{U}} \backslash (\boldsymbol{A}_{\mathrm{Mess}} \cup A_{i+1})$. In [Kra08] wird gezeigt, dass das MI-Kriterium dem bayesschen A-optimal-Kriterium im Rahmen der GPR entspricht. Durch die Herleitung in Formel (4.28) kann die Informationsfunktion reduziert werden ([Kra08]):

[24] Es kann durchaus vorkommen, dass verschiedene Messstellen im Eingangsraum verschiedene Bedeutungen für die Versuchsplanung besitzen.

$$
\begin{aligned}
\mathrm{IG}_{\mathrm{MI}}(\mathrm{GPM}_i, u_{i+1}) &= \mathrm{MI}(\boldsymbol{A}_{\mathrm{Mess}} \cup A_{i+1} : \boldsymbol{A}_{\mathcal{U}} \backslash (\boldsymbol{A}_{\mathrm{Mess}} \cup A_{i+1})) \\
&\quad - \mathrm{MI}(\boldsymbol{A}_{\mathrm{Mess}} : \boldsymbol{A}_{\mathcal{U}} \backslash (\boldsymbol{A}_{\mathrm{Mess}} \cup A_{i+1})) \\
&= \mathrm{H}(\boldsymbol{A}_{\mathrm{Mess}} \cup A_{i+1}) - \mathrm{H}(\boldsymbol{A}_{\mathrm{Mess}} \cup A_{i+1} | \boldsymbol{A}_{\mathcal{U}} \backslash (\boldsymbol{A}_{\mathrm{Mess}} \cup A_{i+1})) \\
&\quad - \mathrm{H}(\boldsymbol{A}_{\mathrm{Mess}}) + \mathrm{H}(\boldsymbol{A}_{\mathrm{Mess}} | \boldsymbol{A}_{\mathcal{U}} \backslash (\boldsymbol{A}_{\mathrm{Mess}} \cup A_{i+1})) \\
&= \mathrm{H}(\boldsymbol{A}_{\mathrm{Mess}} \cup A_{i+1}) - \mathrm{H}(\boldsymbol{A}_{\mathcal{U}}) + \mathrm{H}(\boldsymbol{A}_{\mathcal{U}} \backslash (\boldsymbol{A}_{\mathrm{Mess}} \cup A_{i+1})) \\
&\quad - \mathrm{H}(\boldsymbol{A}_{\mathrm{Mess}}) + \mathrm{H}(\boldsymbol{A}_{\mathrm{All}} \backslash A_{i+1}) \\
&= \mathrm{H}(\boldsymbol{A}_{\mathrm{Mess}} \cup A_{i+1}) - \mathrm{H}(\boldsymbol{A}_{\mathrm{Mess}}) - (\mathrm{H}(\boldsymbol{A}_{\mathcal{U}}) - \mathrm{H}(\boldsymbol{A}_{\mathcal{U}} \backslash A_{i+1})) \\
&= \mathrm{H}(A_{i+1} | \boldsymbol{A}_{\mathrm{Mess}}) - \mathrm{H}(A_{i+1} | \boldsymbol{A}_{\mathcal{U}} \backslash A_{i+1}) \\
&= \frac{1}{2} \log \sigma^2_{A_{i+1} | \boldsymbol{A}_{\mathrm{Mess}}} - \frac{1}{2} \log \sigma^2_{A_{i+1} | A^C_{i+1}}
\end{aligned}
\tag{4.28}
$$

wobei gilt $A^C_{i+1} = \boldsymbol{A}_{\mathcal{U}} \backslash A_{i+1}$. Nachdem $\sigma^2_{A_{i+1}|\boldsymbol{A}_{\mathrm{Mess}}}$ und $\sigma^2_{A_{i+1}|A^C_{i+1}}$ mithilfe der Formel (2.58) berechnet wurden, ergibt sich $\mathrm{IG}_{\mathrm{MI}}(\mathrm{GPM}_i, u_{i+1})$ zu

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{IG}_{\mathrm{MI}}(\mathrm{GPM}_i, u_{i+1}) = \\
&\log \left[\frac{\sigma^2_{\mathrm{MP}_{i+1}} + \sigma_f - K_i(u_{i+1}, \mathbf{u}_{0:i}) [K_i(\mathbf{u}_{0:i}, \mathbf{u}_{0:i}) + \sigma_n^2 \mathbf{I}]^{-1} K_i(\mathbf{u}_{0:i}, u_{i+1})}{\sigma^2_{\mathrm{MP}_{i+1}} + \sigma_f - K_i(u_{i+1}, \mathbf{u}^C_{i+1}) [K_i(\mathbf{u}^C_{i+1}, \mathbf{u}^C_{i+1}) + \sigma_n^2 \mathbf{I}]^{-1} K_i(\mathbf{u}^C_{i+1}, u_{i+1})} \right]
\end{aligned}
\tag{4.29}
$$

wobei gilt $\mathbf{u}^C_{i+1} = \mathcal{U} \backslash u_{i+1}$.

4.3.2 Hybride Abtaststrategie

Unter üblichen Randbedingungen der Versuchsplanung herrscht aktuell die Klasse der Ansätze vor, die sich auf die vernünftige Einstellung der Eingangsfaktoren konzentrieren, damit der Informationsgehalt für ein vorgegebenes Ziel, z. B. die Güte der globalen Approximation, maximiert werden kann. Dabei ist es eher selten der Fall, dass die Ausgänge eines Experiments in die Versuchsplanung mit einfließen, vor allem beim passiven Verfahren, wo die Mitberücksichtigung der Experimentsausgänge bei der Versuchsplanung einfach nicht möglich ist. Allerdings kann die Information der Experimentsausgänge aus Intuition hilfreich bei der Versuchsplanung sein; z. B. fällt einem für die Ermittlung eines Zusammenhangs, der eine räumlich variierende Charakteristik aufweist, wie in Abbildung 4.2, sehr schnell die Idee ein, dass in eine Region mit komplexem Modellverhalten mehr Abtastpunkte platziert werden sollten. Für eine Region, in welcher der Funktionsverlauf eher glatt ist, sollte ein dünnerer Versuchsplan ausreichen, um den funktionellen Zusammenhang zu ermitteln. Im Gegensatz zum passiven Verfahren erlaubt der Ansatz der sequentiellen Versuchsplanung, in ihrem Verlauf schon einen groben Überblick über das Modellverhalten zu gewinnen. Dadurch entsteht die Möglichkeit, während der Versuchsplanung die Experimentsausgänge auszunutzen.

Im Umfeld der globalen Optimierung besteht die Aufgabe darin, das Optimum einer Zielfunktion im zulässigen Eingangsraum trotz der eventuell zahlreichen lokalen Optima zu identifizieren. Um das globale Optimum aus einer Menge von lokalen Optima zu finden, muss die Abtaststrategie sowohl die *Exploration* als auch die *Exploitation* des Versuchsraums berücksichtigen ([FK09], [WS07] und [Par+12]). Die Abtaststrategie der *Exploration* versucht, den gesamten Versuchsraum bzw. Eingangsraum durch Abtastpunkte zu füllen in der Hoffnung, dass dadurch potenzielle lokale Optima entdeckt werden können. Hierbei geht es eigentlich um eine raumfüllende Abtaststrategie. Bei der *Exploitation* handelt sich um eine intensive und sorgfältige Ermittlung der aktuell bekannten lokalen Optima und ihrer Umgebung, damit der Funktionswert des entsprechenden lokalen Optimums bestimmt und mit anderen lokalen Optima verglichen werden kann.

Diese Vorgehensweise bei der globalen Optimierung motiviert die Entwicklung einer Hybriden Abtaststrategie, die unter der Zielsetzung der globalen Approximation die *Exploration* und die *Exploitation* des Versuchsraums zugleich berücksichtigt. Anders als bei der globalen Optimierung, bei der für die Versuchsplanung die Regionen entfernt von lokalen Optima von geringem Interesse sind ([Jon01]), muss bei der globalen Approximation die Modellgenauigkeit auf dem gesamten Eingangsraum beachtet werden. Die in Abschnitt 4.3.1 vorgestellten Methoden befassen sich mit der Zielsetzung, den Versuchsraum durch eine vernünftige Abtaststrategie abzudecken. Dabei wird überwiegend die prädizierte Unsicherheit des Modellausgangs, z. B. $\sigma^2_{A_{i+1}|\boldsymbol{A}_{0:i}}$ im Entropieansatz, als Indikator der Korrelationsstärke zwischen dem ausgewählten Abtastpunkt und den bestehenden Applikationsmesspunkten benutzt. Mit diesem Indikator kann derjenige Abtastpunkt ausgewählt werden, der in der Ebene des Eingangsraums einen optimalen Abstand zu den bestehenden Applikationsmesspunkten besitzt. Da bei einem bekannten Gaußprozessmodell die prädizierte Unsicherheit des Modellausgangs nur eine Funktion der Position des Abtastpunkts[25] im Eingangsraum ist, wird das gegebenenfalls inhomogene Modellverhalten, das bei der Versuchsplanung eine intensive lokale Ermittlung, und zwar eine *Exploitation*, erfordert, nicht von der Abtaststrategien aus Abschnitt 4.3.1 betrachtet. Deswegen fallen solche raumfüllenden Ansätze in der Tat in die Kategorie der *Exploration*.

Eine weitere Eigenschaft eines Abtastpunkts, die momentan nicht zur Verbesserung der Versuchsplanung verwendet wird, ist die Unsicherheit, die sich durch die Varianz $\sigma^2_{\mathrm{MP}_{i+1}}$ des Messrauschens in Abbildung 4.11 gut darstellen lässt. Intuitiv ist klar, dass je kleiner die Unsicherheit des Abtastpunkts ist, umso mehr Information im Abtastpunkt steckt. Im Extremfall, wenn die Varianz null ist, repräsentiert der Abtastpunkt die Wahrheit. Wenn die Varianz unendlich hoch ist, ist die Information des Abtastpunkts über den Prozess null. Deswegen soll die Varianz des Messrauschens als ein wichtiger Faktor für den Informationsgehalt eines Abtastpunkts bei der Versuchsplanung berücksichtigt werden. Es wird

[25] Eigentlich spielt hier die Unsicherheit $\sigma^2_{\mathrm{MP}_{i+1}}$ des Abtastpunkts auch eine Rolle; wenn jedoch $\sigma^2_{\mathrm{MP}_{i+1}}$ bei der Versuchsplanung nicht beeinflussbar ist, wird angenommen, dass $\sigma^2_{\mathrm{MP}_{i+1}}$ gleich der geschätzten Varianz σ^2_n ist.

angestrebt, die Varianz des Messrauschens auf einem möglichst geringen Niveau zu halten, damit der Abtastpunkt viel über den zu approximierenden Zusammenhang aussagen kann. In der Praxis sollte die Berücksichtigung der Varianzen des Messrauschens bei der Versuchsplanung eine Rolle spielen, wenn sie von Messpunkt zu Messpunkt stark variieren. Im Extremfall kann sogar die Auswirkung der Varianz des Messrauschens dominant sein. Zum Beispiel, wie bereits in Abschnitt 1.2.2 erklärt wurde, kann die effektive Fläche des AGR-Ventils nur mit einer sehr großen Varianz geschätzt werden, wenn es weit geöffnet und das Druckgefälle darüber gering ist. Dies wird dann dazu führen, dass in diesem Abtastpunkt nur ein sehr geringes Maß an Information enthalten ist.

In der vorliegenden Arbeit wird eine Hybride Abtaststrategie eingesetzt, um den adaptiven Versuchsplan zu erstellen. Dabei wird das MI-Kriterium für die *Exploration* des Versuchsraums verwendet. Für die *Exploitation* kommt dann eine Art von Krümmung des $\mathrm{GPM_i}$ als Indikator der Komplexität des Modellverhaltens zum Einsatz. Zusammengefasst kann die Abtaststrategie so formuliert werden:

$$\mathrm{IG_{Hyb}}(\mathrm{GPM}_i, u_{i+1}) = \mathrm{IG_{MI}}(\mathrm{GPM}_i, u_{i+1}) * \mathrm{IG_{Lap}}(\mathrm{GPM}_i, u_{i+1}) \tag{4.30}$$

Und es gilt:

$$\mathrm{IG_{Lap}}(\mathrm{GPM}_i, u_{i+1}) = \sum_{j=1}^{\mathrm{Dim}} \left| \frac{\partial^2 \mathrm{GPM}_i(u_{i+1})}{\partial^2 u_j} \right| \tag{4.31}$$

Dabei steht der Term Dim für die Dimension des Problems. Er kann 1 oder 2 sein. Der Term $\frac{\partial^2 \mathrm{GPM}_i(u_{i+1})}{\partial^2 u_j}$ ist die numerische zweite partielle Ableitung des GPM_i am Abtastpunkt u_{i+1}. Im Prinzip beschreibt $\mathrm{IG_{Lap}}(\mathrm{GPM}_i, u_{i+1})$ die Summe der Absolutwerte der zweiten partiellen Ableitungen in allen Richtungen an diesem Abtastpunkt. In der konkreten Implementierung muss $\mathrm{IG_{Lap}}(\mathrm{GPM}_i, u_{i+1})$ noch normalisiert werden, um überhaupt kombiniert mit $\mathrm{IG_{MI}}(\mathrm{GPM}_i, u_{i+1})$ als ein Auswahlkriterium dienen zu können. Um den Effekt der Hybriden Abtaststrategie zu zeigen, werden die Hybride Abtaststrategie und der MI-Ansatz verwendet, um Abtastpunkte für die Approximation der Testfunktion in Abbildung 4.2 zu erzeugen. In Abbildung 4.12 wird der Verlauf der Modellgenauigkeit abhängig von der Anzahl der Abtastpunkte dargestellt. Außerdem werden in Abbildung 4.13 die Verteilungen der gesammelten Abtastpunkte im Eingangsraum aufgezeigt.

Der MI-Ansatz wird als das Kriterium für *Exploration* ausgewählt, weil er im Vergleich mit dem Entropieansatz einerseits eine bessere Raumabdeckung liefern kann ([Kra08]). Andererseits, was auch sehr wichtig ist, kann der MI-Ansatz die Unsicherheit $\sigma^2_{\mathrm{MP}_{i+1}}$ des Abtastpunkts als ein Qualitätsmerkmal besser ins Auswahlkriterium integrieren. Nach Inspektion der Informationsfunktion des MI-Ansatzes (Formel (4.29)) und des Entropieansatzes (Formel (4.20)) stellt sich schnell heraus, dass die Informationsfunktion des Entropieansatzes positiv mit $\sigma^2_{\mathrm{MP}_{i+1}}$ korreliert ist, während sich die Informationsfunktion des MI-Ansatzes

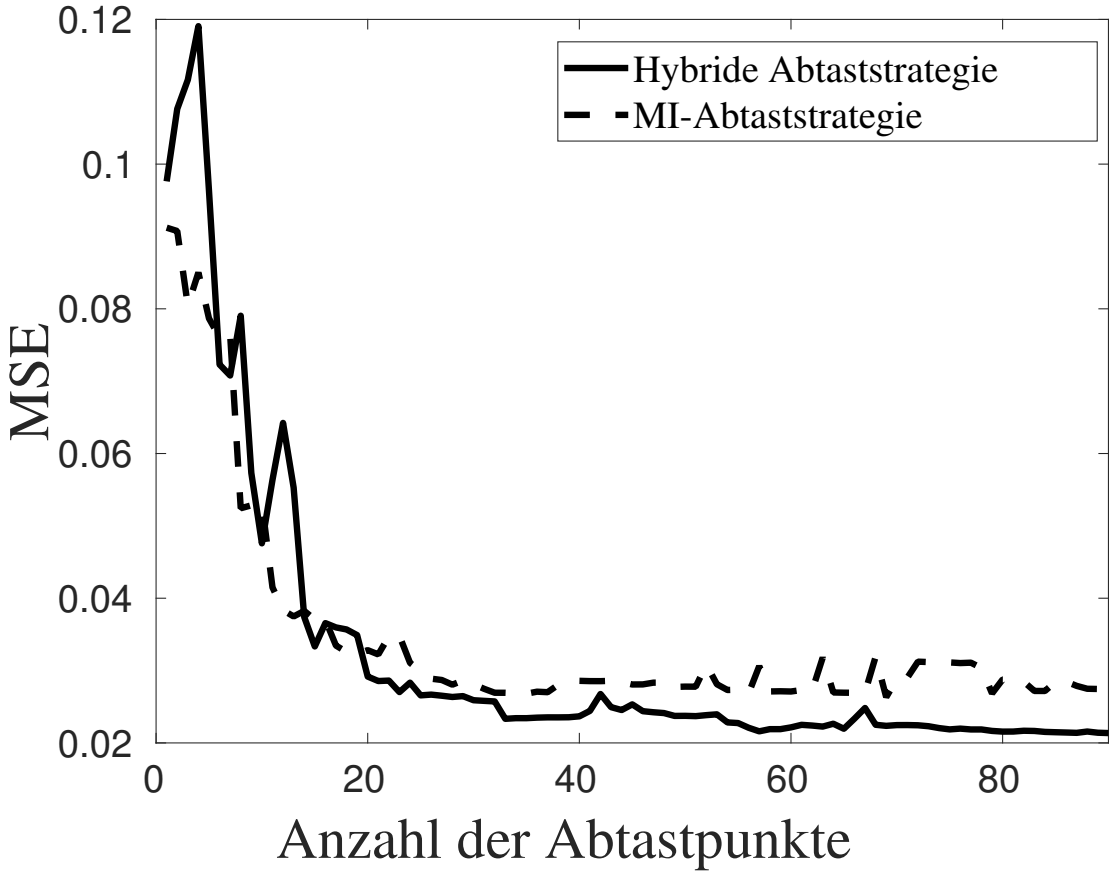


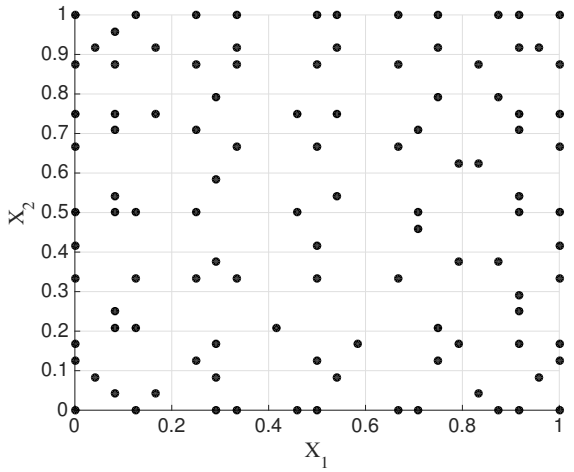
Abbildung 4.12: Vergleich der Abtaststrategie bezüglich der erreichten Modellgenauigkeit.

näherungsweise reziprok zu $\sigma^2_{\mathrm{MP}_{i+1}}$ verhält. Offensichtlich passt der MI-Ansatz besser zu unserer intuitiven Vorstellung über die Behandlung von $\sigma^2_{\mathrm{MP}_{i+1}}$ bei der Versuchsplanung. In Abbildung 4.14 wird dieser Zusammenhang zwischen dem Informationsgehalt eines Abtastpunkts und seiner Varianz $\sigma^2_{\mathrm{MP}_{i+1}}$ dargestellt.

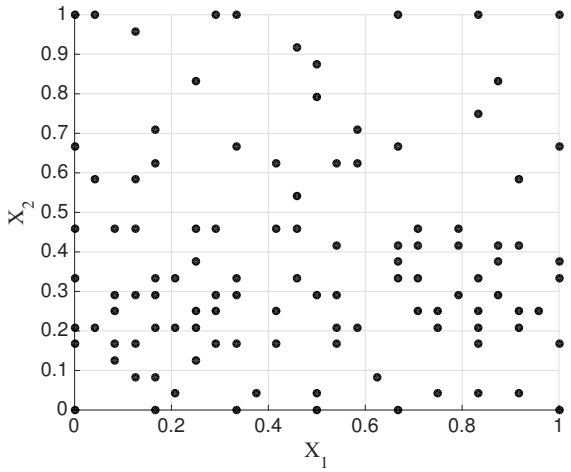
Bemerkenswert ist, dass wir im Fall der Applikation eines einzelnen *Grey-Box*-Modells $\sigma^2_{\mathrm{MP}_{i+1}}$ bei der Versuchsplanung nicht beeinflussen oder verstellen können, da die $\sigma^2_{\mathrm{MP}_{i+1}}$ von der Sensortoleranz der Messgrößen $\boldsymbol{x}$ und y in Formel (4.1) und dem Arbeitspunkt der Formel (4.1) bestimmt werden. Jedoch wird sich dies ändern, wenn es sich um die Applikation eines **Netzwerks** von *Grey-Box*-Modellen handelt, was in Abschnitt 4.4 erläutert wird.

4.3.3 Automatisches Stoppen der Vermessung

Bei der Automatisierung des Vermessungsvorgangs spielt ein geeignetes automatisches Stopp-Kriterium (ASK) eine wichtige Rolle. Im Verlauf der Vermessung ändern sich sowohl das gelernte Gaußprozessmodell als auch die damit generierten KF/KL. Wenn der Algorithmus richtig funktioniert, sollte sich das Maß der Änderung des Gaußprozessmodells und der KF/KL von Iteration zu Iteration reduzieren. Ein zielführendes ASK sollte



(a) Verteilung mittels des MI-Ansatzes.



(b) Verteilung mittels der Hybriden Abtaststrategie.

Abbildung 4.13: Vergleich der Abtaststrategien bezüglich der Verteilung der Abtastpunkte; die Verteilung mittels der Hybriden Abtaststrategie passt offensichtlich besser zur Eigenschaft der Testfunktion in Abbildung 4.2.

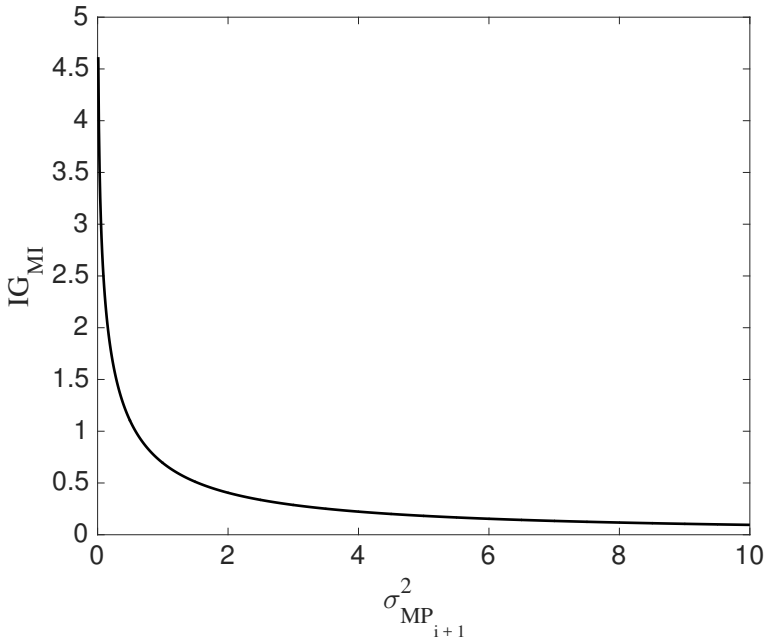


Abbildung 4.14: Schematische Darstellung des Zusammenhangs zwischen der Unsicherheit eines Applikationsmesspunkts und seinem Informationsgehalt, berechnet mit dem MI-Ansatz; das Bild basiert auf der Formel (4.29).

in der Lage sein, eine stabile Phase der Änderung zu erkennen, wo das Hinzufügen weiterer Abtastpunkte keinen signifikanten Unterschied mehr machen wird. Da die KF/KL das Endprodukt des Algorithmus sind, wird beim ASK hauptsächlich die Änderung rKL der KF/KL während des Vermessungsvorgangs untersucht. Als zusätzliche Informationsquelle wird die Änderung des Gaußprozessmodells verwendet, um Extremfälle des Mo-

delltrainings, z. B. *Overfitting*, zu erkennen. In Abbildung 4.15 ist das in der vorliegenden Arbeit eingesetzte ASK dargestellt.

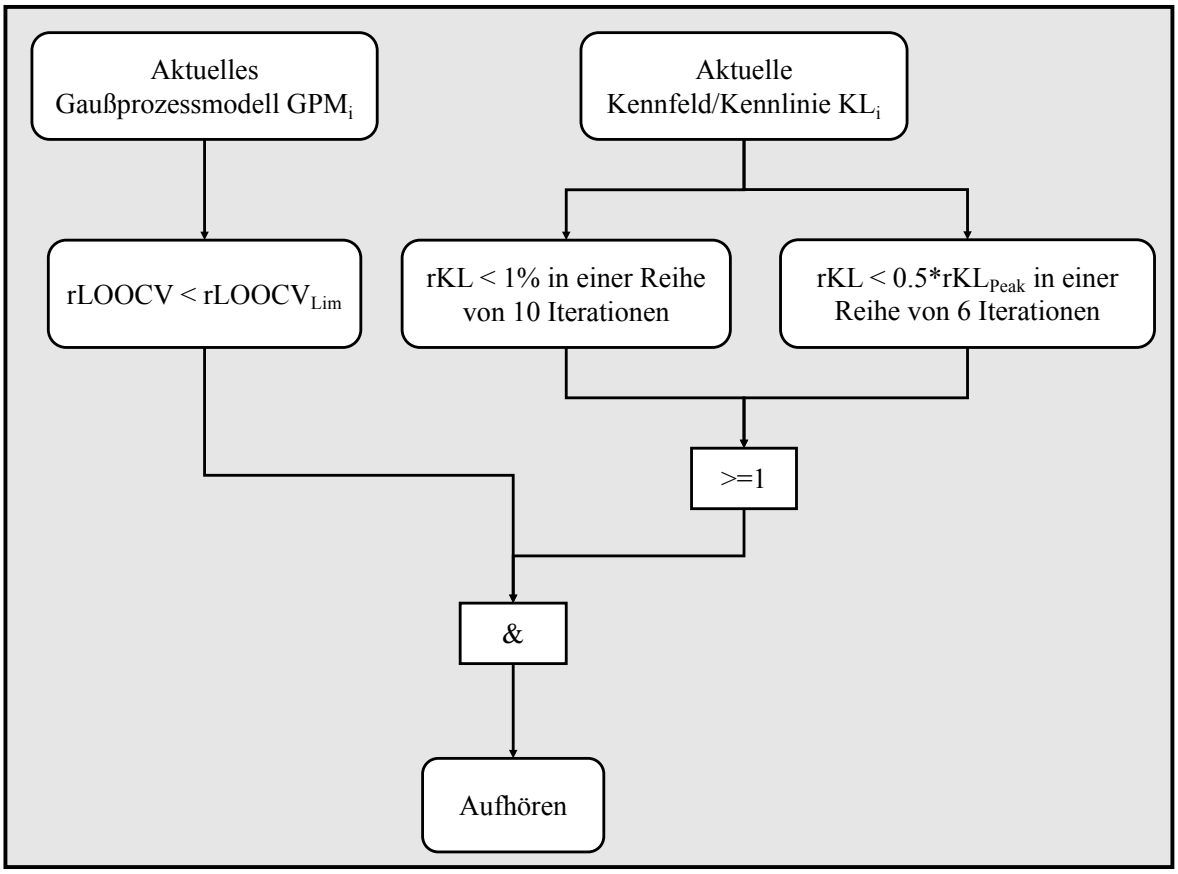


Abbildung 4.15: Signalfluss und Logik des ASK; das Zeichen & steht für die Und-Verknüpfung und das Zeichen >= für die Oder-Verknüpfung.

Die Logik des ASK besteht aus zwei Zweigen, jeweils beruhend auf dem aktuellen Gaußprozessmodell und den KF/KL. Im ersten Zweig wird aufgrund des aktuellen Gaußprozessmodells der relative Leave-One-Out-Cross-Validation-Fehler rLOOCV nach folgender Definition berechnet:

$$\mathrm{rLOOCV} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \left| \frac{\mathrm{MP}_i - \hat{A}_{\backslash i}}{\mathrm{MP}_i} \right| \tag{4.32}$$

Dabei wird jedes Mal ein Applikationsmesspunkt $D_i = [u_i, \mathrm{MP}_i, \sigma^2_{\mathrm{MP}_i}]$ aus der Menge von bislang gesammelten N Applikationsmesspunkten ausgenommen. Anschließend wird aufgrund der übriggebliebenen $N-1$ Applikationsmesspunkte der Modellwert $\hat{A}_{\backslash i}$ an der Stelle u_i erneut berechnet und mit dem Messwert MP_i verglichen. Für alle Messpunkte wird derselbe Prozess vollzogen und der daraus resultierende relative Fehler dann mit einem Grenzwert verglichen, der mit der Formel

$$\mathrm{rLOOCV}_{\mathrm{Lim}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \frac{\sigma_{\mathrm{MP}_i}}{|\mathrm{MP}_i|} \tag{4.33}$$

berechnet wird, wobei der Term σ_{MP_i} für die Standardabweichung des Messwerts MP_i steht. Das Ziel des ersten Zweigs ist zu ermitteln, ob das GPM richtig gefittet wird oder nicht. Wenn die Grenze überschritten wird, entsteht die Gefahr, dass *Overfitting* oder *Underfitting* stattfindet.

Beim zweiten Zweig wird versucht, eine stabile Änderung der KF/KL zu erkennen. Die dabei verwendete Metrik ist die relative Änderung rKL der Werte an den Stützstellen der KF/KL im Verlauf der Vermessung:

$$\mathrm{rKL}_j = \frac{|\mathrm{KL}_j - \mathrm{KL}_{j-1}|}{|\mathrm{KL}_{j-1}|} \tag{4.34}$$

wobei der Term KL_j für den Wert an den Stützstellen in j-ter Iteration steht. Um eine stabile Phase der Änderung zu erkennen, wird hier folgender heuristischer Ansatz herangezogen: Eine Phase der Änderung wird als stabil eingestuft, wenn eine der beiden Bedingungen erfüllt wird:

- Die relative Änderung rKL der KL bleibt kleiner als 1% in einer Reihe von mehr als 10 Iterationen.
- Die relative Änderung rKL der KL ist kleiner als $0.5^*\mathrm{rKL}_{\mathrm{peak}}$ in einer Reihe von mehr als 6 Iterationen, wobei $\mathrm{rKL}_{\mathrm{peak}}$ für den nächstliegenden Gipfel der rKL steht.

Die Parameter 6, 10, 0,5 ergaben sich nach dem Prinzip „Trial and Error“.

4.4 Optimale Applikation eines Netzwerks von Submodellen

Jetzt sind wir in der Lage, ein einzelnes *Grey-Box*-Modell automatisch und mit möglichst geringem Messaufwand zu applizieren. Allerdings ist die Situation komplexer, wenn man versucht, ein Netzwerk von *Grey-Box*-Modellen zu applizieren, vor allem wenn diese *Grey-Box*-Modelle physikalisch miteinander verbunden sind, weil man sonst nur den Algorithmus aus Abschnitt 4.1 bei allen *Grey-Box*-Modellen parallel anzuwenden bräuchte. Zunächst wird in Abschnitt 4.4.1 versucht, die Besonderheit bei der Applikation eines Netzwerks von *Grey-Box*-Modellen zu verdeutlichen. In Abschnitt 4.4.2 wird sodann der Ansatz für ein einzelnes *Grey-Box*-Modell erweitert, um mit der beschriebenen Besonderheit umgehen zu können.

4.4.1 Detaillierte Problembeschreibung

Wenn statt eines einzelnen *Grey-Box*-Modells ein Netzwerk von *Grey-Box*-Modellen zu applizieren ist, wird das Problem komplizierter. In Abbildung 4.16 wird schematisch ein Netz-

werk von drei *Grey-Box* Submodellen (SM) dargestellt. Das Netzwerk lässt sich mit folgendem Gleichungssystem beschreiben[26]:

$$\begin{aligned}
y^1 &= f^1(\mathbf{x}^1, A^1, Q^1) \\
A^1 &= \mathrm{EM}^1(\mathbf{u}^1) \\
y^2 &= f^2(\mathbf{x}^2, A^2, Q^2) \\
A^2 &= \mathrm{EM}^2(\mathbf{u}^2) \\
y^3 &= f^3(\mathbf{x}^3, A^3, Q^3) \\
A^3 &= \mathrm{EM}^3(\mathbf{u}^3) \\
0 &= \boldsymbol{G}(y^1, y^2, y^3, \mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2, \mathbf{x}^3, A^1, A^2, A^3, Q^1, Q^2, Q^3)
\end{aligned} \tag{4.35}$$

Jedes Submodell SM besteht aus physikalischen Gleichungen $y^{\mathrm{SM}} = f^{\mathrm{SM}}(\mathbf{x}^{\mathrm{SM}}, A^{\mathrm{SM}}, Q^{\mathrm{SM}})$ mit ihrem Eingang $\mathbf{x}^{\mathrm{SM}}$ und einem gesuchten empirischen Modell $\mathrm{EM}^{\mathrm{SM}}(\mathbf{u})$ mit seinem Eingang $\mathbf{u}^{\mathrm{SM}}$. Die letzte Zeile in Formel (4.35) steht für die physikalischen Verbindungen zwischen den Submodellen. Konkret bedeuten die physikalischen Verbindungen bei der Applikation, dass die Änderung des Eingangs[27] eines SM, z. B. $\mathbf{u}^1$, nicht nur die Systembeobachtungen $\mathbf{x}^1$ und y^1 in SM_1, sondern auch die Systembeobachtungen im gesamten Netzwerk $\mathbf{X} = [\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2, \mathbf{x}^3]$ und $\mathbf{Y} = [y^1, y^2, y^3]$ beeinflussen werden. D.h. eine Änderung am Eingang eines einzelnen Submodells kann auch zu Verschiebungen der Arbeitspunkte aller Submodelle im Netzwerk führen. Durch das Gleichungssystem $\boldsymbol{G}$ kann man die Änderung der gesamten Systembeobachtungen berechnen, die von der Änderung der Systemeingänge ausgelöst wird.

Bei der Applikation eines Netzwerks von Submodellen ähnelt der Applikationsprozess dem Arbeitsprozess für die Applikation eines einzelnen *Grey-Box*-Modells in Abschnitt 4.1. Man verstellt den Eingangsvektor $\mathbf{u}$ der empirischen Modelle, damit die Systembeobachtungen $\boldsymbol{D}_{\mathrm{Sen}}$ gemessen werden. Basierend auf $\boldsymbol{D}_{\mathrm{Sen}}$ werden die Applikationsmesspunkte $\boldsymbol{D}_{\mathrm{App}}$ berechnet, um das jeweilige empirische Modell $A = \mathrm{EM}^{\mathrm{SM}}(\mathbf{u})$ zu ermitteln. *Die Besonderheit bei der Applikation eines Netzwerks von Submodellen besteht darin, dass man bei der Versuchsplanung nicht nur den Eingang, sondern auch die Qualität eines Applikationsmesspunkts bestimmen kann.* Wie bereits in Abschnitt 4.3.2 diskutiert wurde, spielt die Unsicherheit σ^2_{MP} eines Applikationsmesspunkts eine sehr wichtige Rolle bei der Bestimmung seines Informationsgehalts. Während bei der Applikation eines einzelnen *Grey-Box*-Modells σ^2_{MP} nicht zu beeinflussen ist, kann man hier σ^2_{MP} durch die Änderung der Systembeobachtungen indirekt beeinflussen. Wenn man z.B. ein kleines σ^2_{MP} bei SM_1 anstrebt, kann man dies eventuell durch die Anpassung der Eingänge bei SM_2 und SM_3 erreichen, die zu einer Änderung der Systembeobachtung y^1 und $\mathbf{x}^1$ bei SM_1 führen werden. Diese Überlegung und

[26] Der Hochindex steht für die Zugehörigkeit zum entsprechenden Submodell.

[27] In unserem Anwendungsfall, Messpunkte für die Applikation eines Netzwerks von Submodellen zu erzeugen, kann man nur die Eingänge der empirischen Modelle verstellen.

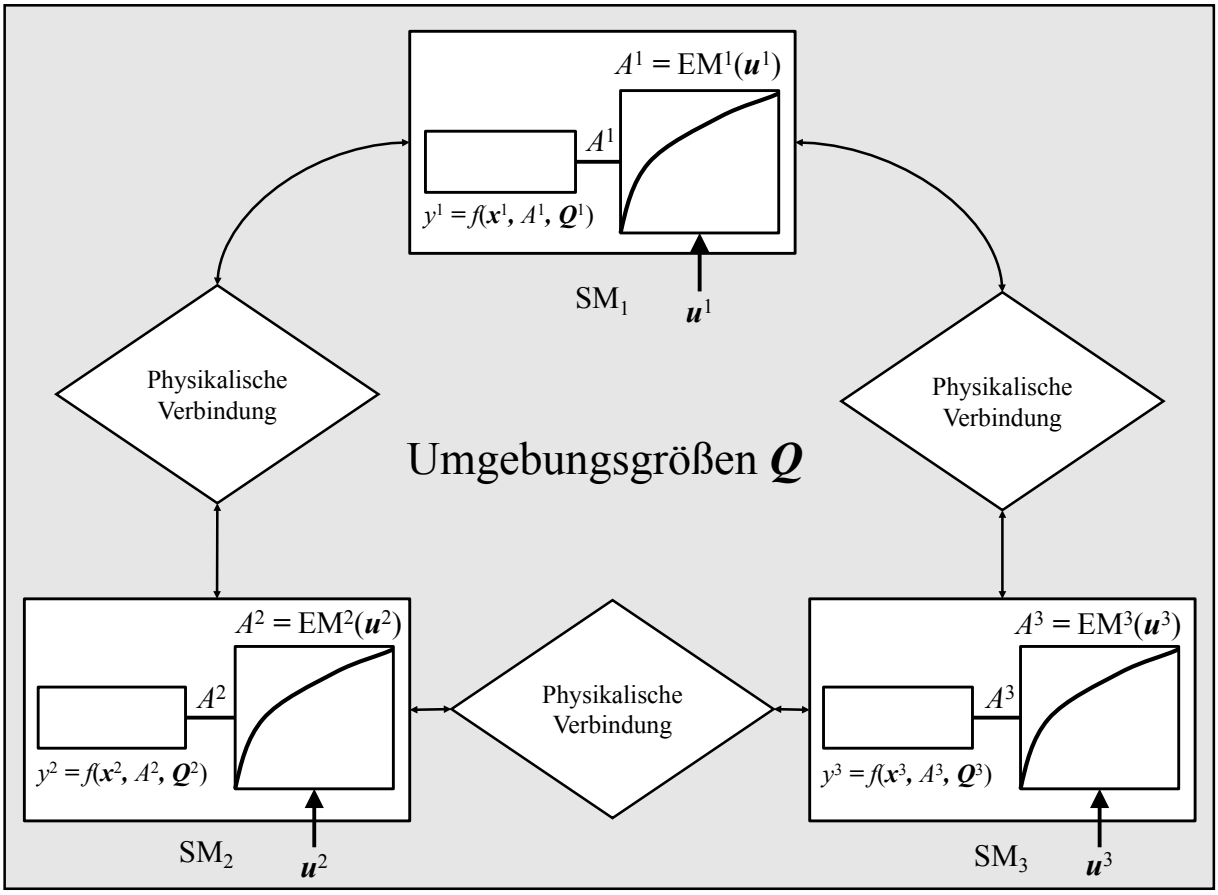


Abbildung 4.16: Schematische Darstellung der Struktur eines Netzwerk aus drei *Grey-Box*-Modellen; zu beachten ist, bei der Applikation dürfen nur die Eingänge **u** der empirischen Modelle verstellt werden.

die Vorgehensweise ergeben natürlich nur Sinn, wenn der relevante Prozess nichtlinear ist, was in den praktischen Aktivitäten für die Applikation auch häufig der Fall ist. Wenn beispielsweise bei der Applikation des ND-AGR-Ventils ein zu geringes Druckgefälle zu einer großen Unsicherheit über die effektive Fläche führt, kann das Schließen der Abgasklappe das Druckgefälle über das ND-AGR-Ventil erhöhen, damit die effektive Fläche mit einer kleineren Unsicherheit geschätzt werden kann. Wenn man also hierbei versucht, eine Informationsfunktion abhängig vom Versuchsplan wie in Formel (4.3) zu erstellen, muss man statt des lokalen Eingangs den globalen Eingangsvektor aus allen Submodellen als unabhängige Variable nehmen. Dabei bedeutet der lokale Eingang den Eingang des jeweiligen empirischen Modells, wie $\mathbf{u}^1$ in Abbildung 4.16; mit dem globalen Eingangsvektor wird die Vereinigungsmenge aller lokalen Eingänge gemeint.

Das Ziel dieses Abschnitts ist die Applikation der empirischen Modelle von allen Submodellen, und zwar automatisiert und mit möglichst geringem Messaufwand. Es wird also nach einem optimalen globalen Versuchsplan $\boldsymbol{U}^*$ für das gesamte System gesucht, der die Summe der Informationsgehalte aus allen Submodellen maximieren kann. Mit folgender Formel lässt sich das Optimierungsproblem mathematisch beschreiben:

$$\boldsymbol{U}^* = \arg\max_{\boldsymbol{U}} \sum_{i=1}^{m} \mathrm{IG}_{\mathrm{SM}_i}(\boldsymbol{U}) \tag{4.36}$$

Dabei steht m für die Anzahl der Submodelle. Der globale Versuchsplan $\boldsymbol{U}$ setzt sich aus den lokalen Versuchsplänen $\boldsymbol{U}^i$ für die einzelnen Submodelle SM_i zusammen, und zwar gilt $\boldsymbol{U} = [\boldsymbol{U}^1, \boldsymbol{U}^2, \cdots, \boldsymbol{U}^m]$. Die Informationsfunktion $\mathrm{IG}_{\mathrm{SM}_i}(\boldsymbol{U})$ liefert den Informationsgehalt, den der globale Versuchsplan $\boldsymbol{U}$ für die Applikation von SM_i bereitstellt.

4.4.2 Applikation eines Netzwerks von Submodellen

In diesem Abschnitt wird ein Algorithmus vorgestellt, welcher der Besonderheit beim Fall der Applikation eines Netzwerks von Submodellen Rechnung trägt. Ähnlich wie beim Algorithmus für ein einzelnes *Grey-Box*-Modell erfolgt die Applikation eines Netzwerks von Submodellen ebenfalls im Rahmen der sequentiellen Versuchsplanung. Die sequentielle Versuchsplanung besteht aus zwei Phasen:

Phase I: Anfängliche Experimente

In dieser Phase werden die empirischen Modelle aller Submodelle mit äquidistantem anfänglichem Versuchsplan $\boldsymbol{U}_0 = [\boldsymbol{U}_0^1, \boldsymbol{U}_0^2, \cdots, \boldsymbol{U}_0^m]$ identifiziert, wobei der Index 0 für die 0-te Iteration und der Term $\boldsymbol{U}_0^1$ für den anfänglichen Versuchsplan für SM_1 steht. Der äquidistante Versuchsplan für eindimensionale empirische Modelle enthält erfahrungsgemäß 5 bis 10 Messpunkte, für zweidimensionale empirische Modelle sollte ein 5×5-Gitter reichen, z. B. für SM_1 $\boldsymbol{U}_0^1 = [u_{0,1}^1, u_{0,2}^1, \cdots, u_{0,k_0^1}^1]$, wobei k_0^1 für die Anzahl der Messpunkte im anfänglichen Versuchsplan $\boldsymbol{U}_0^1$ für SM_1 steht. Zusammenfassend sehen die anfänglichen Versuchspläne für m Submodelle wie folgt aus:

$$\boldsymbol{U}_0 = \begin{pmatrix} u_{0,1}^1 & u_{0,2}^1 & \cdots & u_{0,k_0^1}^1 \\ u_{0,1}^2 & u_{0,2}^2 & \cdots & u_{0,k_0^2}^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{0,1}^m & u_{0,2}^m & \cdots & u_{0,k_0^m}^m \end{pmatrix} \tag{4.37}$$

Die Auswahl des äquidistanten Versuchsplans als anfänglicher Versuchsplan wurde schon in Abschnitt 4.3 begründet. Der anfängliche Versuchsplan soll den gesamten Eingangsraum abdecken, damit in der Phase II keine Extrapolation im empirischen Modell notwendig ist. Nachdem der in Formel (4.37) gezeigte Versuchsplan bestimmt wurde, werden Messwerte aller relevanten Systemgrößen $\mathbf{x}$ und Systemausgänge y für jedes Submodell gesammelt, um die Menge der anfänglichen Applikationsmesspunkte $\boldsymbol{D}_{\mathrm{App},0}$ zu generieren. Die Berechnung erfolgt genauso wie in Abschnitt 4.1. Anhand von $\boldsymbol{D}_{\mathrm{App},0}$ wird für jedes empirische Modell das anfängliche Gaußprozessmodell $\mathbf{GPM}_0 = [\mathrm{GPM}_0^1, \cdots, \mathrm{GPM}_0^{\mathrm{m}}]$ mit der Fehlerschranke $\sigma^2_{\mathbf{GPM}_0} = [\sigma^2_{\mathrm{GPM}_0^1}, \cdots, \sigma^2_{\mathrm{GPM}_0^{\mathrm{m}}}]$ erstellt.

Phase II: Experimente mit adaptiver Versuchsplanung

Diese Phase besteht aus mehreren Iterationen. Die Anzahl der Iterationen wird nicht a priori vorgegeben, sondern vom ASK bestimmt. In jeder Iteration wird versucht, die optimale Kombination der lokalen Eingänge zu finden, welche die Summe der Informationsgehalte für alle empirischen Modelle maximieren kann. Für die (j+1)-te Iteration kann das entsprechende Optimierungsproblem wie folgt geschrieben werden:

$$\boldsymbol{U}_{j+1}^{*} = \arg\max_{\boldsymbol{U}_{j+1}} \sum_{i=1}^{m} \mathrm{IG}_{\mathrm{SM}_i}(\mathbf{GPM}_j, \boldsymbol{U}_{j+1}) \tag{4.38}$$

Dabei gilt für die Kombination der Eingänge $\boldsymbol{U}_{j+1} = [u_{j+1}^1, u_{j+1}^2, \cdots, u_{j+1}^m]$. Es ist zu beachten, dass es in Formel (4.38) um den Versuchsplan für eine Iteration geht. Er darf nicht verwechselt werden mit dem Versuchsplan in Formel (4.36), bei dem es sich um den vollständigen Versuchsplan handelt. Wie in Abschnitt 4.3.2 angedeutet wurde, hängt der Informationsgehalt eines Applikationsmesspunkts von drei Faktoren ab: der Position im Eingangsraum, dem Modellverhalten in der Nähe und der Unsicherheit des Applikationsmesspunkts. Während der erste und zweite Faktor trivial bestimmt oder berechnet werden können, lässt sich die Unsicherheit des Applikationsmesspunkts erst schätzen, wenn der Arbeitspunkt des relevanten Prozesses bekannt ist und somit die Linearisierung daran möglich wird. In diesem Abschnitt erfolgt die Schätzung der Unsicherheit des Applikationsmesspunkts durch die folgenden zwei Schritte:

1. Zunächst kann aufgrund der ausgewählten Kombination von Eingängen $\boldsymbol{U}_{j+1}$ und der Menge der aktuellen Gaußprozessmodelle $\mathbf{GPM}_j$ die Menge der Applikationsparameter $\boldsymbol{A}_{j+1}$[28] berechnet werden. Anschließend werden mit Hilfe der physikalischen Verbindungen zwischen den Submodellen, $\boldsymbol{G}$ in Formel (4.35), die Systembeobachtungen $\boldsymbol{D}_{\mathrm{Sen,Pre}} = [\mathbf{X}_{j+1}, \mathbf{Y}_{j+1}]$ berechnet, die durch $\boldsymbol{U}_{j+1}$ erzeugt werden, wobei gilt $\mathbf{X}_{j+1} = [\mathbf{x}_{j+1}^1, \mathbf{x}_{j+1}^2, \cdots, \mathbf{x}_{j+1}^m]$ und $\mathbf{Y}_{j+1} = [y_{j+1}^1, y_{j+1}^2, \cdots, y_{j+1}^m]$. Der Index **Pre** deutet an, dass es hier nicht um reale, sondern prädizierte Systembeobachtungen geht. In einem weiteren Schritt können die prädizierten Systembeobachtungen als Arbeitspunkte der jeweiligen nichtlinearen Prozesse dienen.

2. Erst in diesem Schritt wird richtig versucht, die Unsicherheit $\sigma^2_{\boldsymbol{A}_{j+1}} = [\sigma^2_{A^1_{j+1}}, \cdots, \sigma^2_{A^m_{j+1}}]$ der Applikationsmesspunkte zu schätzen, und zwar bevor die Experimente durchgeführt werden. Für die Bestimmung der $\sigma^2_{\boldsymbol{A}_{j+1}}$ kann man auf der einen Seite die relevanten Prozessgleichungen an den prädizierten Arbeitspunkten linearisieren und daraufhin die $\sigma^2_{\boldsymbol{A}_{j+1}}$ mithilfe der Regel der Fehlerfortpflanzung berechnen. Auf der anderen Seite können die Fehlerschranken $\sigma^2_{\mathbf{GPM}_{j+1}}$ der aktuellen Gaußprozessmodelle

[28] $\boldsymbol{A}_{j+1}$ wird ab sofort als die a-priori-Schätzung der Applikationsparameter im Kalman-Filter benutzt. Deswegen gilt $\boldsymbol{A}_{j+1,\mathrm{Pri}} = \boldsymbol{A}_{j+1}$.

als eine andere Informationsquelle für $\sigma^2_{A_{j+1}}$ verwendet werden. Dazu wird ein Erweitertes Kalman-Filter (EKF) eingesetzt, um die zwei Informationsquellen zu kombinieren und zu versuchen, eine bessere Schätzqualität zu erzielen. Im Rahmen des EKF-Verfahrens lässt sich zunächst die Änderung des gesamten Systems von der j-ten zur $(j+1)$-ten Iteration beschreiben durch

$$\boldsymbol{s}_{j+1} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{s}_j) + \boldsymbol{w}, \quad p(\boldsymbol{w}) \sim \mathcal{N}(0, \boldsymbol{Q}) \tag{4.39}$$

$$\boldsymbol{z}_{j+1} = \boldsymbol{h}(\boldsymbol{s}_{j+1}) + \boldsymbol{v}, \quad p(\boldsymbol{v}) \sim \mathcal{N}(0, \boldsymbol{R}) \tag{4.40}$$

wobei der Zustandsvektor $\boldsymbol{s} = \mathbf{X} \cup \mathbf{A}$ ist und der Ausgangsvektor $\boldsymbol{z} = \mathbf{X} \cup \mathbf{Y}$. Die Formel (4.40) ist die Beobachtungsgleichung, wobei der Term $\boldsymbol{R}$ für die Kovarianzmatrix der Messrauschen steht: $\boldsymbol{R} = \sigma^2_z$. Die Schätzung der Systemzustände und ihrer Kovarianzmatrix erfolgt nach dem Berechnungsschema in [Sim06] in zwei Schritten:

(a) Prädiktionsschritt:

$$\hat{\boldsymbol{s}}_{j+1|j} = \boldsymbol{F}_j(\boldsymbol{s}_j) \tag{4.41}$$

$$\boldsymbol{P}_{j+1|j} = \boldsymbol{F}_j \boldsymbol{P}_{j|j} \boldsymbol{F}_j^T + \boldsymbol{Q} \tag{4.42}$$

wobei $\boldsymbol{F}_j$ für die Jacobi-Matrix des Übergangsmodells $\boldsymbol{f}$ in Formel (4.39) steht. Da es bei unserem Anwendungsfall um ein statisches Problem geht, ergibt sich $\boldsymbol{F}_j$ zu einer $|\boldsymbol{s}| \times |\boldsymbol{s}|$-Einheitsmatrix, wobei $|\boldsymbol{s}|$ für die Anzahl der Systemzustände steht. Außerdem sind $\boldsymbol{s}_j$ die a-priori-Systemzustände und $\boldsymbol{P}_{j|j}$ die a-priori-Kovarianzmatrix. $\boldsymbol{s}_j$ und $\boldsymbol{P}_{j|j}$ sind aus $\boldsymbol{D}_{\text{Sen,Pre}}$, $\mathbf{GPM}_j$ und $\sigma^2_{\mathbf{GPM}_j}$ zu berechnen.

(b) Korrekturschritt:

$$\hat{\boldsymbol{z}}_{j+1|j} = \boldsymbol{h}(\hat{\boldsymbol{s}}_{j+1|j}) \tag{4.43}$$

$$\boldsymbol{K}_{j+1} = \boldsymbol{P}_{j+1|j} \boldsymbol{H}_{j+1}^T (\boldsymbol{H}_{j+1} \boldsymbol{P}_{j+1|j} \boldsymbol{H}_{j+1}^T + \boldsymbol{R}) \tag{4.44}$$

$$\hat{\boldsymbol{s}}_{j+1|j+1} = \hat{\boldsymbol{s}}_{j+1|j} + \boldsymbol{K}_{j+1}(\boldsymbol{z}_{j+1} - \hat{\boldsymbol{z}}_{j+1|j}) \tag{4.45}$$

$$\boldsymbol{P}_{j+1|j+1} = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{K}_{j+1} \boldsymbol{H}_{j+1}) \boldsymbol{P}_{j+1|j} \tag{4.46}$$

Im Korrekturschritt werden die a-posteriori-Systemzustände $\hat{\boldsymbol{s}}_{j+1|j+1}$ und ihre Kovarianzmatrix $\boldsymbol{P}_{j+1|j+1}$ optimal in dem Sinn geschätzt, dass der *Mean Square Error* (MSE) des Schätzers mit der Definition ([Sim06])

$$\text{MSE} = E[(\boldsymbol{s} - \hat{\boldsymbol{s}}_{j+1|j+1})^2] \tag{4.47}$$

minimiert wird. Dabei steht $\boldsymbol{s}$ für die wahren Systemzustände. Die Jacobi-Matrix $\boldsymbol{H}_{j+1} = \frac{\partial \boldsymbol{h}(\hat{\boldsymbol{s}}_{j+1|j})}{\partial \boldsymbol{s}}$ des Beobachtungsmodells wird am prädizierten Arbeitspunkt

berechnet. Zu beachten ist, dass die Berechnung in Formel (4.45) vorerst nicht durchzuführen ist, da die realen Messwerte $\boldsymbol{z}_{j+1}$ noch fehlen. Jedoch ist die Schätzung der Kovarianzmatrix $\boldsymbol{P}_{j+1|j+1}$ schon machbar; dies ist auch der Schlüsselpunkt des gesamten Algorithmus.

Der a-posteriori-Kovarianzmatrix $\boldsymbol{P}_{j+1|j+1}$ ist die a-posteriori-Schätzung $\sigma^2_{\boldsymbol{A}_{j+1,\mathrm{Post}}}$ der Unsicherheit der Applikationsmesspunkte zu entnehmen. Wenn man $\sigma^2_{\boldsymbol{A}_{j+1,\mathrm{Post}}}$ in Formel (4.30) einsetzt, kann man die Informationsfunktion $\sum_{i=1}^{m} \mathrm{IG}_{\mathrm{SM}_i}(\mathbf{GPM}_j, \boldsymbol{U}_{j+1})$ in Formel (4.38) berechnen.

Anhand dieser Funktion kann das Optimierungsproblem in Formel (4.38) durch Gittersuche oder andere fortgeschrittene Optimierungsmethoden gelöst werden, was den optimalen Eingangsvektor für die nächste Iteration $\boldsymbol{U}^*_{j+1}$ liefert. Anschließend wird $\boldsymbol{U}^*_{j+1}$ in das System eingespeist, und dadurch werden Messpunkte gesammelt. Anhand der Messpunkte kann man nochmal das EKF benutzen (diesmal inklusive der Berechnung bei Formel (4.43)) und dadurch die Applikationsmesspunkte für alle empirischen Modelle erzeugen. Mittels der Applikationsmesspunkte werden dann die Gaußprozessmodelle aktualisiert und in KF/KL konvertiert. Phase II setzt sich fort, bis das ASK für alle empirischen Modelle erfüllt wird.

4.5 Optimale Auswahl der Messpunkte

Nachfolgend wird der in Abschnitt 4.4.2 vorgestellte Algorithmus an einem konkreten Beispiel eingesetzt, und zwar an der Applikation von folgenden drei empirischen Modellen der ECU-Funktionen im Diesel-Luftsystem:

- Effektive Fläche der Drosselklappe abhängig vom Tastverhältnis der Drosselklappe: $\mathrm{ar}_{\mathrm{TVA}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{TVA}})$ für die Modellierung des Drucks p_{21} stromaufwärts der Drosselklappe.
- Effektive Fläche des AGR-Ventils abhängig vom Tastverhältnis des AGR-Ventils: $\mathrm{ar}_{\mathrm{EGR}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{EGR}})$[29] für die Modellierung des Massenstroms $\mathrm{mf}_{\mathrm{EGR}}$ durch das AGR-Ventil.
- Luftaufwand abhängig von der Motordrehzahl und der Einspritzmenge: $\lambda(q, n_{\mathrm{Eng}})$ für die Modellierung der Zylinderfüllung $\mathrm{mf}_{\mathrm{Cyl}}$.

[29] Der dabei eingesetzte Versuchsmotor ist ein Dieselmotor, der nur mit HD-AGR ausgestattet wird. Deswegen werden die relevanten Signale im weiteren Verlauf dieses Kapitels mit EGR (statt EGRHP) bezeichnet.

Die relevanten Signale sind in Abbildung 4.17 aufgezeigt:

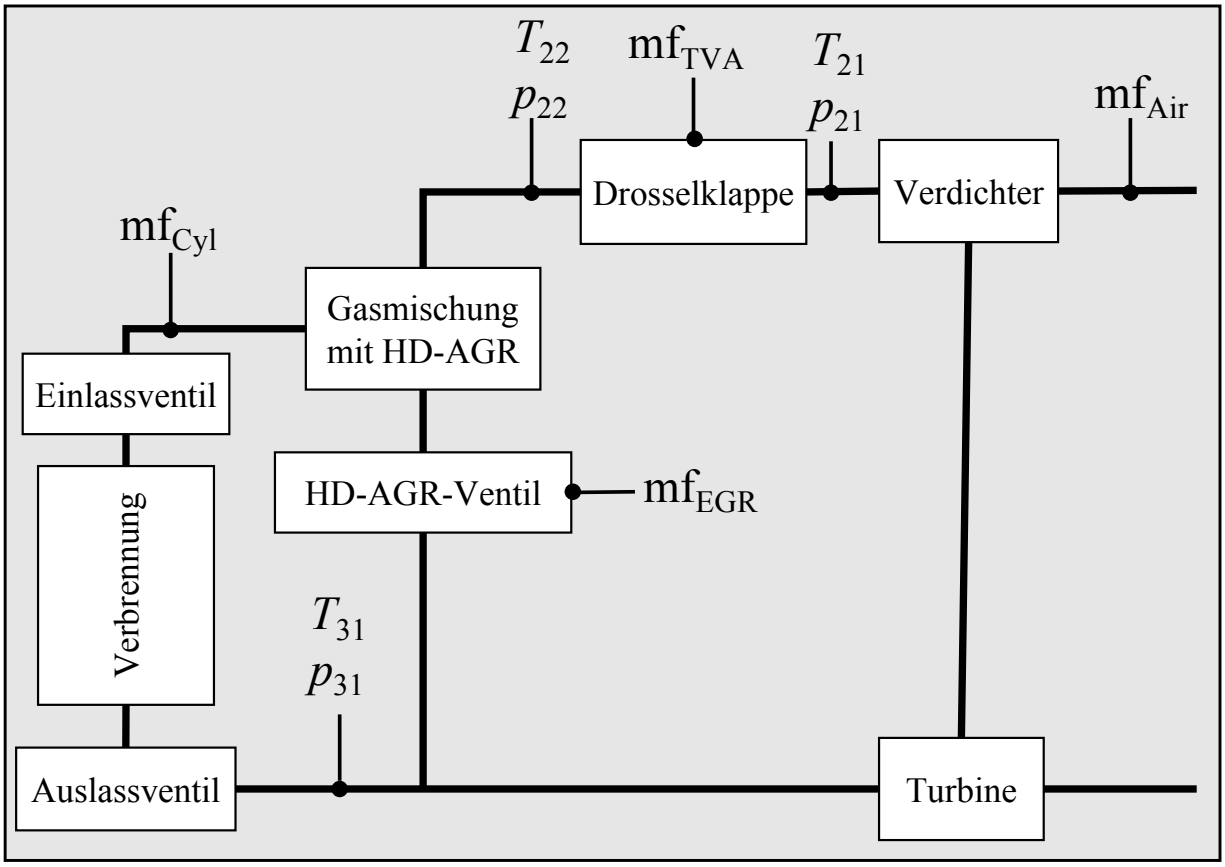


Abbildung 4.17: Struktur des relevanten Systems und physikalische Signale.

4.5.1 Problemstellung

Als konkrete Zielsetzung versuchen wir in diesem Anwendungsbeispiel, innerhalb eines bestehenden Datensatzes die kleinste Menge von Messpunkten zu finden, mit denen eine gleiche oder bessere Applikationsgüte[30] für die obigen drei empirischen Modelle erreicht werden kann. Die Applikationsgüte wird durch die Signalgüte beurteilt, welche die KF/KL anbieten können. Zum Beispiel wird die Applikationsgüte von KL $\mathrm{ar}_{\mathrm{TVA}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{TVA}})$ durch die Signalgüte von p_{21} bestimmt. Der bestehende Datensatz wird aus den Experimenten mit äquidistantem Versuchsplan erzeugt, der sogenannten Rastermessung. Dieser Ansatz wird in der Regel auch als das standardmäßige Verfahren für die Applikation von ECU-Funktionen im Diesel-Luftsystem verwendet. Bei der Rastermessung werden die Messpunkte äquidistant auf dem Motorbetriebsbereich verteilt, der sich auf die Motordrehzahl n_{Eng} und die Einspritzmenge q bezieht. Zu beachten ist, dass bei der Versuchsplanung der Rastermessung lediglich die Drehzahl und die Einspritzmenge vorgegeben werden. Die Tastverhältnisse von den Luftstellern, z. B. $\mathrm{pos}_{\mathrm{EGR}}$ und $\mathrm{pos}_{\mathrm{TVA}}$, werden vom Regelungssystem eingeregelt. Außerdem besteht eine vollständige Rastermessung normalerweise aus

[30] Der Referenzwert der Applikationsgüte wird mittels der gesamten Messdaten aus einer Rastermessung ermittelt.

zwei Vermessungssätzen, einmal mit AGR und einmal ohne AGR. In der Abbildung 1.8 sind die Datensätze aus der Rastermessung über dem Motorbetriebsbereich dargestellt. Nach der Definition in Abschnitt 1.2.2 geht es bei der Rastermessung in der Tat um einen Satz $\boldsymbol{D}_{\mathrm{Sen}}$ von Beobachtungsmesspunkten. Zum Beispiel beinhaltet der i-te Beobachtungsmesspunkt $D_{\mathrm{Sen},i}$ in $\boldsymbol{D}_{\mathrm{Sen}}$ den Eingangsvektor und die in Abbildung 4.17 dargestellten relevanten Systembeobachtungen, und zwar gilt $D_{\mathrm{Sen},i} = [q_i, n_{\mathrm{Eng},i}, p_{21,i}, T_{3,i}, \mathrm{mf}_{\mathrm{Air},i}, \cdots]$. Für die Applikation der oben genannten drei empirischen Modelle können Applikationsmesspunkte aufgrund von $\boldsymbol{D}_{\mathrm{Sen}}$ generiert werden. Dafür kommen folgende Gleichungen oder Prozesse in Frage:

$$\mathrm{mf}_{\mathrm{TVA}} = \sqrt{\frac{2}{RT_{21}}}\mathrm{ar}_{\mathrm{TVA}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{TVA}})p_{21}\Psi(\frac{p_{22}}{p_{21}}) \rightarrow \mathrm{ar}_{\mathrm{TVA}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{TVA}}) \tag{4.48}$$

$$\mathrm{mf}_{\mathrm{EGR}} = \sqrt{\frac{2}{RT_{31}}}\mathrm{ar}_{\mathrm{EGR}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{EGR}})p_{31}\Psi(\frac{p_{22}}{p_{31}}) \rightarrow \mathrm{ar}_{\mathrm{EGR}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{EGR}}) \tag{4.49}$$

$$\mathrm{mf}_{\mathrm{Cyl}} = \frac{p_{22}\lambda(q, n_{\mathrm{Eng}})}{R_{\mathrm{Air}}T_{22}} \rightarrow \lambda(q, n_{\mathrm{Eng}}) \tag{4.50}$$

Dabei steht R_{Air} für die Gaskonstante der Frischluft. Außerdem gelten für die Massenbilanz im System noch folgende Gleichungen:

$$\mathrm{mf}_{\mathrm{Cyl}} = \mathrm{mf}_{\mathrm{EGR}} + \mathrm{mf}_{\mathrm{Air}} \tag{4.51}$$

$$\mathrm{mf}_{\mathrm{TVA}} = \mathrm{mf}_{\mathrm{Air}} \tag{4.52}$$

Der Eingangsvektor dieses Experiments ist

$$\boldsymbol{U} = [\mathrm{pos}_{\mathrm{TVA}}, \mathrm{pos}_{\mathrm{EGR}}, n_{\mathrm{Eng}}, q] \tag{4.53}$$

Um die Effizienz des Algorithmus zu zeigen, wird die Hälfte des Vermessungsdatensatzes mit AGR mit der Hälfte des Vermessungsdatensatzes ohne AGR zu einem Trainingsdatensatz $\boldsymbol{D}_{\mathrm{Tra}}$ kombiniert. Der Rest der Messpunkte dient dann als Referenzdatensatz $\boldsymbol{D}_{\mathrm{Ref}}$. Mithilfe von $\boldsymbol{D}_{\mathrm{Tra}}$ werden auf der einen Seite die KF/KL für die drei gesuchten empirischen Modelle durch die konventionelle KQ-Methode generiert. Auf der anderen Seite versucht der entwickelte Algorithmus die Menge der informativsten Messpunkte aus $\boldsymbol{D}_{\mathrm{Tra}}$ zu finden, um KF/KL für dieselben empirischen Modelle zu produzieren. Der Trainingsdatensatz besteht wiederum aus Messpunkten $\boldsymbol{D}_{\mathrm{Tra,oA}}$ ohne AGR und Messpunkten $\boldsymbol{D}_{\mathrm{Tra,mA}}$ mit AGR. In Abbildung 4.18 wird die Zerlegung des Datensatzes aus der Rastermessung verdeutlicht.

4.5.2 Lösungsansatz und Ergebnisse

Als Lösungsansatz für die oben genannte Aufgabestellung werden die Informationsgehalte der Messpunkte im Trainingsdatensatz nach der Formel (4.30) berechnet und miteinander

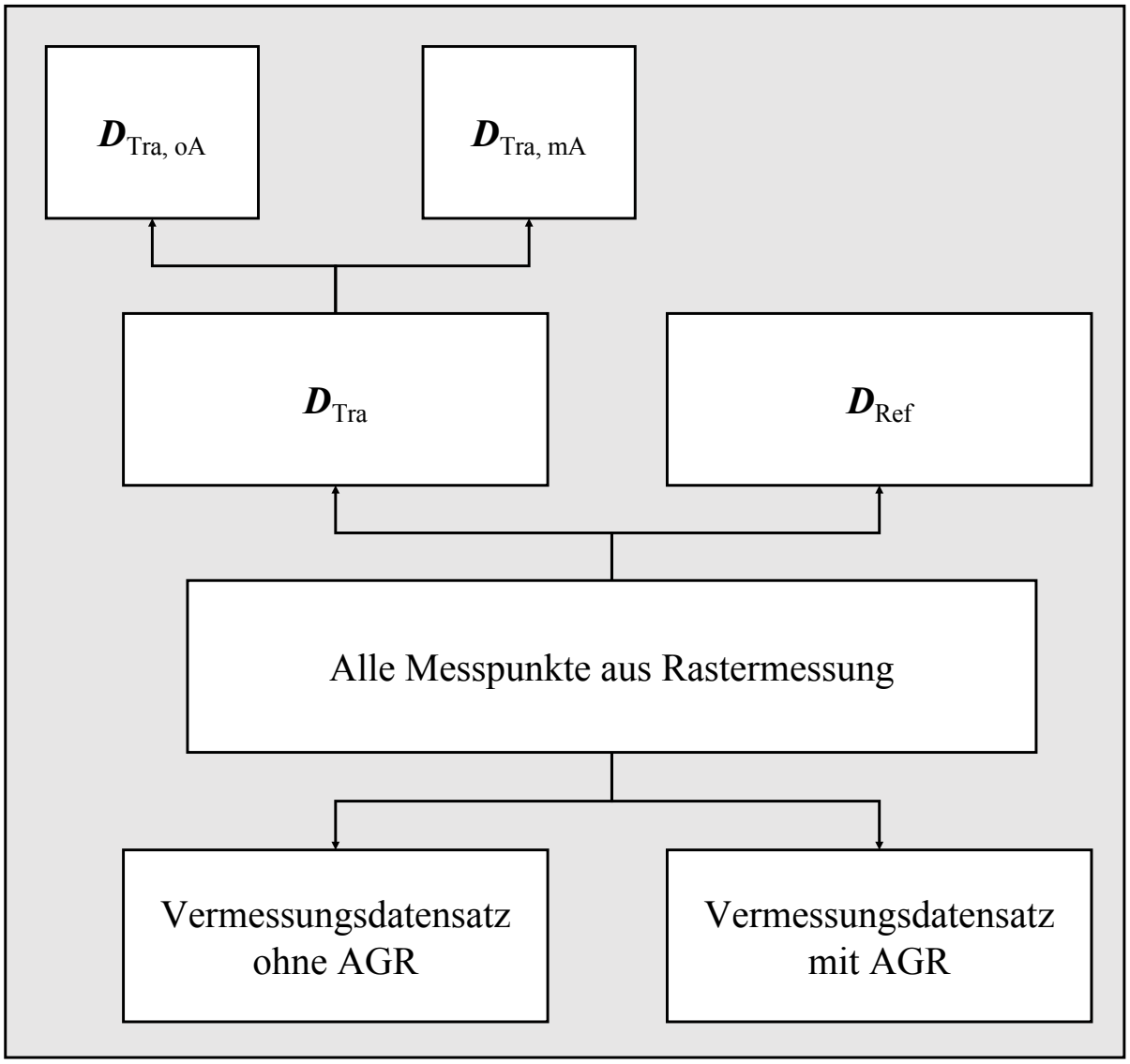


Abbildung 4.18: Zerlegung der Messpunkte aus der Rastermessung.

verglichen, um die informativsten Messpunkte auszuwählen. Jedoch können die Informationsgehalte erst durch die Formel (4.30) ermittelt werden, wenn die zugrundeliegenden Gaußprozessmodelle für die gesuchten empirischen Modelle vorhanden sind. Für die Erstellung der entsprechenden Gaußprozessmodelle wird das in Abschnitt 4.4.2 vorgestellte Verfahren der sequentiellen Versuchsplanung verwendet. Dem Prinzip der sequentiellen Versuchsplanung folgend, muss zunächst ein anfänglicher Versuchsplan erstellt werden, um die anfänglichen Gaußprozessmodelle für die drei gesuchten empirischen Modelle trainieren zu können.

Anfängliche Versuchsplanung

Für das empirische Modell $\lambda(q, n_{\text{Eng}})$ werden die anfänglichen Beobachtungsmesspunkte $\boldsymbol{D}_{\text{Tra,oA}}$ aus den Trainingsdatenpunkten ohne AGR ausgewählt, da nur bei ihnen die Zylinderfüllung mf_{Cyl} richtig gemessen werden kann. In diesem Fall gleicht die Zylinderfüllung dem Messwert der Frischluft durch den Heißfilm-Luftmassenmesser (HFM). Die Zylinder-

füllung kommt bei der Generierung der Applikationsmesspunkte für $\lambda(q, n_{\text{Eng}})$ mittels der Formel (4.50) zum Einsatz. Anschließend wird aufgrund der Applikationsmesspunkte das anfängliche Gaußprozessmodell $\text{GPM}_{\lambda,0}$ für $\lambda(q, n_{\text{Eng}})$ gefittet. Für das empirische Modell $\text{ar}_{\text{EGR}}(\text{pos}_{\text{EGR}})$ werden dann die anfänglichen Beobachtungsmesspunkte $\boldsymbol{D}_{\text{Tra,mA}}$ aus den Trainingsdatenpunkten mit AGR ausgewählt. Zu beachten ist, dass der Messwert des AGR-Massenstroms mf_{EGR} noch zusätzlich durch die Formel (4.51) generiert werden muss, wobei mf_{Cyl} aufgrund von $\text{GPM}_{\lambda,0}$ berechnet wird. Für das empirische Modell $\text{ar}_{\text{TVA}}(\text{pos}_{\text{TVA}})$ werden die anfänglichen Beobachtungsmesspunkte aus dem gesamten Trainingsdatensatz ausgesucht. Bei der Auswahl der anfänglichen Messpunkte sollte dafür gesorgt werden, dass die Eingangsräume der jeweiligen empirischen Modelle durch möglichst äquidistante Applikationsmesspunkte gefüllt werden. Auf Basis der ausgewählten anfänglichen Messpunkte wird die Menge $\mathbf{GPM}_0 = [\text{GPM}_{\text{ar}_{\text{TVA}},0}, \text{GPM}_{\text{ar}_{\text{EGR}},0}, \text{GPM}_{\lambda,0}]$ der anfänglichen Gaußprozessmodelle generiert. In den Abbildungen 4.19, 4.20 und 4.21 sind die anfänglichen Applikationsmesspunkte und die entsprechenden Gaußprozessmodelle dargestellt.

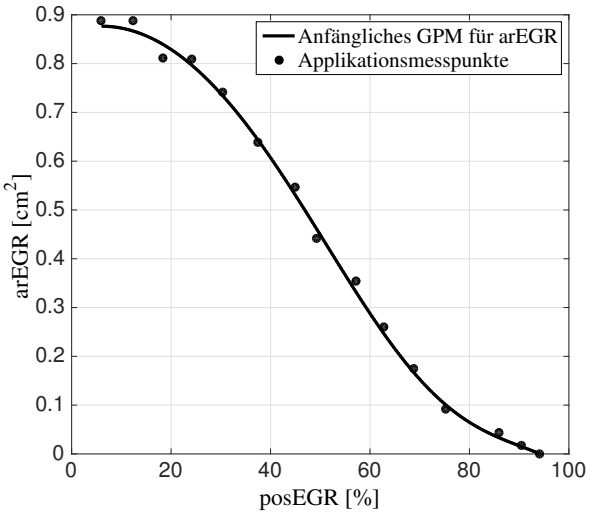


Abbildung 4.19: Anfängliche Applikationsmesspunkte $\boldsymbol{D}_{\text{App,ar}_{\text{EGR}},0}$ und das anfängliche Gaußprozessmodell für das empirische Modell $\text{ar}_{\text{EGR}}(\text{pos}_{\text{EGR}})$.

Adaptive Versuchsplanung

In jeder Iteration der adaptiven Versuchsplanung wird versucht, den Messpunkt, der die höchsten Informationsgehalte für die Applikation der drei gesuchten empirischen Modelle liefert, aus dem Trainingsdatensatz zu finden. Das entsprechende Optimierungsproblem sieht wie folgt aus:

$$D^*_{\text{Sen},j+1} = \underset{\mathcal{D}_{\text{Sen},j+1}}{\arg\max} \sum_{i=1}^{3} \text{IG}_{\text{SM}_i}(\mathbf{GPM}_j, D_{\text{Sen},j+1}) \tag{4.54}$$

Dabei steht der Term $\mathcal{D}_{\text{Sen},j+1}$ für die noch übriggebliebenen Messpunkte in $\boldsymbol{D}_{\text{Tra}}$. Um den Informationsgehalt des Messpunkts zu bestimmen, muss noch die Unsicherheit $\sigma^2_{\boldsymbol{A}_{j+1}} =$

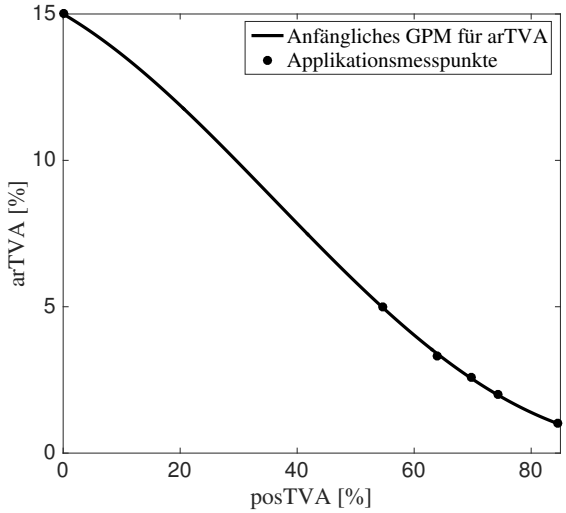


Abbildung 4.20: Anfängliche Applikationsmesspunkte $\boldsymbol{D}_{\mathrm{App,ar_{TVA},0}}$ und das anfängliche Gaußprozessmodell für das empirische Modell $\mathrm{ar_{EGR}}(\mathrm{pos_{TVA}})$.

$[\sigma^2_{\mathrm{ar_{TVA}},j+1}, \sigma^2_{\mathrm{ar_{EGR}},j+1}, \sigma^2_{\lambda,j+1}]$ der gesuchten Applikationsparameter mithilfe eines EKF geschätzt werden. Die Arbeitspunkte der Gleichungen (4.48), (4.49) und (4.50) müssen nicht prädiziert werden, wie es in Abschnitt 4.4.2 gefordert wird, sondern können direkt aus den Messwerten in $\boldsymbol{D}_{\mathrm{Tra}}$ herausgelesen werden. Aus Sicht des EKF kann das gesamte System durch folgende Formeln beschrieben werden:

$$\mathrm{mf_{Air}} = \frac{p_{22}\lambda}{R_{\mathrm{Air}}T_{22}} - \sqrt{\frac{2}{RT_{31}}}\mathrm{ar_{EGR}}p_{31}\Psi(\frac{p_{22}}{p_{31}}) \tag{4.55}$$

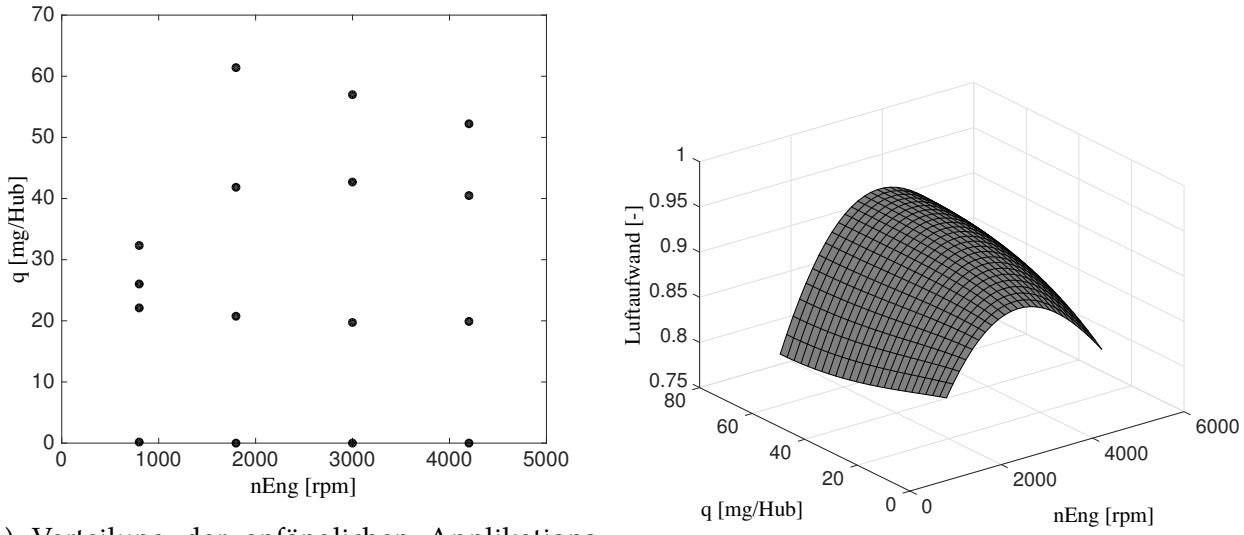
$$\mathrm{mf_{Air}} = \sqrt{\frac{2}{RT_{21}}}\mathrm{ar_{TVA}}p_{21}\Psi(\frac{p_{22}}{p_{21}}) \tag{4.56}$$

Der Zustandsvektor $\boldsymbol{s}$ und der Ausgangsvektor $\boldsymbol{z}$ sind

$$\boldsymbol{s} = [\mathrm{ar_{TVA}}, \mathrm{ar_{EGR}}, \lambda, p_{22}, T_{22}, T_{31}, p_{31}, T_{21}, p_{21}]^T \tag{4.57}$$

$$\boldsymbol{z} = [\mathrm{mf_{Air}}, p_{22}, T_{22}, T_{31}, p_{31}, T_{21}, p_{21}]^T \tag{4.58}$$

Dem Berechnungsprozess im EKF folgend, der von den Formeln (4.41) bis (4.46) in Abschnitt 4.4.2 repräsentiert wird, können die a-posteriori-Schätzung $\hat{\boldsymbol{s}}_{j+1|j+1}$ der Systemzustände und ihre Kovarianzmatrix $\boldsymbol{P}_{j+1|j+1}$ berechnet werden. Aus $\hat{\boldsymbol{s}}_{j+1|j+1}$ und $\boldsymbol{P}_{j+1|j+1}$ sind die Applikationsparameter $\boldsymbol{A}_{j+1,\mathrm{Post}} = [\mathrm{ar_{TVA},}j+1,\mathrm{Post}, \mathrm{ar_{EGR},}j+1,\mathrm{Post}, \lambda_{j+1,\mathrm{Post}}]$ und ihre Varianz $\sigma^2_{\boldsymbol{A}_{j+1,\mathrm{Post}}} = [\sigma^2_{\mathrm{ar_{TVA}},j+1,\mathrm{Post}}, \sigma^2_{\mathrm{ar_{EGR}},j+1,\mathrm{Post}}, \sigma^2_{\lambda,j+1,\mathrm{Post}}]$ herauszulesen. Anhand der Messwerte $\boldsymbol{z}_{j+1}$ für den Ausgangsvektor kann man hierbei nicht nur die a-posteriori-Schätzung der Kovarianzmatrix, sondern auch Schätzwerte der Systemzustände durch die Formel (4.45) bestimmen. Nachdem die Applikationsmesspunkte berechnet sind, kann man den



(a) Verteilung der anfänglichen Applikationsmesspunkte $\boldsymbol{D}_{\mathrm{App},\lambda,0}$ auf dem Eingangsraum des empirischen Modells $\lambda(n_{\mathrm{Eng}}, q)$.

(b) Anfängliches Gaußprozessmodell für das empirische Modell $\lambda(n_{\mathrm{Eng}}, q)$.

Abbildung 4.21: Anfängliche Applikationsmesspunkte und Gaußprozessmodell.

Informationsgehalt eines Trainingsdatenpunkts mittels der Formel (4.30) kalkulieren und darauf basierend das Optimierungsproblem in Formel (4.54) lösen. Mittels des optimalen Trainingsdatenpunkts, des Ergebnisses des Optimierungsproblems, wird die Menge $\mathbf{GPM}_{j+1} = [\mathrm{GPM}_{\mathrm{ar}_{\mathrm{TVA}},j+1}, \mathrm{GPM}_{\mathrm{ar}_{\mathrm{EGR}},j+1}, \mathrm{GPM}_{\lambda,j+1}]$ der Gaußprozessmodelle aktualisiert und in die entsprechenden KF/KL konvertiert. Die Phase der adaptiven Versuchsplanung setzt sich fort, bis das in Abschnitt 4.3.3 entwickelte AKS erfüllt wird.

Ergebnisse

Als Ergebnisse wurden 31 Messpunkte für die anfängliche Versuchsplanung aus $\boldsymbol{D}_{\mathrm{Tra}}$ herausgenommen. Während der adaptiven Versuchsplanung wählte der Algorithmus schrittweise weitere 62 Messpunkte aus $\boldsymbol{D}_{\mathrm{Tra}}$ aus, um die endgültigen Gaußprozessmodelle und die entsprechenden KF/KL für die drei gesuchten empirischen Modelle zu erstellen. Wie in Abschnitt 4.5.1 erklärt, wird die Applikationsgüte der KF/KL durch die Genauigkeit der Modellausgaben dargestellt. Für die drei gesuchten empirischen Modelle $\mathrm{ar}_{\mathrm{TVA}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{TVA}})$, $\mathrm{ar}_{\mathrm{EGR}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{EGR}})$ und $\lambda(q, n_{\mathrm{Eng}})$ sind die Modellausgaben jeweils p_{21}, $\mathrm{mf}_{\mathrm{EGR}}$ und $\mathrm{mf}_{\mathrm{Cyl}}$. Basierend auf den nach dem Standardverfahren und dem vorgeschlagenen Ansatz applizierten KF/KL wurden die Modellausgaben berechnet und mit den entsprechenden Sensorwerten im Referenzdatensatz verglichen. Der gemittelte absolute prozentuale Fehler (Mean Absolute Percentage Error, MAPE), der definiert ist als

$$\mathrm{MAPE} = \frac{100}{n} \sum_{t=1}^{n} \left| \frac{\mathrm{Sen}_t - \mathrm{Mod}_t}{\mathrm{Sen}_t} \right| \tag{4.59}$$

wird als Fehlermetrik eingesetzt, wobei n die Anzahl der gesamten Messpunkte in den Referenzdatensätzen ist. Sen_t und Mod_t stehen jeweils für den t-ten Sensorwert und den

modellierten Wert. Die Ergebnisse der Applikationsqualität sind in Tabelle 4.2 zusammengefasst.

Methode	Rastermessung	Entwickelter Algorithmus
N_{MP}	365	93
MAPE von $\mathrm{mf}_{\mathrm{Cyl}}$	0,53%	0,5%
MAPE von p_{21}	0,56%	0,33%
MAPE von $\mathrm{mf}_{\mathrm{EGR}}$	2,11%	2,04%

Tabelle 4.2: Applikationsgüte der relevanten KF/KL.

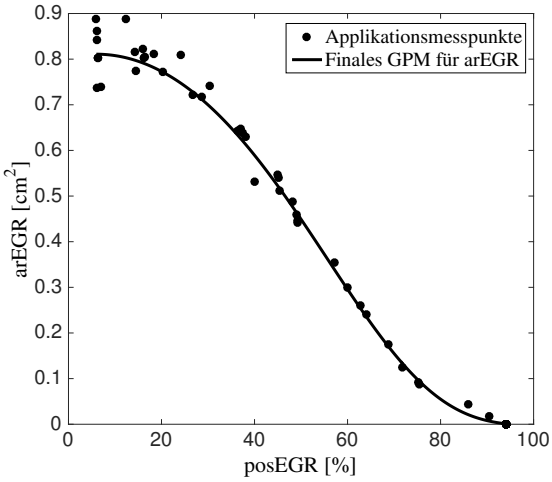
Aus der Tabelle ist der Schluss zu ziehen, dass trotz der erheblichen Reduzierung der Zahl der verwendeten Messpunkte die Applikationsqualitäten bei allen drei empirischen Modellen, die mittels des entwickelten Algorithmus bestimmt werden, leicht verbessert sind. Außerdem sind die endgültigen Applikationsmesspunkte und die Gaußprozessmodelle in den Abbildungen 4.22a bis 4.22d zu sehen. Zuletzt werden noch in Abbildung 4.22e die Verteilung der endgültigen Applikationsmesspunkte und der Trainingsdatensatz auf dem Motorbetriebsbereich gezeigt.

4.6 Aktive Erzeugung der Messpunkte

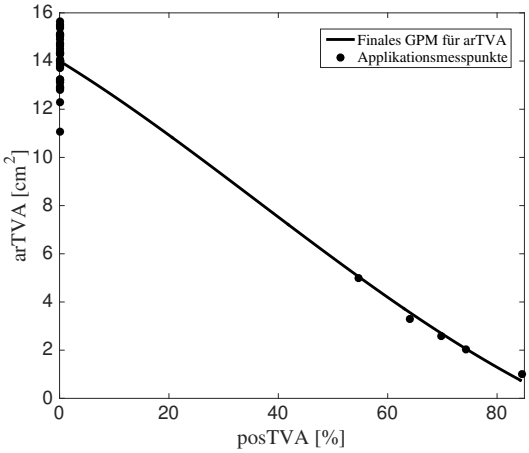
In Abschnitt 4.5 wurde der in Abschnitt 4.4 entwickelte Algorithmus implementiert, um die informativsten Messpunkte aus einem bereits vorhandenen Datensatz auszuwählen. In diesem Abschnitt begegnen wir dem Problem der aktiven und unabhängigen Erzeugung von Messpunkten mit hohem Informationsgehalt für die Aufgabe der ECU-Funktionsapplikation. Zum Einstieg lohnt es sich, zuerst die Unterschiede zwischen den beiden Problemstellungen abzuklären:

- In Abschnitt 4.5 handelte es sich um die Auswahl von Messpunkten, die schon erfolgreich am Prüfstand erfasst und aufgezeichnet wurden. Dies deutet darauf hin, dass diese Messpunkte keine Motorschäden angerichtet haben und dass deshalb bei der Auswahl der Messpunkte die Thematik des Motorschutzes nicht berücksichtigt werden muss. In diesem Abschnitt muss das Thema Motorschutz in der Phase der Versuchsplanung behandelt werden.

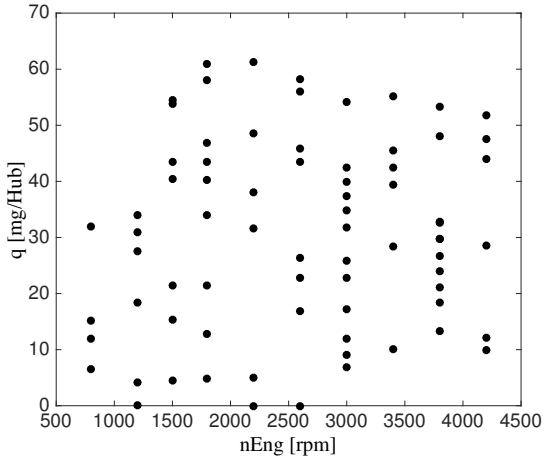
- In Abschnitt 4.5 musste man die Messpunkte nur *auswählen*. Im Gegensatz dazu kann man in diesem Abschnitt die Messpunkte *aktiv* und mit mehr Freiheitsgraden erzeugen. Ein großer Vorteil daraus ist folgender: Beim bestehenden Datensatz aus der Rastermessung werden nur die Drehzahl und die Einspritzmenge spezifiziert. Wenn



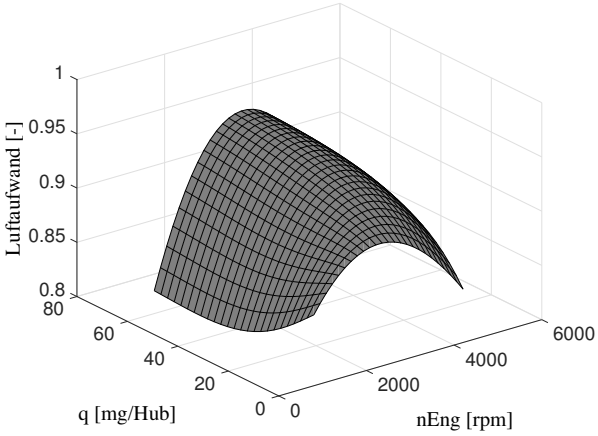
(a) Endgültige Applikationsmesspunkte $\boldsymbol{D}_{\mathrm{App,ar_{EGR}}}$ und Gaußprozessmodell für das empirische Modell $\mathrm{ar_{EGR}}(\mathrm{pos_{EGR}})$.



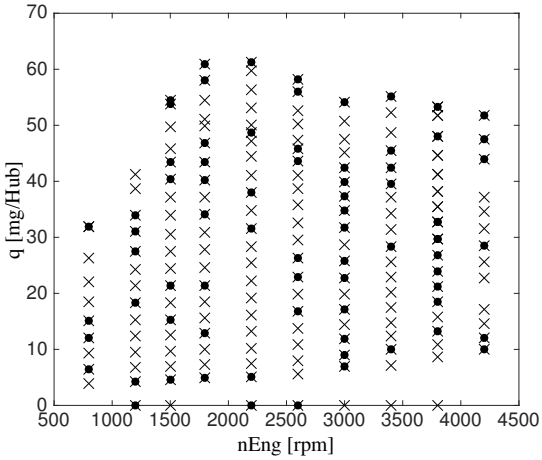
(b) Endgültige Applikationsmesspunkte $\boldsymbol{D}_{\mathrm{App,ar_{TVA}}}$ und Gaußprozessmodell für das empirische Modell $\mathrm{ar_{EGR}}(\mathrm{pos_{TVA}})$.



(c) Verteilung der endgültigen Applikationsmesspunkte $\boldsymbol{D}_{\mathrm{App},\lambda}$ auf dem Eingangsraum des empirischen Modells $\lambda(n_{\mathrm{Eng}}, q)$.



(d) Endgültiges Gaußprozessmodell für das empirische Modell $\lambda(n_{\mathrm{Eng}}, q)$.



(e) Verteilung der endgültigen Applikationsmesspunkte $\boldsymbol{D}_{\mathrm{App}}$ (Punkte) im Verhältnis zum Trainingsdatensatz $\boldsymbol{D}_{\mathrm{Tra,mA}}$ mit AGR (Kreuze).

Abbildung 4.22: Endgültige Gaußprozessmodelle und Verteilung der Applikationsmesspunkte.

man erlaubt, andere Verstellmöglichkeiten am Prüfstand, z. B. VTG-Steller der Turbine, Tastverhältnis der Abgasklappe etc., bei der Versuchsplanung auch vorzugeben, besteht die Vermutung, dass man dadurch Messpunkte mit höherem Informationsgehalt erzeugen kann.

Wie die theoretischen Überlegungen in Abschnitt 4.4.1 ergeben haben, gehört zu den größten Herausforderungen, die das Problem in diesem Abschnitt stellt, die Prädiktion oder die Schätzung der Qualität der Applikationsmesspunkte, bevor die Experimente durchgeführt werden. Eine weitere Herausforderung ist, dass man gewährleisten muss, dass die erzeugten Messpunkte nicht zu Motorschäden führen.

Zuerst wird in Abschnitt 4.6.1 die Problemstellung formuliert. Anschließend wird in Abschnitt 4.6.2 erklärt, wie man die Formel (4.30) für die Berechnung des Informationsgehalts in diesem Anwendungsfall anwenden kann. Die oben genannten Herausforderungen werden auch in Abschnitt 4.6.2 behandelt.

4.6.1 Problembeschreibung des Anwendungsbeispiels

Als Zielsetzung wird in diesem Abschnitt versucht, die hauptsächlichen KF/KL im Diesel-Luftsystem automatisch und mit möglichst geringem Messaufwand zu applizieren. In Tabelle 4.3 werden die gesuchten KF/KL aufgelistet.

Am Prüfstand stehen für die Applikation der ECU-Funktionen im Diesel-Luftsystem insgesamt acht Verstellmöglichkeiten zur Verfügung:

- Tastverhältnisse der Drosselklappe: $\mathrm{pos}_{\mathrm{TVA}}$
- Tastverhältnisse des HD-AGR-Ventils: $\mathrm{pos}_{\mathrm{EGRHP}}$
- Tastverhältnisse des ND-AGR-Ventils: $\mathrm{pos}_{\mathrm{EGRLP}}$
- Tastverhältnisse der Abgasklappe: $\mathrm{pos}_{\mathrm{ExhFlp}}$
- Tastverhältnisse des VTG-Stellers: $\mathrm{pos}_{\mathrm{Trbn}}$
- Motordrehzahl: n_{Eng}
- Einspritzmenge: q
- Kurbelwinkel des Einlassventilschließens: $\mathrm{ag}_{\mathrm{ES}}$

Zusammengefasst ergibt sich der Eingangsvektor

$$\boldsymbol{u} = [\mathrm{pos}_{\mathrm{TVA}}, \mathrm{pos}_{\mathrm{EGRHP}}, \mathrm{pos}_{\mathrm{EGRLP}}, \mathrm{pos}_{\mathrm{ExhFlp}}, \mathrm{pos}_{\mathrm{Trbn}}, n_{\mathrm{Eng}}, q, \mathrm{ag}_{\mathrm{ES}}] \tag{4.60}$$

Tabelle 4.3: KF/KL von Interesse

KF/KL	Beschreibung
$\mathrm{ar}_{\mathrm{TVA}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{TVA}})$	Effektive Fläche der Drosselklappe abhängig vom Tastverhältnis
$\mathrm{ar}_{\mathrm{Trbn}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{Trbn}})$	Effektive Fläche der Turbine abhängig vom Tastverhältnis des VTG-Stellers
$\mathrm{ar}_{\mathrm{EGRHP}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{EGRHP}})$	Effektive Fläche des HD-AGR-Ventils abhängig vom Tastverhältnis
$\mathrm{ar}_{\mathrm{EGRLP}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{EGRLP}})$	Effektive Fläche des ND-AGR-Ventils abhängig vom Tastverhältnis
$\mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{ExhFlp}})$	Effektive Fläche der Abgasklappe abhängig vom Tastverhältnis
$\mathrm{fac}_{\mathrm{p22cor}}(n_{\mathrm{EngTCorrn}}{}^{a}, \mathrm{ag}_{\mathrm{ES}})$	Korrekturfaktor des Ladedrucks abhängig von der korrigierten Drehzahl und dem Kurbelwinkel des Einlassventilschließens
$T_{\mathrm{Eng,Diff}}(n_{\mathrm{Eng}}, q)$	Temperaturdifferenz zwischen dem Motoreinlass und Motorauslass abhängig von der Drehzahl und der Einspritzmenge

[a] $n_{\mathrm{EngTCorrn}}$ steht für die Motordrehzahl, die durch die Gastemperatur T_{23} stromabwärts des Ladeluftkühlers (LLK) korrigiert wird. Die Formel für die Korrektur ist $n_{\mathrm{EngTCorrn}} = n_{\mathrm{Eng}}\sqrt{\frac{273}{T_{23}}}$.

Am Motorprüfstand wird für eine ausgewählte Einstellung des Eingangsvektors $\boldsymbol{U}$ die entsprechende stationäre Systembeobachtung des Motors erfasst, die Informationen über diesen Betriebszustand übermittelt. Zu den angeregten Systembeobachtungen $\boldsymbol{D}_{\text{Sen}}$ im Luftsystem gehören im Wesentlichen die Massenströme, Temperaturen und Drücke, die durch die Messtechnik am Prüfstand direkt erfasst werden können. In diesem Fall beinhaltet ein aufgezeichneter Messpunkt den ausgewählten Eingangsvektor zusammen mit dem gemessenen $\boldsymbol{D}_{\text{Sen}}$, das sich im Luftsystem dadurch einstellt. Da die Applikationsparameter, z. B. Luftaufwand und effektive Fläche, in der Regel nicht direkt messbar sind, muss $\boldsymbol{D}_{\text{Sen}}$ durch Parameterschätzung in den Applikationsmesspunkt $\boldsymbol{D}_{\text{App}}$ umgewandelt werden, wie in Abschnitt 4.1 klargemacht wurde. In Abbildung 4.23 ist der Signalfluss vom Eingangsvektor bis zum Applikationsmesspunkt schematisch dargestellt.

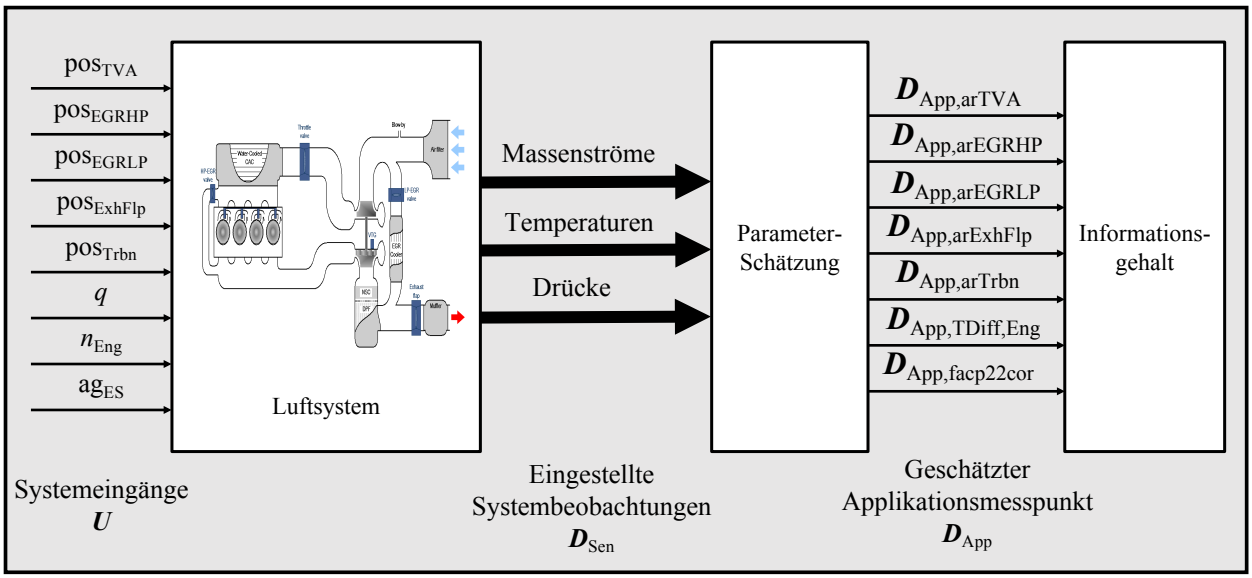


Abbildung 4.23: Informationsgehalt als eine Funktion des Eingangsvektors; die Logik ist folgende: Aufgrund des gewählten Eingangsvektors $\boldsymbol{U}$ stellen sich bestimmte stationäre Systembeobachtungen $\boldsymbol{D}_{\text{Sen}}$ ein; mit Hilfe von $\boldsymbol{D}_{\text{Sen}}$ wird der Applikationsmesspunkt $\boldsymbol{D}_{\text{App}}$ für alle empirischen Modelle geschätzt; der Informationsgehalt wird von den Eigenschaften des Applikationsmesspunkts bestimmt; deswegen kann der Informationsgehalt als eine Funktion des Eingangsvektors angesehen werden.

Wie in Abschnitt 4.4.1 diskutiert wurde, hängt die Applikationsqualität von den Eigenschaften von $\boldsymbol{D}_{\text{App}}$ ab, z. B. der Unsicherheit und der Verteilung der Applikationsmesspunkte im Eingangsraum. Abbildung 4.23 ist zu entnehmen, dass die Eigenschaften von $\boldsymbol{D}_{\text{App}}$ im Wesentlichen durch den gewählten Eingangsvektor $\boldsymbol{U}$ bestimmt werden. Daher kann die Schlussfolgerung gezogen werden, dass der Informationsgehalt für die Applikation weitgehend, wenn nicht ausschließlich, durch den ausgewählten Eingangsvektor bestimmt wird. Infolgedessen wird in diesem Anwendungsbeispiel im Weiteren der Informationsgehalt IG($\boldsymbol{U}$) als eine Funktion des Eingangsvektors $\boldsymbol{U}$ behandelt, ohne die Relevanz des Applikationsmesspunkts $\boldsymbol{D}_{\text{App}}$ explizit zu nennen. Einen großen Anteil dieses

Abschnitts macht auch der Versuch aus, die mathematische Zuordnung des Eingangsvektors zu dem dadurch gewonnenen Informationsgehalt zu ermitteln.

Dem Prinzip der sequentiellen Versuchsplanung folgend, betrachten wir in diesem Anwendungsfall in jeder Iteration einen achtdimensionalen diskreten Eingangsraum als die zulässige Menge und befassen uns mit dem diskreten Optimierungsproblem für die Identifizierung desjenigen Eingangsvektors, der den Applikationsmesspunkt mit dem höchsten Informationsgehalt erzeugen kann. Nach j Iterationen lautet das Optimierungsproblem wie folgt:

$$\boldsymbol{U}^*_{j+1} = \underset{\boldsymbol{U}_{j+1} \in \mathcal{U}_{j+1}}{\arg\max}\, \mathrm{IG}(\mathbf{GPM}_j, \boldsymbol{U}_{j+1}) \tag{4.61}$$

Dabei steht der Term IG für die Informationssumme für die Applikation aller relevanten KF/KL. Es gilt:

$$\mathrm{IG} = \mathrm{IG}_{\mathrm{ar}_{\mathrm{TVA}}} + \mathrm{IG}_{\mathrm{ar}_{\mathrm{Trbn}}} + \mathrm{IG}_{\mathrm{ar}_{\mathrm{EGRHP}}} + \mathrm{IG}_{\mathrm{ar}_{\mathrm{EGRLP}}} + \mathrm{IG}_{\mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp}}} + \mathrm{IG}_{\mathrm{fac}_{\mathrm{p22cor}}} + \mathrm{IG}_{T_{\mathrm{Eng,Diff}}} \tag{4.62}$$

Außerdem steht $\mathcal{U}_{j+1}$ für die aktuelle zulässige Menge des Optimierungsproblems. Dabei ändert sich $\mathcal{U}_{j+1}$ während des Applikationsprozesses. Um den Einfluss des Eingangsvektors $\boldsymbol{U}$ auf den Informationsgehalt IG($\boldsymbol{U}$) prädizieren zu können, wird in diesem Abschnitt versucht, den Signalfluss in Abbildung 4.23 in gewissem Maße zu simulieren.

Motorschutz

Bei der Motorapplikation stellt der Motorschutz schon aus folgenden Gründen ein essentielles Problem dar:

- Am Prüfstand erweist es sich als schwierig, den Motorzustand, z. B. die Temperaturen und die Drücke, abhängig von den Systemeingängen zu prädizieren, was auch für sehr erfahrene Versuchsingenieure gilt. Deshalb entpuppen sich die zuvor scheinbar fahrbaren Arbeitspunkte oftmals als unfahrbar, da sie zu Motorschäden führen würden.
- Der Motor wird normalerweise bei der Applikation in Extremzustände gezwungen, um das Potenzial des Motors zu ermitteln, was den oben genannten Effekt noch verstärkt.
- Umfangreiche Verstellmöglichkeiten am Motor führen zu einem sehr zeitaufwändigen Prozess für die Erkennung des überhaupt zulässigen Motorbetriebsbereichs.

Typische Motorgrenzen beim Diesel-Luftsystem, die nicht verletzt werden dürfen, sind die Rauchgrenze für eine ordentliche Verbrennung im Zylinder, die Druckgrenze im Saugrohr

und im Abgaskrümmer, die Temperaturgrenze im Saugrohr und im Abgasstrang (inklusive der Abgasnachbehandlung) und die arbeitspunktabhängige Grenze für die AGR-Rate. Solche Grenzen ergeben sich auf der einen Seite aus der mechanischen und thermischen Belastbarkeit der Motorkomponenten, z. B. Turbolader und Katalysator. Auf der anderen Seite müssen Faktoren berücksichtigt werden, welche die Qualität der Verbrennung beeinflussen, beispielsweise Luftzahl und AGR-Rate. In Abbildung 4.24 wird ein Ansaugtrakt gezeigt, der durch Ruß und Öl verstopft ist.

Abbildung 4.24: Bild eines verschmutzten Ansaugtrakts.

Der Umgang mit den Motorgrenzen bei der Applikation steht auch im Vordergrund der Entwicklung der Versuchsmethodik. In konventioneller Vorgehensweise müssen Versuchsingenieure im Vorfeld aus ihren Erfahrungen den zulässigen Motorbetriebsbereich festlegen. In [Gsc+01] ergibt sich ein automatisierter Prozess für die Erkennung des fahrbaren Betriebsbereichs nach dem Prinzip „Trial and Error“. Dabei wird der Motor ausgehend von einem fahrbaren (zentralen) Messpunkt Schritt für Schritt nach einer möglichen Grenze getrieben, bis die Grenze verletzt wird. Die dadurch gewonnene Motor-Laufgrenze wird vermessen und aufgezeichnet. In [Bol+13] wird ein statistisches Modell für die Klassifikation angegeben, um zulässige Messpunkte von unzulässigen zu unterscheiden. Als Trainingsdatensatz für das Klassifikationsmodell dient ein Satz von bereits gemessenen Messpunkten, der sowohl fahrbare als auch unfahrbare Messpunkte beinhalten muss. Offensichtlich müssen in diesem Ansatz noch zusätzliche Messpunkte für die Ermittlung des fahrbaren Versuchsraums investiert werden, womit sich der Messaufwand erhöht. Im Gegensatz dazu werden in der vorliegenden Arbeit die Grenzwerte der Motorkomponenten als Vorwissen in den Algorithmus einbezogen. So können Motorschäden ohne extra Aufwand vermieden werden. Nachdem das Problem definiert wurde, wird im nächsten Abschnitt die Bestimmung des Informationsgehalts eines Eingangsvektors erklärt.

4.6.2 Informationsgehalt für die Applikation der Abgasklappe

Statt die Berechnung von $\mathrm{IG}(\mathbf{GPM}_j, \boldsymbol{U}_{j+1})$ in Formel (4.61) zu erklären, wird in diesem Abschnitt zur besseren Lesbarkeit die Berechnung des Informationsgehalts $\mathrm{IG}_{\mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp}}}$ für die Applikation der effektiven Fläche der Abgasklappe als ein Beispiel genommen. Die Bestimmung des Informationsgehalts für andere KF/KL, z. B. $\mathrm{IG}_{\mathrm{ar}_{\mathrm{TVA}}}$ und $\mathrm{IG}_{\mathrm{ar}_{\mathrm{Trbn}}}$, kann durch dasselbe Verfahren erfolgen. Als Erstes wird in Abbildung 4.25 der Signalfluss für die Berechnung von $\mathrm{IG}_{\mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp}}}(\mathbf{GPM}_j, \boldsymbol{U}_{j+1})$ verdeutlicht.

Als Lösungsansatz wird, wie sich in Abbildung 4.25 zeigt, zuerst basierend auf dem ausgewählten Eingangsvektor das erzeugte Motorverhalten $\boldsymbol{D}_{\mathrm{Sen,Pre}}$ prädiziert, was durch Lösen des Gleichungssystems $\boldsymbol{G} = 0$ erreicht wird. Sodann wird aufgrund von $\boldsymbol{D}_{\mathrm{Sen,Pre}}$ die Möglichkeit von Motorschäden überprüft. Im Anschluss wird mithilfe eines EKF die Unsicherheit $\sigma^2_{\mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp}},\mathrm{Post}}$ des Applikationsparameters geschätzt. Zuletzt kann man den Informationsgehalt $\mathrm{IG}_{\mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp}}}$ mittels der Formel (4.30) berechnen.

Systemaufbau für die Modellierung des Diesel-Luftsystems

Um die stationären Motorzustände vorhersagen zu können, die relevant für die Aufgabe der Applikation sind, z. B. Zylinderfüllung $\mathrm{mf}_{\mathrm{Cyl}}$, Abgastemperatur T_{31} und Ladedruck p_{22}, wird in diesem Abschnitt ein Modell für das Luftsystem gebildet. Zu beachten ist, dass das Modell außer den Sensorwerten der Umgebungsgrößen, und zwar p_0 und T_0, die während des Vermessungsvorgangs eines Messpunkts als Konstanten angesehen werden, keine anderen Sensorwerte benutzen darf. In Abbildung 4.26 wird die Funktionsweise des Luftsystemmodells dargestellt.

Im Konzept der Modellierung werden sowohl physikalische Gesetze als auch empirische Modelle eingesetzt. Zuerst wird die Menge der aktuellen Gaußprozessmodelle $\mathbf{GPM}_{\mathrm{Akt}}$ verwendet, um die entsprechenden Applikationsparameter aufgrund des jeweiligen Eingangs zu prädizieren, z. B. den Korrekturfaktor für den Ladedruck $\mathrm{fac}_{\mathrm{p22cor}}$, die effektive Fläche der Abgasklappe $\mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp}}$, etc. Basierend auf den berechneten Applikationsparametern und der physikalischen Struktur des Luftsystems werden die angeregten Systembeobachtungen $\boldsymbol{D}_{\mathrm{Sen,Pre}}$ im Luftsystem vorhergesagt. Dazu gehören z. B. der Massenstrom mf_{10} der Frischluft, der Ladedruck p_{22} und die Abgastemperatur T_{EGRLPUs} stromaufwärts des ND-AGR-Ventils. Abbildung 4.27 stellt eine Übersicht über die Verteilung der Systembeobachtungen im Luftsystem zur Verfügung, die gegebenenfalls für die Generierung von Applikationsmesspunkten relevant sind.

Während die Berechnung der Applikationsparameter durch die Gaußprozessmodelle problemlos erfolgen kann, stellt sich die Modellbildung des Luftsystems ohne die Hilfe von weiteren Sensorwerten als eine komplizierte Aufgabe dar. Bevor wir uns mit der detaillierten Struktur des physikalischen Anteils des Luftsystemmodells auseinandersetzen, müssen indes noch ein paar Begriffe eingeführt werden. Wenn es um die Analyse der Berechenbarkeit eines Signalflussdiagramms geht, können folgende Situationen auftreten:

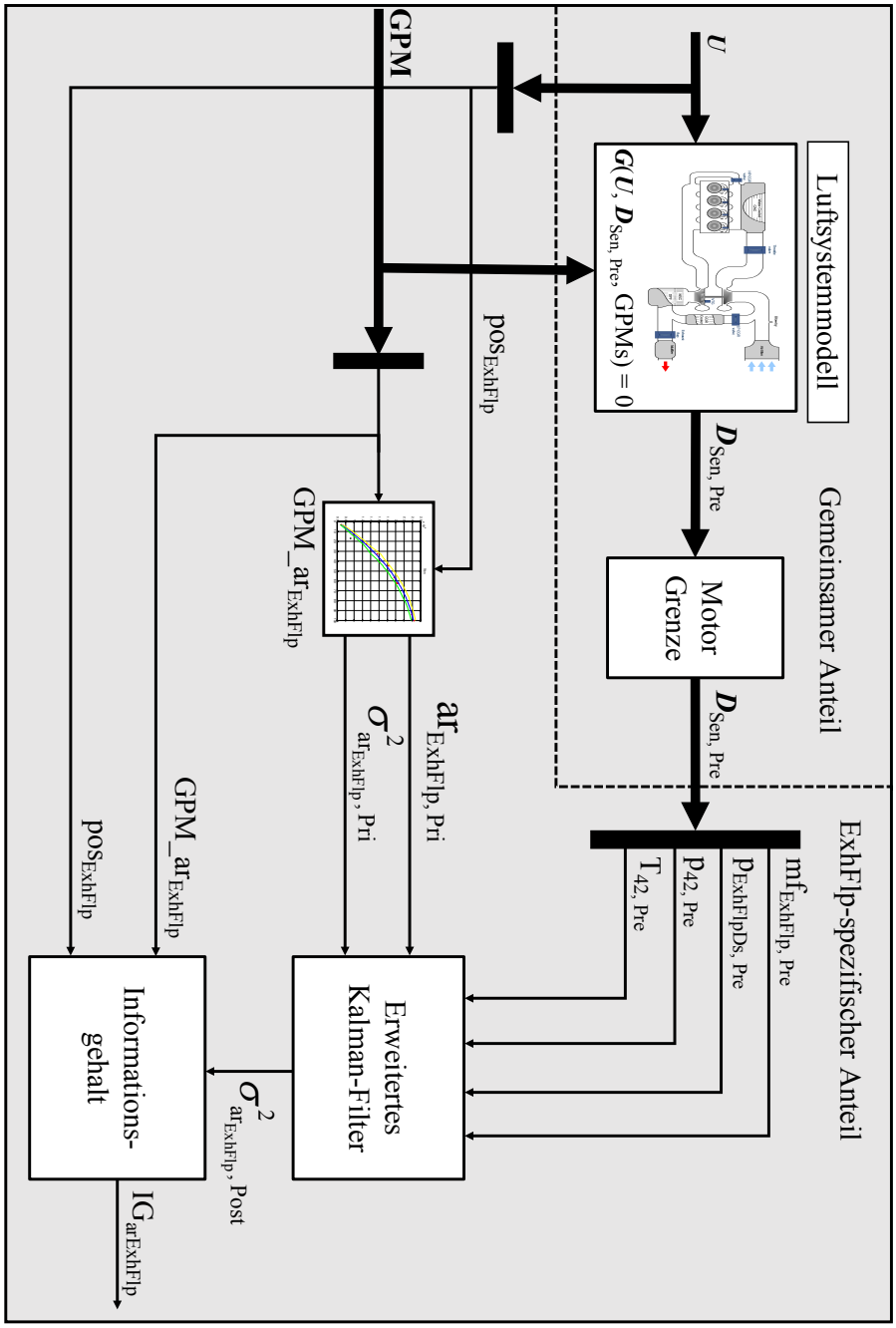


Abbildung 4.25: Signalfluss zur Bestimmung des Informationsgehalts $\mathrm{IG}_{\mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp}}}(\mathbf{GPM}_j, \boldsymbol{U}_{j+1})$ eines Eingangsvektors am Beispiel der Abgasklappe; die dicken schwarzen Pfeile stehen für Bündel von mehreren Signalen und dünne Pfeile für einzelne Signale; das Bild zeigt zwei Anteile: den gemeinsamen Anteil und den Abgasklappe-spezifischen Anteil. Während die Funktionalitäten im gemeinsamen Anteil, die Prädiktion der Systembeobachtungen und die Vermeidung der Motorschäden von allen anderen empirischen Modellen geteilt werden, wird im Abgasklappe-spezifischen Anteil der Signalfluss für die Schätzung von $\sigma^2_{\mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp}},\mathrm{Post}}$ und die Kalkulation von $\mathrm{IG}_{\mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp}}}$ dargestellt.

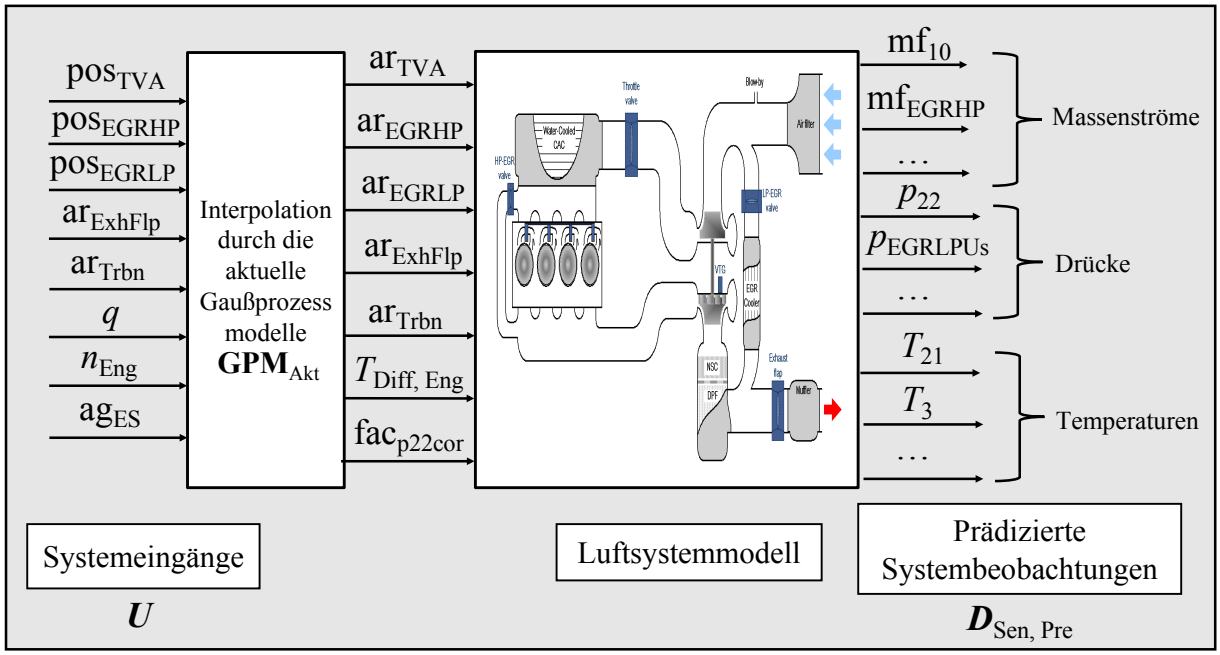


Abbildung 4.26: Funktionsweise des Luftsystemmodells; dabei werden zunächst die Applikationsparameter durch Interpolation mittels der aktuellen Gaußprozessmodelle berechnet; danach wird das Gleichungssystem $\boldsymbol{G} = 0$ nach $\boldsymbol{D}_{\text{Sen,Pre}}$ gelöst; in der Abbildung wird der Signalfluss dafür gezeigt.

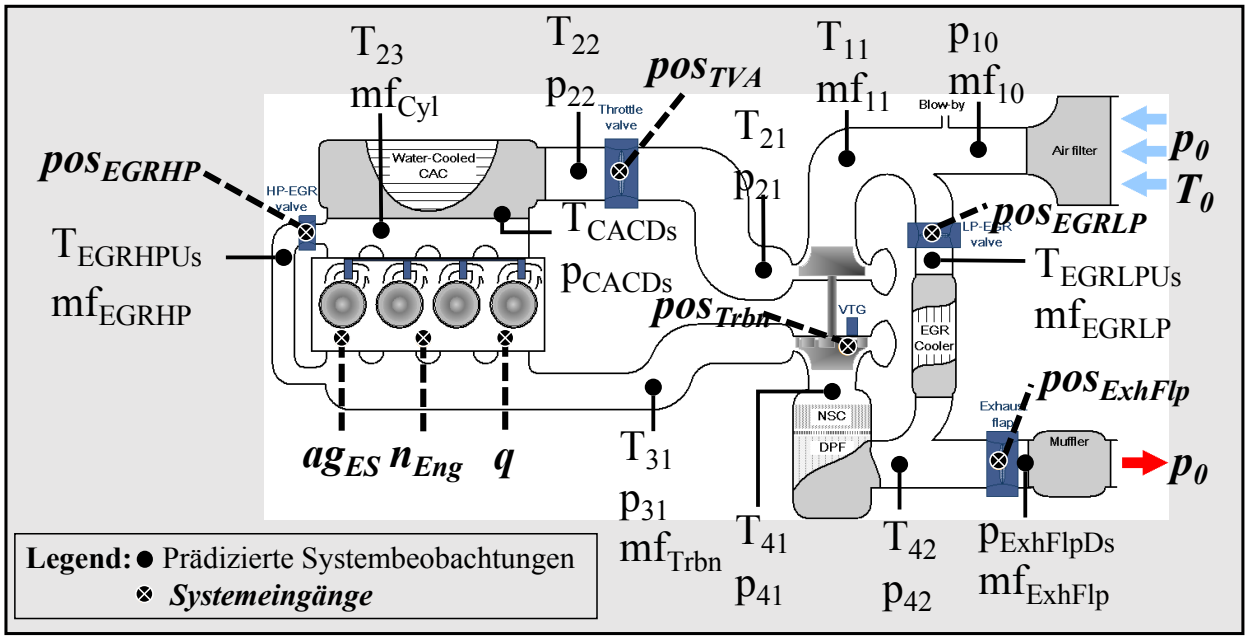


Abbildung 4.27: Verteilung der prädizierten Systembeobachtung $\boldsymbol{D}_{\text{Sen,Pre}}$ im Diesel-Luftsystem; Systemeingänge sind durch Kreise mit Kreuz gekennzeichnet.

- Überbestimmtheit: Diese tritt auf, wenn eine Variable kausal durch mehrere Rechenwege gleichzeitig berechnet werden kann.
- Unterbestimmtheit: Diese tritt auf, wenn zu wenige Variablenwerte bekannt oder nicht genügend Relationen verfügbar sind, um alle Größen zu berechnen.

- Perfekt bestimmt: Dies tritt auf, wenn alle benötigten Variablen eindeutig bestimmt werden können.

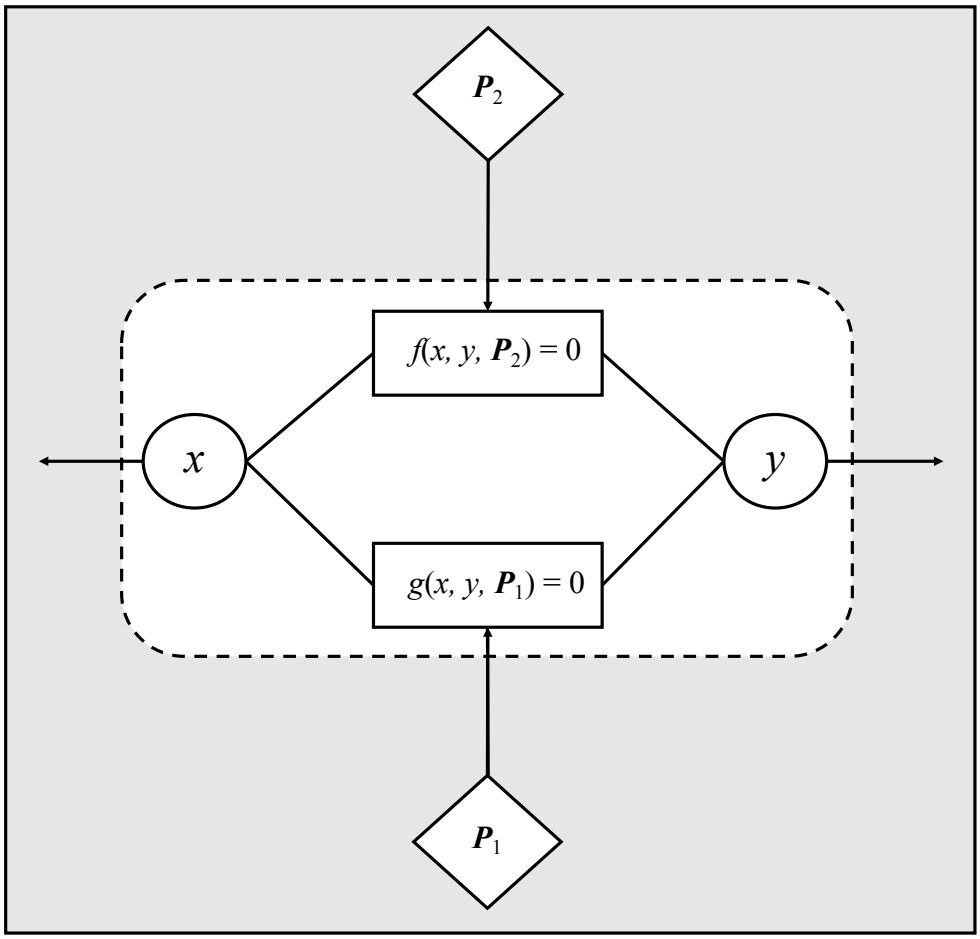


Abbildung 4.28: Gemeinsame Lösung eines Gleichungssystems; auf dem Bild wird ein Gleichungssystem mit zwei unbekannten Variablen x und y dargestellt; die relevanten Gleichungen sind $g(x, y, \boldsymbol{P}_1) = 0$ und $f(x, y, \boldsymbol{P}_2) = 0$, wobei $\boldsymbol{P}_1$ und $\boldsymbol{P}_2$ für die bekannten Parametersätze stehen; zur Berechnung dieses Signalflussdiagramms muss das Gleichungssystem, das auf dem Bild durch eine gestrichelte Linie umrahmt wird, nach x und y simultan gelöst werden; die Lösung wird von den Parametersätzen $\boldsymbol{P}_1$ und $\boldsymbol{P}_2$ und den relevanten Gleichungen f und g bestimmt.

Als ein Sonderfall kann ein Signalflussdiagramm wie in Abbildung 4.28 aussehen. Hierbei handelt es sich nicht um die direkte kausale Propagation von unbekannten Variablen oder Parametern aus bekannten, sondern vielmehr um die gemeinsame Lösung eines Gleichungssystems. Für die Identifikation solcher Strukturen, die als gemeinsam zu lösende Gleichungssysteme dargestellt werden, sind die Algorithmen aus [Fri06] und [DM63] heranzuziehen. Im Folgenden wird der physikalische Anteil des Luftsystemmodells in vollem Umfang erläutert, bevor eine Strukturanalyse in Hinsicht auf die Berechenbarkeit durchgeführt wird. In Abbildung 4.29 ist das Luftsystemmodell auf der Ebene des Signalflussdiagramms dargestellt. Anschließend werden die eingesetzten Gleichungen bei jedem Block

in Abbildung 4.29 aufgelistet, wobei die Bedeutungen der Signale Abbildung 4.27 zu entnehmen sind.

Für die Modellierung des Druckverlusts entlang eines Rohrs wird der quadratische Ansatz in [SR13] benutzt. Dieser Ansatz findet Anwendung bei folgenden Blöcken:

$$\text{Druckverlust am Luftfilter: } p_0 - p_{10} = \frac{\mathrm{mf}_{10}^2 T_0}{\mathrm{ar}_{\mathrm{AirFlt}}^2} \tag{4.63}$$

$$\text{Druckverlust bei der AGB: } p_{41} - p_{42} = \frac{\mathrm{mf}_{\mathrm{Trbn}}^2 T_{41}}{\mathrm{ar}_{\mathrm{EGT}}^2} \tag{4.64}$$

$$\text{Druckverlust am Auspuff: } p_{42} - p_{\mathrm{ExhFlpDs}} = \frac{\mathrm{mf}_{\mathrm{ExhFlp}}^2 T_{42}}{\mathrm{ar}_{\mathrm{Sil}}^2} \tag{4.65}$$

Um den Rechenaufwand zu reduzieren, werden die Querschnittsflächen $\mathrm{ar}_{\mathrm{AirFlt}}$, $\mathrm{ar}_{\mathrm{EGT}}$ und $\mathrm{ar}_{\mathrm{Sil}}$ der Rohre als Konstanten behandelt und mittels der Messdaten aus dem anfänglichen Experiment appliziert. Ansonsten ergäbe die Annahme einer veränderlichen Fläche, die vom Massenstrom abhängt, eine rechenaufwändigere, aber genauere Berechnungsmöglichkeit. Für die Modellierung der Gasmischung wird vom Massen- und Enthalpie-Erhaltungssatz wie folgt Gebrauch gemacht:

$$\text{Gasmischung mit HD-AGR: } \mathrm{mf}_{\mathrm{EGRHP}} + \mathrm{mf}_{11} = \mathrm{mf}_{\mathrm{Cyl}} \tag{4.66}$$

$$\mathrm{mf}_{\mathrm{EGRHP}} T_{\mathrm{EGRHP}} + \mathrm{mf}_{11} T_{\mathrm{CACDs}} = \mathrm{mf}_{\mathrm{Cyl}} T_{23} \tag{4.67}$$

$$\text{Gasmischung mit ND-AGR: } \mathrm{mf}_{\mathrm{EGRLP}} + \mathrm{mf}_{10} = \mathrm{mf}_{11} \tag{4.68}$$

$$\mathrm{mf}_{\mathrm{EGRLP}} T_{\mathrm{EGRLPDs}} + \mathrm{mf}_{10} T_0 = \mathrm{mf}_{11} T_{11} \tag{4.69}$$

Bei den Blöcken HD-AGR-Ventil, ND-AGR-Ventil, Abgasklappe und Drosselklappe wird die klassische Drosselgleichung verwendet, die durch die Formeln (1.1) bis (1.4) in Abschnitt 1.2.2 beschrieben wird,

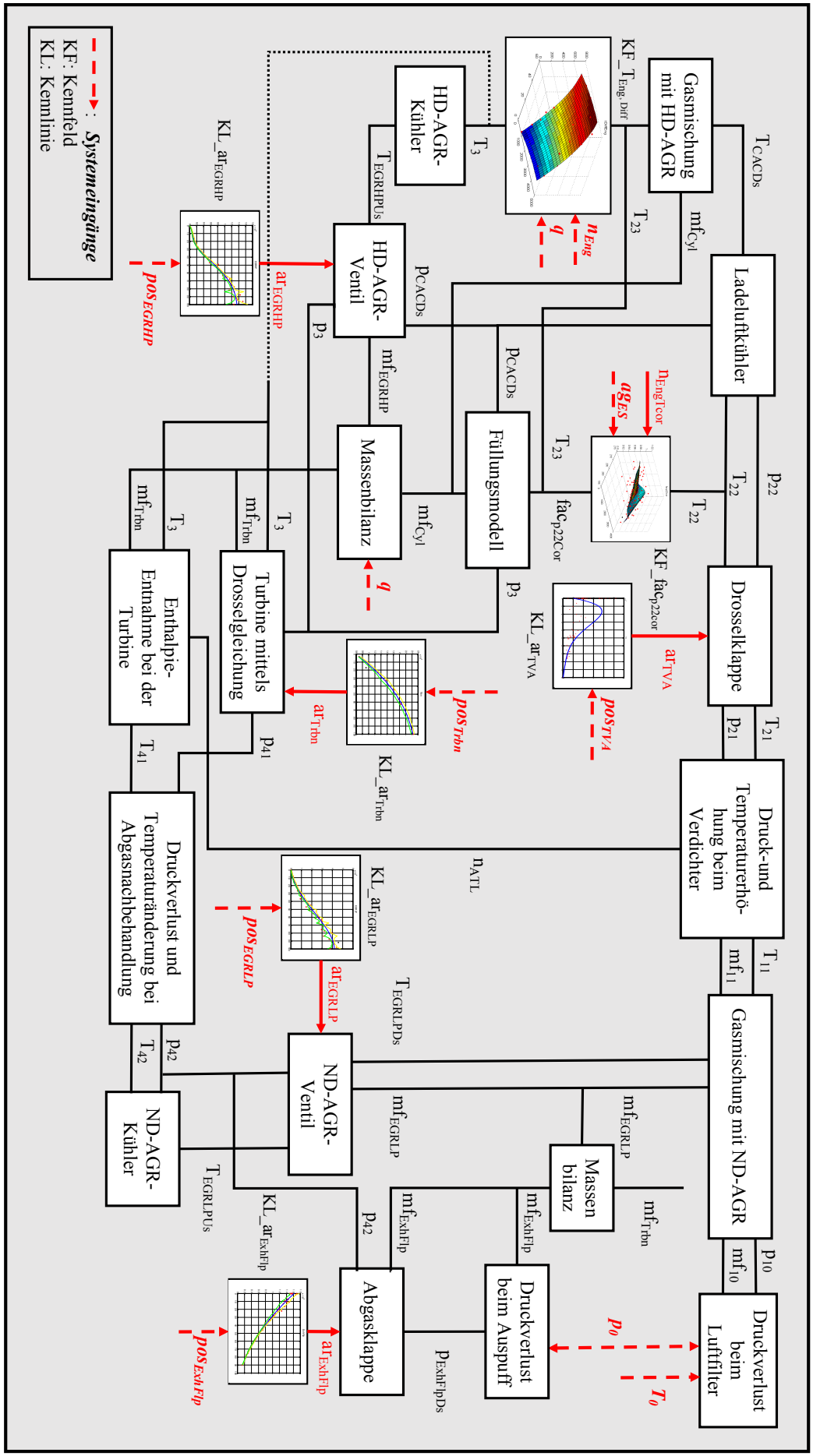


Abbildung 4.29: Das Luftsystemmodell im Detail; die gestrichelten Pfeile stehen für die Elemente im Eingangsvektor $\boldsymbol{U}$ und die Umgebungsgrößen; jeder Block in der Abbildung, der mit Text drin versehen ist, repräsentiert die entsprechende physikalische Gleichung im Luftsystemmodell.

$$\text{HD-AGR-Ventil: } \mathrm{ar}_{\mathrm{EGRHP}} = \mathrm{GPM}^{\mathrm{Akt}}_{\mathrm{arEGRHP}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{EGRHP}}) \tag{4.70}$$

$$\mathrm{mf}_{\mathrm{EGRHP}} = \sqrt{\frac{2}{RT_{\mathrm{EGRHPUs}}}}\mathrm{ar}_{\mathrm{EGRHP}} p_3 \Psi(\frac{p_{\mathrm{CACDs}}}{p_3}) \tag{4.71}$$

$$\text{ND-AGR-Ventil: } \mathrm{ar}_{\mathrm{EGRLP}} = \mathrm{GPM}^{\mathrm{Akt}}_{\mathrm{arEGRLP}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{EGRLP}}) \tag{4.72}$$

$$\mathrm{mf}_{\mathrm{EGRLP}} = \sqrt{\frac{2}{RT_{\mathrm{EGRLPUs}}}}\mathrm{ar}_{\mathrm{EGRLP}} p_{42} \Psi(\frac{p_{10}}{p_{42}}) \tag{4.73}$$

$$\text{Abgasklappe: } \mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp}} = \mathrm{GPM}^{\mathrm{Akt}}_{\mathrm{arExhFlp}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{ExhFlp}}) \tag{4.74}$$

$$\mathrm{mf}_{\mathrm{ExhFlp}} = \sqrt{\frac{2}{RT_{42}}}\mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp}} p_{42} \Psi(\frac{p_{\mathrm{ExhFlpDs}}}{p_{42}}) \tag{4.75}$$

$$\text{Drosselklappe: } \mathrm{ar}_{\mathrm{TVA}} = \mathrm{GPM}^{\mathrm{Akt}}_{\mathrm{arTVA}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{TVA}}) \tag{4.76}$$

$$\mathrm{mf}_{\mathrm{TVA}} = \sqrt{\frac{2}{RT_{21}}}\mathrm{ar}_{\mathrm{TVA}} p_{21} \Psi(\frac{p_{22}}{p_{21}}) \tag{4.77}$$

wobei die Gaskonstante $R = 287$ J/kg/K beträgt und der Isentropenexponent $\kappa = 1,4$ in der Durchflussfunktion Ψ ist. Wie sich in den Formeln (4.70), (4.72), (4.74) und (4.76) zeigt, wird die effektive Fläche des Ventils mithilfe des aktuellen Gaußprozessmodells durch Interpolation beim gewählten Tastverhältnis berechnet. Außerdem erweist sich die Drosselgleichung als ein geeigneter Ansatz für die Modellierung der Druckänderung über die Turbine mit VTG:

$$\text{Turbine mit VTG: } \mathrm{ar}_{\mathrm{Trbn}} = \mathrm{GPM}^{\mathrm{Akt}}_{\mathrm{arTrbn}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{Trbn}}) \tag{4.78}$$

$$\mathrm{mf}_{\mathrm{Trbn}} = \sqrt{\frac{2}{RT_3}}\mathrm{ar}_{\mathrm{Trbn}} p_3 \Psi(\frac{p_{41}}{p_3}) \tag{4.79}$$

Für die Modellierung der passiven Temperatursenkung beim HD-AGR-Kühler und der Abgasnachbehandlung und der aktiven Kühlung beim ND-AGR-Kühler und dem Ladeluftkühler des Gases im Luftsystem wird ein Ansatz basierend auf dem Kühlungswirkungsgrad eingesetzt, der vom Massenstrom abhängt. Des Weiteren werden die Temperaturen T_{Eng}, T_{EGRLPClg} und T_{CACClg} der Kühlmittel als Konstanten angenommen und mittels der Messdaten aus dem anfänglichen Experiment bestimmt. T_{Eng} ist die Wassertemperatur für die Motorkühlung. T_{EGRLPClg} und T_{CACClg} sind die Temperaturen der jeweils verwendeten Kühlmittel beim entsprechenden Kühler. Die dazugehörigen Gleichungen sind wie folgt:

$$\text{HD-AGR-Kühler: } \eta_{\text{EGRHPClg}} = \text{EM}^{\text{Akt}}_{\text{EGRHPClg}}(\text{mf}_{\text{EGRHP}}) \tag{4.80}$$

$$\eta_{\text{EGRHPClg}} = \frac{T_3 - T_{\text{EGRHPUs}}}{T_3 - T_{\text{Eng}}} \tag{4.81}$$

$$\text{Temperaturänderung bei der AGB: } \eta_{\text{EGTClg}} = \text{EM}^{\text{Akt}}_{\text{EGTClg}}(\text{mf}_{\text{Trbn}}) \tag{4.82}$$

$$\eta_{\text{EGTClg}} = \frac{T_{41} - T_{42}}{T_{41} - T_{Eng}} \tag{4.83}$$

$$\text{ND-AGR-Kühler: } \eta_{\text{EGRLPClg}} = \text{EM}^{\text{Akt}}_{\text{EGRLPClg}}(\text{mf}_{\text{EGRLP}}) \tag{4.84}$$

$$\eta_{\text{EGRLPClg}} = \frac{T_{42} - T_{\text{EGRLPUs}}}{T_{42} - T_{\text{EGRLPClg}}} \tag{4.85}$$

$$\text{Ladeluftkühler: } \eta_{\text{CACClg}} = \text{EM}^{\text{Akt}}_{\text{CACClg}}(\text{mf}_{11}) \tag{4.86}$$

$$\eta_{\text{CACClg}} = \frac{T_{22} - T_{\text{CACDs}}}{T_{22} - T_{\text{CACClg}}} \tag{4.87}$$

Dabei stehen die EM in den Formeln (4.80), (4.82), (4.84) und (4.86) für die empirischen Modelle, welche die Abhängigkeit des Kühlungswirkungsgrads vom jeweiligen Massenstrom beschreiben. In dieser Arbeit werden dafür Kennlinien verwendet, deren Generierung mittels der Messdaten aus dem anfänglichen Experiment erfolgt. Bei den Entnahmestellen von HD- und ND-AGR gilt der Massenerhaltungssatz mit folgenden Gleichungen:

$$\text{HD-AGR-Entnahmestelle: } \text{mf}_{\text{Cyl}} + q = \text{mf}_{\text{EGRHP}} + \text{mf}_{\text{Trbn}} \tag{4.88}$$

$$\text{ND-AGR-Entnahmestelle: } \text{mf}_{\text{Trbn}} = \text{mf}_{\text{EGRLP}} + \text{mf}_{\text{ExhFlp}} \tag{4.89}$$

Beim Füllungsmodell wird das über das Einlassventil zugeströmte Gas modelliert; die hauptsächlichen Einflussfaktoren sind Ladedruck p_{CACDs}, Abgasgegendruck p_3, Gastemperatur T_{23} und Motordrehzahl n_{Eng}. Da der Versuchsmotor mit variabler Ventilsteuerung ausgestattet ist, die zur Effizienzsteigerung beiträgt, spielt die Position ag_{ES} der Kurbelwelle beim Schließen des Einlassventils hier auch eine Rolle. Des Weiteren wird im Füllungsmodell ein Kennfeld für die Korrektur $\text{fac}_{\text{p22cor}}$ des Ladedrucks erstellt, das abhängig von ag_{ES} und der durch die Gastemperatur T_{23} im Saugrohr korrigierten Motordrehzahl n_{EngTcor} ist. Zusammengefasst sehen die Gleichungen fürs Füllungsmodell folgendermaßen aus:

$$\text{Korrektur der Motordrehzahl: } n_{\text{EngTCor}} = n_{\text{Eng}} \sqrt{\frac{T_{\text{EngRef}}}{T_{23}}} \tag{4.90}$$

$$\text{Korrektur des Ladedrucks: } \text{fac}_{\text{p22cor}} = \text{GPM}^{\text{Akt}}_{\text{fac}_{\text{p22cor}}}(n_{\text{EngTcor}}, \text{ag}_{\text{ES}}) \tag{4.91}$$

$$\text{Füllungsmodell: } \text{mf}_{\text{Cyl}} = \text{dmCyl}(T_{23}, T_3, \text{ag}_{\text{ES}}, \text{fac}_{\text{p22cor}}, n_{\text{Eng}}, p_{\text{CACDs}}, p_3) \tag{4.92}$$

Bei der Modellierung des Abgasturboladers (ATL) wird der Ansatz aus [HP13] herangezogen. Auf der Seite des Verdichters geht es im Wesentlichen um den Druckaufbau von p_{10} zu p_{21} und die Erhöhung der Gastemperatur von T_{11} zu T_{21}. Das ATL-System lässt sich mit folgenden Gleichungen beschreiben:

$$\text{Wirkungsgrad des Verdichters: } \eta_{\text{Cmpr}} = \text{EM}^{\text{Const}}_{\eta_{\text{Cmpr}}}(Q_{11}, \frac{p_{21}}{p_{10}}) \tag{4.93}$$

$$\text{Druckaufbau über den Verdichter: } p_{21} = p_{10}\left\{1 + \frac{\eta_{\text{Cmpr}}}{c_{p,11}T_{11}}(c_0\omega^2_{\text{ATL}} - c_1\frac{\text{mf}_{11}}{\rho_{11}}\omega_{\text{ATL}})\right\}^{\frac{c_{p,11}}{R}} \tag{4.94}$$

$$\text{Temperaturerhöhung über den Verdichter: } T_{21} = T_{11} + \frac{c_{p,11}}{\eta_{\text{Cmpr}}}\left\{(\frac{p_{21}}{p_{10}})^{\frac{R}{c_{p,11}}} - 1\right\} \tag{4.95}$$

Dabei wird das Kennfeld des Verdichterwirkungsgrads $\text{EM}^{\text{Const}}_{\eta_{\text{Cmpr}}}$, das vom Volumenstrom Q_{11} und dem Druckverhältnis $\frac{p_{21}}{p_{10}}$ abhängt, vom Hersteller geliefert und im gesamten Prozess nicht verändert. $c_{p,11}$ steht für die spezifische Wärmekapazität des Gases am Einlass des Verdichters und wird als Konstante behandelt, ohne die tatsächliche Gaszusammensetzung zu berücksichtigen. ω_{ATL} ist die Winkelgeschwindigkeit des Turboladers; für die Konvertierung zur Laderdrehzahl gilt $n_{\text{ATL}} = \frac{60\omega_{\text{ATL}}}{2\pi}$. Bei der Turbine wird die Enthalpie des heißen Abgases entzogen. Die dadurch gewonnene Energie treibt den Verdichter an. Somit kommen eine Temperatursenkung von T_3 zu T_{41} und ein Druckverlust von p_3 zu p_{41} über die Turbine zustande. Darüber hinaus entsteht ein Leistungsgleichgewicht zwischen Verdichter und Turbine im stationären Betrieb:

$$\text{Wirkungsgrad der Turbine: } \eta_{\text{Trbn}} = \text{EM}^{\text{Const}}_{\eta_{\text{Trbn}}}(\frac{p_3}{p_{41}}, \text{mf}_{\text{Trbn,Red}}) \tag{4.96}$$

$$\text{Temperaturabsenkung über die Turbine: } T_{41} = T_3\left\{1 - \eta_{\text{Trbn}} + (\frac{p_{41}}{p_3})^{\frac{R}{c_{p,3}}}\eta_{\text{Trbn}}\right\} \tag{4.97}$$

$$\text{Leistungsgleichgewicht: } P_{\text{Trbn}}\eta_{\text{Mech}} - P_{\text{Cmpr}} = \omega_{\text{ATL}}(M_{\text{fric}} + \dot{\omega}_{\text{ATL}}I_{\text{Cmpr}}) \tag{4.98}$$

Das Kennfeld für den Turbinenwirkungsgrad $\text{EM}^{\text{Const}}_{\eta_{\text{Trbn}}}$ sowie das Trägheitsmoment I_{Cmpr} des Verdichters werden vom Hersteller bereitgestellt. Der mechanische Wirkungsgrad η_{Mech} wird auf 95% gesetzt und das Reibungsmoment M_{fric} auf 0 Nm. Die Winkelbeschleunigung $\dot{\omega}_{\text{ATL}}$ des Turboladers ist zu vernachlässigen, da in dieser Arbeit nur die stationären Systemzustände abzubilden sind.

Für die Modellierung der Abgastemperatur T_3 wird ein einfacher Ansatz verwendet, der auf einem Kennfeld basiert. Mittels dieses Kennfelds wird die Temperaturdifferenz $T_{\text{Diff,Eng}}$ über den Zylinder abhängig von der Motordrehzahl n_{Eng} und der Einspritzmenge q interpoliert:

$$\text{Temperaturdifferenz über den Zylinder: } T_3 - T_{23} = \mathrm{GPM}^{\mathrm{Akt}}_{T_{\mathrm{Diff,Eng}}}(n_{\mathrm{Eng}}, q) \tag{4.99}$$

Wenn man die Gleichungen von Formel (4.63) bis Formel (4.99) zusammenstellt und versucht, sie mittels des Algorithmus aus [Fri06] oder [DM63] auf ihre Berechenbarkeit zu überprüfen, entpuppt sich dies ein großes und komplexes nichtlineares Gleichungssystem $\boldsymbol{G}$, das nicht kausal berechenbar ist, sondern simultan gelöst werden muss. Im Folgenden wird das Gleichungssystem formuliert:

$$\boldsymbol{G}(\boldsymbol{D}_{\mathrm{Sen,Pre}}, \boldsymbol{U}, \mathbf{EM}_{\mathrm{Akt}}, \mathbf{GPM}_{\mathrm{Akt}}, p_0, T_0) = 0 \rightarrow \boldsymbol{D}_{\mathrm{Sen,Pre}} \tag{4.100}$$

Dabei steht $\mathbf{GPM}_{\mathrm{Akt}}$ für die Menge der aktuellen Gaußprozessmodelle für die zu applizierenden empirischen Modelle. $\mathbf{EM}_{\mathrm{Akt}}$ ist die Menge der KF/KL, die für die Beschreibung der Komponentencharakteristiken verwendet werden. Sie werden entweder von den Herstellern zur Verfügung gestellt, z. B. das Verdichterkennfeld in Formel (4.93), oder mittels der Messdaten aus dem anfänglichen Experiment berechnet, beispielsweise die Kennlinie in Formel (4.86) für die Darstellung des Kühlungswirkungsgrads des Ladeluftkühlers. Während die Terme $\mathbf{EM}_{\mathrm{Akt}}$, $\mathbf{GPM}_{\mathrm{Akt}}$, p_0 und T_0 als Parametersatz für das Gleichungssystem aufgefasst werden können, stellt $\boldsymbol{D}_{\mathrm{Sen,Pre}}$ die Menge der unbekannten Größen in $\boldsymbol{G}$ dar. Zu $\boldsymbol{D}_{\mathrm{Sen,Pre}}$ gehören alle benötigten physikalischen Größen, um den stationären Motorzustand zu beschreiben. Es gilt $\boldsymbol{D}_{\mathrm{Sen,Pre}} = [\mathrm{mf}_{10,\mathrm{Pre}}, \mathrm{mf}_{\mathrm{EGRLP,Pre}}, \cdots, T_{21,\mathrm{Pre}}, T_{3,\mathrm{Pre}}, \cdots]$.

Da das Gleichungssystem $\boldsymbol{G} = 0$ aus nichtlinearen Teilgleichungen und stückweisen KF/KL in $\mathbf{EM}_{\mathrm{Akt}}$ besteht, kann keine Lösung in einer geschlossenen Form gefunden werden. Deswegen wird das Gleichungssystem $\boldsymbol{G} = 0$ in dieser Arbeit durch ein numerisches Verfahren nach $\boldsymbol{D}_{\mathrm{Sen,Pre}}$ aufgelöst.

Überprüfung der Umsetzbarkeit des ausgewählten Messpunkts

Wie bereits erwähnt wurde, stellt ein gewählter Eingangsvektor $\boldsymbol{U}$ einen entsprechenden Motorzustand ein. Oben ging es auch um die Frage, wie sich der Motor verhalten wird, wenn ein bestimmter Eingangsvektor eingestellt wird. Dabei wird versucht, mithilfe des Luftsystemmodells, das aus den datenbasierten Modellen $\mathbf{EM}_{\mathrm{Akt}}$ und $\mathbf{GPM}_{\mathrm{Akt}}$ und den physikalischen Gesetzen in den Gleichungen (4.63) bis (4.99) besteht, die Betriebszustände $\boldsymbol{D}_{\mathrm{Sen,Pre}}$ des Luftsystems zu prädizieren. Allerdings muss eine mathematisch sinnvolle Lösung des Gleichungssystems in Formel (4.100) physikalisch nicht unbedingt umsetzbar sein. Deswegen sind die vorhergesagten Motorzustände noch auf die Gefahr von Motorschäden zu prüfen. Konkret werden die Komponenten in $\boldsymbol{D}_{\mathrm{Sen,Pre}}$ mit den entsprechenden Grenzwerten aus Tabelle 4.4 verglichen, um die Umsetzbarkeit eines Messpunkts zu überprüfen.

Tabelle 4.4: Zusammenfassung der eingesetzten Motorgrenzen.

Motorgrenze	Grenzwert
Maximum des Ladedrucks: $p_{22,\mathrm{Max}}$	3200 hPa
Maximum des Abgasgegendrucks: $p_{31,\mathrm{Max}}$	4500 hPa
Maximum der Abgastemperatur: $T_{31,\mathrm{Max}}$	1103 K
Maximum der Laderdrehzahl: $n_{\mathrm{ATL,Max}}$	245000 rpm
Maximum der Gastemperatur im Einlasskrümmer: $T_{23,\mathrm{Max}}$	428 K
Maximum der Gastemperatur stromabwärts des Verdichters: $T_{21,\mathrm{Max}}$	483 K
Maximum der Gastemperatur stromabwärts des ND-AGR-Ventils: $T_{\mathrm{EGRLPDs,Max}}$	418 K
Maximum des Drucks stromaufwärts der Abgasklappe: $p_{42,\mathrm{Max}}$	p_0 + 650 hPa
Maximum des Drucks stromabwärts der Turbine: $p_{41,\mathrm{Max}}$	p_0 + 800 hPa
Rauchgrenze: λ_{Min}	Kennfeld abhängig von der Motordrehzahl n_{Eng} und der Luftmasse $\mathrm{mf}_{10,\mathrm{Pre}}$
Maximum der AGR-Rate: r_{Max}	Kennfeld abhängig von der Motordrehzahl n_{Eng} und der Einspritzmenge q

In Tabelle 4.4 geht es hauptsächlich um die Berücksichtigung der thermischen und mechanischen Grenzen der Motorkomponenten. Darüber hinaus ist eine ordentliche Verbrennung ebenfalls ein wichtiger Aspekt. Bei der Rauchgrenze geht es um die Beschränkung des Verbrennungsluftverhältnisses, das durch folgende Formel definiert wird ([BK66]):

$$\lambda_{\mathrm{Pre}} = \frac{m_{\mathrm{L.tats,Pre}}}{m_{\mathrm{L.st}}} \tag{4.101}$$

Dabei steht $m_{\mathrm{L.tats,Pre}}$ für die prädizierte zur Verfügung gestellte Frischluft, die mittels der Motordrehzahl und des prädizierten Frischluftmassenstroms $\mathrm{mf}_{10,\mathrm{Pre}}$ berechnet werden kann. Der Term $m_{\mathrm{L.st}}$ ist die notwendige stöchiometrische Frischluft, die theoretisch den eingespritzten Kraftstoff q vollständig umsetzen kann. Im Fall von Dieselmotoren lässt sich $m_{\mathrm{L.st}}$ leicht durch die Formel $m_{\mathrm{L.st}} = q * 14,5$ berechnen. Um den Motor vor massiven Rußemissionen zu schützen, muss das prädizierte Verbrennungsluftverhältnis λ_{Pre} größer als der minimale Wert λ_{Min} sein, der mittels eines Kennfelds interpoliert wird, das sich auf die Drehzahl und die Frischluftmasse bezieht. Das Kennfeld für die Rauchgrenze wird normalerweise aus Erfahrung erstellt.

Eine weitere Beschränkung, die sich als beachtenswert erwiesen hat, ist die AGR-Rate. Die prädizierte AGR-Rate r_{Pre} wird aufgrund der prädizierten Massenströme wie folgt berechnet:

$$r_{\mathrm{Pre}} = \frac{\mathrm{mf}_{\mathrm{EGRLP,Pre}} + \mathrm{mf}_{\mathrm{EGRHP,Pre}}}{\mathrm{mf}_{\mathrm{EGRLP,Pre}} + \mathrm{mf}_{\mathrm{EGRHP,Pre}} + \mathrm{mf}_{10,\mathrm{Pre}}} 100\% \tag{4.102}$$

Ihr Grenzwert r_{Max} wird aus einem Kennfeld abhängig von der Motordrehzahl und der Einspritzmenge durch Interpolation bestimmt. Das Kennfeld für die AGR-Rate wird normalerweise aus Erfahrung erstellt.

Zuletzt gibt es noch implizite Randbedingungen, die beachtet werden müssen, nämlich dass alle prädizierten Massenströme, Temperaturen, Drücke und Drehzahlen nicht negativ sein müssen. Während für physikalischen Größen wie Temperaturen, Drücke und Drehzahlen die Anforderung an die Positivität selbstverständlich ist, dürfen die Massenströme im Luftsystem nicht negativ sein, um das oben gebildete Luftsystemmodell einzuhalten. Wenn z. B. der Frischluft erlaubt würde, von der Frischluftseite zur Abgasseite über das ND-AGR-Ventil zu strömen, was zu einem negativen $\mathrm{mf}_{\mathrm{EGRLP}}$ führt und im realen Motorbetrieb durchaus passieren kann, müsste die Berechnung im Block „Gasmischung mit ND-AGR“ in Abbildung 4.29 auf der Abgasseite durchgeführt werden. Um damit umgehen zu können, müsste das Luftsystemmodell um eine Fallunterscheidung abhängig vom Vorzeichen von $\mathrm{mf}_{\mathrm{EGRLP}}$ erweitert werden, was den Implementierungsaufwand unnötigerweise erhöhen würde. Ein Luftsystemmodell, das nur nichtnegative Massenströme erlaubt, sollte ausreichend für die Modellierung des normalen Motorbetriebs sein und deswegen genügend Testfälle generieren können, um die Aufgaben der ECU-Funktionsapplikation durch-

zuführen. Wenn $\boldsymbol{D}_{\text{Sen,Pre}}$ dann zu einem kritischen Motorzustand führen würde, wird der Informationsgehalt des entsprechenden Eingangsvektors auf 0 gesetzt.

Schätzung der Unsicherheit des Applikationsparameters und Kalkulation des Informationsgehalts

Wie bereits in Abschnitt 4.4.1 erklärt wurde, ist die Unsicherheit eines Applikationsparameters, in diesem Beispiel die Varianz $\sigma^2_{\text{ar}_{\text{ExhFlp}}}$ der effektiven Fläche der Abgasklappe, von wesentlicher Bedeutung in der Auswertung des Informationsgehalts $\text{IG}_{\text{ar}_{\text{ExhFlp}}}$. In der ECU-Funktion für das Luftsystem wird die Kennlinie der effektiven Fläche $\text{ar}_{\text{ExhFlp}}(\text{pos}_{\text{ExhFlp}})$ der Abgasklappe eingesetzt, um den Druck p_{42} stromaufwärts der Abgasklappe zu modellieren. Dann wird durch folgende Gleichung appliziert:

$$\text{mf}_{\text{ExhFlp}} = \sqrt{\frac{2}{RT_{42}}}\text{ar}_{\text{ExhFlp}}(\text{pos}_{\text{ExhFlp}})p_{42}\Psi(\frac{p_{\text{ExhFlpDs}}}{p_{42}}) \rightarrow \text{ar}_{\text{ExhFlp}}(\text{pos}_{\text{ExhFlp}}) \tag{4.103}$$

Bemerkenswerterweise kann die effektive Fläche der Abgasklappe als Konstante betrachtet werden, wenn das Tastverhältnis $\text{pos}_{\text{ExhFlp}}$ eingestellt ist. D.h. in diesem Fall geht es um die Schätzung einer Konstanten basierend auf verrauschten Messwerten. Auf der einen Seite kann $\text{ar}_{\text{ExhFlp}}$ mithilfe der Formel (4.103) bestimmt werden, wobei die benötigten physikalischen Größen $\text{mf}_{\text{ExhFlp,Pre}}$, $T_{42,\text{Pre}}$, $p_{42,\text{Pre}}$ und $p_{\text{ExhFlpDs,Pre}}$ aus der Menge der prädizierten Systembeobachtungen $\boldsymbol{D}_{\text{Sen,Pre}}$ zu entnehmen sind. Auf der anderen Seite kann $\text{ar}_{\text{ExhFlp}}$ auch aufgrund des aktuellen Gaußprozessmodells $\text{GPM}^{\text{Akt}}_{\text{arExhFlp}}$ berechnet werden. Zusammengefasst kann die Bestimmung von $\text{ar}_{\text{ExhFlp}}$ bei einem gewählten $\text{pos}_{\text{ExhFlp}}$ durch folgende zwei Formeln dargestellt werden:

$$\text{mf}_{\text{ExhFlp,Pre}} = \sqrt{\frac{2}{RT_{42,\text{Pre}}}}\text{ar}_{\text{ExhFlp}}(\text{pos}_{\text{ExhFlp}})p_{42,\text{Pre}}\Psi(\frac{p_{\text{ExhFlpDs,Pre}}}{p_{42,\text{Pre}}}) \rightarrow \text{ar}_{\text{ExhFlp,Pre}} \tag{4.104}$$

$$\text{GPM}^{\text{Akt}}_{\text{arExhFlp}}(\text{pos}_{\text{ExhFlp}}) \rightarrow \text{ar}_{\text{ExhFlp,Pri}} \tag{4.105}$$

Gleich wie in Abschnitt 4.4.2 wird ein EKF eingesetzt, um die zwei Methoden für die Schätzung der effektiven Fläche in den Formeln (4.104) und (4.105) unter einen Hut zu bringen und damit ein besseres Ergebnis zu erzielen. Die Einführung eines EKF ist durch die Nichtlinearität der Durchflussfunktion $\Psi(\frac{p_{\text{ExhFlpDs}}}{p_{42}})$ in Formel (4.103) begründet. Aus Sicht des EKF lässt sich das System, das durch Formel (4.103) dargestellt wird, wie folgt beschreiben:

$$\boldsymbol{s}_{j+1} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{s}_j) + \boldsymbol{w}, \quad p(\boldsymbol{w}) \sim \mathcal{N}(0, \boldsymbol{Q}) \tag{4.106}$$

$$\boldsymbol{z}_{j+1} = \boldsymbol{h}(\boldsymbol{s}_{j+1}) + \boldsymbol{v}, \quad p(\boldsymbol{v}) \sim \mathcal{N}(0, \boldsymbol{R}) \tag{4.107}$$

Dabei sind Zustandsvektor $\boldsymbol{s}$ und Ausgangsvektor $\boldsymbol{z}$

$$\boldsymbol{s} = [\mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp}}, p_{42}, p_{\mathrm{ExhFlpDs}}, T_{42}]^T \tag{4.108}$$

$$\boldsymbol{z} = [\mathrm{mf}_{\mathrm{ExhFlp}}, p_{42}, p_{\mathrm{ExhFlpDs}}, T_{42}]^T \tag{4.109}$$

Da es hier um ein System ohne zeitvariablen Zustandsübergang geht (Schätzung einer Konstante), ist das Übergangsmodell $\boldsymbol{f}$ durch eine 4×4-Einheitsmatrix gegeben. Für die Kovarianzmatrix des Prozessfehlers gilt $\boldsymbol{Q} = 0$. Außerdem kann das Beobachtungsmodell $\boldsymbol{h}$ wie folgt formuliert werden:

$$\mathrm{mf}_{\mathrm{ExhFlp}} = \sqrt{\frac{2}{RT_{42}}}\mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp}} p_{42} \Psi(\frac{p_{\mathrm{ExhFlpDs}}}{p_{42}}) + \sigma^2_{\mathrm{mf}_{\mathrm{ExhFlp}}} \tag{4.110}$$

$$p_{42} = p_{42} + \sigma^2_{p_{42}} \tag{4.111}$$

$$p_{\mathrm{ExhFlpDs}} = p_{\mathrm{ExhFlpDs}} + \sigma^2_{p_{\mathrm{ExhFlpDs}}} \tag{4.112}$$

$$T_{42} = T_{42} + \sigma^2_{T_{42}} \tag{4.113}$$

Die Toleranzen der Sensoren, die von den Sensorherstellern zur Verfügung gestellt werden, formen die Kovarianzmatrix des Messfehlers zu

$$\boldsymbol{R} = \mathrm{diag}(\sigma^2_{\mathrm{mf}_{\mathrm{ExhFlp}}}, \sigma^2_{p_{42}}, \sigma^2_{p_{\mathrm{ExhFlpDs}}}, \sigma^2_{T_{42}}) \tag{4.114}$$

Das EKF-Verfahren setzt sich aus zwei Arbeitsschritten zusammen:

<u>Schritt der Prädiktion</u>
Hierbei wird der Übergang von j-ter Iteration zu $(j+1)$-ter Iteration wie folgt prädiziert:

$$\hat{\mathrm{s}}_{j+1|j} = \boldsymbol{F}_j(\boldsymbol{s}_j) \tag{4.115}$$

$$\boldsymbol{P}_{j+1|j} = \boldsymbol{F}_j \boldsymbol{P}_{j|j} \boldsymbol{F}_j^T \tag{4.116}$$

Dabei werden die a-priori-Systemzustände $\boldsymbol{s}_j$ und die a-priori-Kovarianzmatrix $\boldsymbol{P}_{j|j}$ durch

$$\boldsymbol{s}_j = [\mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp,Pri}}, p_{42,\mathrm{Pre}}, p_{\mathrm{ExhFlpDs,Pre}}, T_{42,\mathrm{Pre}}]^T \tag{4.117}$$

$$\boldsymbol{P}_{j|j} = \mathrm{diag}(\sigma^2_{\mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp}},\mathrm{Pri}}, \sigma^2_{p_{42}}, \sigma^2_{p_{\mathrm{ExhFlpDs}}}, \sigma^2_{T_{42}}) \tag{4.118}$$

spezifiziert. $\boldsymbol{F}_j$ ist die Jacobi-Matrix des Übergangsmodells $\boldsymbol{f}$, auch eine 4×4-Einheitsmatrix. Die a-priori-Schätzung $\mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp,Pri}}$ von $\mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp}}$ und ihrer Varianz $\sigma^2_{\mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp}},\mathrm{Pri}}$ kann man mithilfe des $\mathrm{GPM}^{\mathrm{Akt}}_{\mathrm{arExhFlp}}$ berechnen. Eigentlich repräsentiert das $\mathrm{GPM}^{\mathrm{Akt}}_{\mathrm{arExhFlp}}$ alle Informationen, die bis zu der aktuellen Iteration über das gesuchte empirische Modell

$\mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{ExhFlp}})$ gesammelt werden. Während das Kalman-Filter allgemein eine optimale Schätzung aufgrund der zeitlichen Messwerte liefert, basiert das EKF in der vorliegenden Arbeit auf den iterationsübergreifenden Messwerten, wobei eine Iteration als ein Zeitpunkt verstanden wird.

Schritt der Korrektur

In diesem Schritt wird versucht, eine a-posteriori-Schätzung der Systemzustände mit folgenden Formeln zu liefern:

$$\hat{\boldsymbol{z}}_{j+1|j} = \boldsymbol{h}(\hat{\boldsymbol{s}}_{j+1|j}) \tag{4.119}$$

$$\boldsymbol{K}_{j+1} = \boldsymbol{P}_{j+1|j}\boldsymbol{H}_{j+1}^T(\boldsymbol{H}_{j+1}\boldsymbol{P}_{j+1|j}\boldsymbol{H}_{j+1}^T + \boldsymbol{R}) \tag{4.120}$$

$$\hat{\boldsymbol{s}}_{j+1|j+1} = \hat{\boldsymbol{s}}_{j+1|j} + \boldsymbol{K}_{j+1}(\boldsymbol{z}_{j+1} - \hat{\boldsymbol{z}}_{j+1|j}) \tag{4.121}$$

$$\boldsymbol{P}_{j+1|j+1} = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{K}_{j+1}\boldsymbol{H}_{j+1})\boldsymbol{P}_{j+1|j} \tag{4.122}$$

Die Jacobi-Matrix $\boldsymbol{H}_{j+1} = \frac{\partial \boldsymbol{h}(\hat{\boldsymbol{s}}_{j+1|j})}{\partial \boldsymbol{s}}$ des Beobachtungsmodells wird berechnet am prädizierten Arbeitspunkt der Formel (4.103), der durch $\boldsymbol{D}_{\mathrm{arExhFlp,Pre}} = [\mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp,Pri}}, p_{\mathrm{ExhFlpDs,Pre}}, p_{42,\mathrm{Pre}}, T_{42,\mathrm{Pre}}]^T$ definiert wird. $\boldsymbol{H}_{j+1}$ ist in diesem Fall

$$\boldsymbol{H}_{j+1} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathrm{mf}_{\mathrm{ExhFlp}}}{\partial \mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp}}} & \frac{\partial \mathrm{mf}_{\mathrm{ExhFlp}}}{\partial p_{42}} & \frac{\partial \mathrm{mf}_{\mathrm{ExhFlp}}}{\partial p_{\mathrm{ExhFlpDs}}} & \frac{\partial \mathrm{mf}_{\mathrm{ExhFlp}}}{\partial T_{42}} \\ \frac{\partial p_{42}}{\partial ar_{\mathrm{ExhFlp}}} & \frac{\partial p_{42}}{\partial p_{42}} & \frac{\partial p_{42}}{\partial p_{\mathrm{ExhFlpDs}}} & \frac{\partial p_{42}}{\partial T_{42}} \\ \frac{\partial p_{\mathrm{ExFlpDs}}}{\partial \mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp}}} & \frac{\partial p_{\mathrm{ExFlpDs}}}{\partial p_{42}} & \frac{\partial p_{\mathrm{ExFlpDs}}}{\partial p_{\mathrm{ExhFlpDs}}} & \frac{\partial p_{\mathrm{ExFlpDs}}}{\partial T_{42}} \\ \frac{\partial T_{42}}{\partial \mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp}}} & \frac{\partial T_{42}}{\partial p_{42}} & \frac{\partial T_{42}}{\partial p_{\mathrm{ExhFlpDs}}} & \frac{\partial T_{42}}{\partial T_{42}} \end{pmatrix} \tag{4.123}$$

Es muss beachtet werden, dass die Berechnung in Formel (4.121) noch nicht ausführbar ist, da die Messwerte $\boldsymbol{z}_{j+1}$ noch fehlen. Allerdings ist die Schätzung der Kovarianzmatrix $\boldsymbol{P}_{j+1|j+1}$ schon berechenbar. Auf diese Art und Weise kann die a-posteriori-Schätzung $\sigma^2_{\mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp}},j+1,\mathrm{Post}}$ der Unsicherheit der effektiven Fläche durch den Einsatz eines EKF bewerkstelligt werden, *bevor* ein echtes Experiment durchgeführt wird.

Nachdem die Unsicherheit $\sigma^2_{\mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp}},j+1,\mathrm{Post}}$ des Applikationsparameters geschätzt wurde, kann man mithilfe der Formel (4.30) den Informationsgehalt $\mathrm{IG}_{\mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp}}}(\mathbf{GPM}_j, \boldsymbol{U}_{j+1})$ für die Applikation der Abgasklappe berechnen. Die Berechnung des Informationsgehalts für andere KF/KL, z. B. $\mathrm{IG}_{\mathrm{ar}_{\mathrm{TVA}}}$ und $\mathrm{IG}_{\mathrm{ar}_{\mathrm{Trbn}}}$, erfolgt in einer ähnlichen Vorgehensweise und wird deshalb nicht im Detail geschildert. Zu beachten ist, wie Abbildung 4.25 zeigt, dass die Ergebnisse der Lösung des Gleichungssystems $\boldsymbol{G} = 0$ in Formel (4.100), die prädizierte Systembeobachtung $\boldsymbol{D}_{\mathrm{Sen,Pre}}$, von den Berechnungen der Informationsgehalte bei anderen empirischen Modellen geteilt werden. Letztendlich kann die Informationssumme $\mathrm{IG}(\mathbf{GPM}_j, \boldsymbol{U}_{j+1})$ eines gewählten Eingangsvektors wie in Formel (4.62) berechnet werden.

5 Algorithmus, Experimente und Ergebnisse

5.1 Übersicht über den Algorithmus

In diesem Abschnitt wird versucht, einen Überblick über den entwickelten Algorithmus für den gesamten Applikationsprozess der gesuchten empirischen Modelle zu geben. Mit Abbildung 5.1 wird der Ablauf erklärt.

Das Verfahren setzt sich aus zwei Phasen zusammen: der anfänglichen Versuchsplanung und der adaptiven Versuchsplanung. In der anfänglichen Versuchsplanung werden die anfänglichen Gaußprozessmodelle $\mathbf{GPM}_0$ für alle empirischen Modelle zur Verfügung gestellt. Bei der adaptiven Versuchsplanung geht es um eine schrittweise und aktive Erweiterung der Messpunktmenge in Richtung der Maximierung der Informationsgehalte der Messpunktmenge. Die Details der Implementierung der anfänglichen und adaptiven Versuchsplanung werden in den Abschnitten 5.1.1 und 5.1.2 dargestellt.

5.1.1 Anfängliche Versuchsplanung

In dieser Phase besteht die Aufgabe darin, $\mathbf{GPM}_0$ zu erstellen. Die benötigten Applikationsmesspunkte $\boldsymbol{D}_{\mathrm{App},0}$ für das Modelltraining sind durch den anfänglichen Versuchsplan zu erzeugen. Die dabei verwendete Abtaststrategie soll eine raumfüllende Strategie sein. In diesem Anwendungsbeispiel wird die äquidistante Abtaststrategie wegen ihrer Einfachheit und Robustheit bevorzugt. In der Applikation des Luftsystems haben wir 8 Eingänge. Bei jeder Dimension ist erfahrungsgemäß ein 5×1-Gitter notwendig, um einen groben Eindruck über das gesuchte empirische Modell zu erhalten. Für das Erstellen des Gitters sind noch ein paar Eckdaten über den Motor notwendig, z. B. der Umfang des Motorbetriebsbereichs und die Grenze von $\mathrm{ag}_{\mathrm{ES}}$. Um dem Fluch der Dimension zu entgehen, weil sonst die Anzahl von Messpunkten in der anfänglichen Versuchsplanung schon 5^8 ist, wird auf das Prinzip OFAT bei der Variation der Systemeingänge verzichtet. Stattdessen wird erlaubt, bei der Versuchsplanung die Eingänge in mehreren Dimensionen gleichzeitig anzupassen. Der anfängliche Versuchsplan wird basierend auf dem Motorbetriebsbereich entworfen. Die Details lassen sich folgendermaßen zusammenfassen:

- Da im Moment eine genaue und zuverlässige Messtechnik für den AGR-Massenstrom am Motorprüfstand noch fehlt, erfolgt die Bestimmung des AGR-Massenstroms lediglich mit der Formel $\mathrm{mf}_{\mathrm{EGR}} = \mathrm{mf}_{\mathrm{Cyl}} - \mathrm{mf}_{\mathrm{Air}}$. Infolgedessen ist es notwendig, zuerst mittels Messpunkten ohne AGR ein verlässliches Modell für die Zylinderfüllung zu erstellen.

- Zunächst wird ein 5×5-Gitter von Messpunkten $\boldsymbol{D}_{\mathrm{oA},0}$ ohne AGR auf dem Motorbetriebsbereich platziert, der durch die Drehzahl und die Einspritzmenge aufgespannt

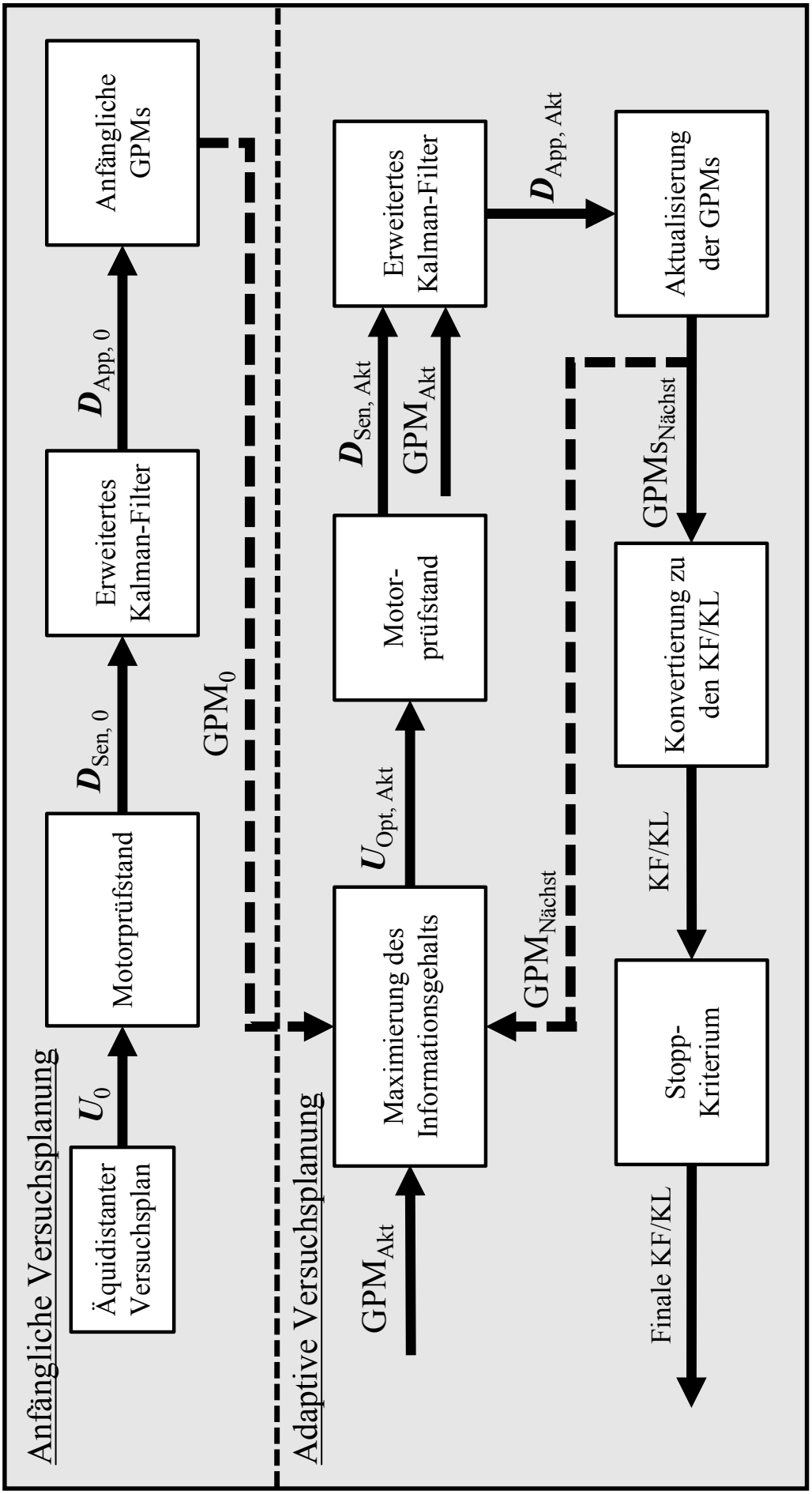


Abbildung 5.1: Überblick über das gesamte Verfahren; die gestrichelten Linien stellen Verbindungen dar, die nicht in der aktuellen Iteration genutzt werden.

wird. Für die Spezifikation der Messpunkte bei $\boldsymbol{D}_{\mathrm{oA},0}$ reicht die Vorgabe von n_{Eng} und q nicht aus. Dabei müssen noch die Tastverhältnisse der Luftsteller und der Zeitpunkt des Einlassventilschließens eingestellt werden. Dadurch kann man dafür sorgen, dass die Eingangsräume für die empirischen Modelle $\mathrm{ar}_{\mathrm{TVA}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{TVA}})$, $\mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{ExhFlp}})$, $\mathrm{ar}_{\mathrm{Trbn}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{Trbn}})$, $\mathrm{fac}_{\mathrm{p22cor}}(n_{\mathrm{EngTCorrn}}, \mathrm{ag}_{\mathrm{ES}})$ und $T_{\mathrm{Eng,Diff}}(n_{\mathrm{Eng}}, q)$ durch Applikationsmesspunkte gefüllt werden. Wegen des Themas Motorschutz verlangt die Verstellung der Luftsteller Vorwissen über das Motorverhalten und sollte mit Vorsicht durchgeführt werden. Dieses Vorwissen kann auf Erfahrungen an einem ähnlichen Motor oder komplett auf theoretischen Überlegungen beruhen.

- Mittels der nach dem anfänglichen Versuchsplan durchgeführten Experimente werden die Beobachtungsmesspunkte vermessen. Aufgrund der Beobachtungsmesspunkte werden die anfänglichen Applikationsmesspunkte durch ein EKF berechnet, wobei die a-priori-Schätzungen der Varianzen der Systemzustände auf unendlich gesetzt werden. Mittels der erzeugten Applikationsmesspunkte werden die anfänglichen Gaußprozessmodelle $\mathrm{fac}_{\mathrm{p22cor},0}$, $T_{\mathrm{Eng,Diff},0}$, $\mathrm{ar}_{\mathrm{TVA},0}$, $\mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp},0}$ und $\mathrm{ar}_{\mathrm{Trbn},0}$ trainiert.

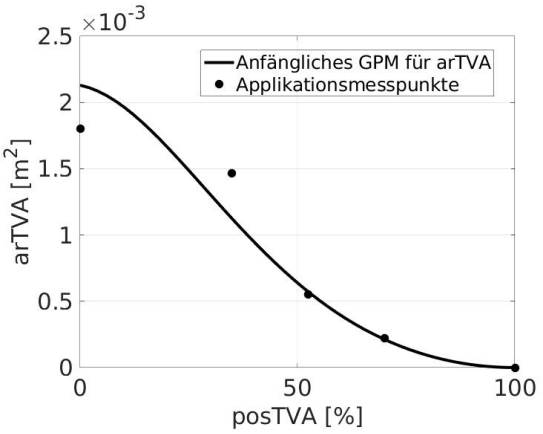
- Für die Erstellung der anfänglichen Gaußprozessmodelle $\mathrm{ar}_{\mathrm{EGRHP},0}$ und $\mathrm{ar}_{\mathrm{EGRLP},0}$ der AGR-Ventile wird jeweils ein 6×1-Gitter von Messpunkten auf dem Eingangsraum platziert. Für die Bestimmung der AGR-Massenströme wird die Formel $\mathrm{mf}_{\mathrm{EGR}} = \mathrm{mf}_{\mathrm{Cyl}} - \mathrm{mf}_{\mathrm{Air}}$ verwendet, wobei die Zylinderfüllung $\mathrm{mf}_{\mathrm{Cyl}}$ mithilfe der Formel (4.92) berechnet wird. Außerdem ist es noch zu beachten, dass bei der anfänglichen Versuchsplanung das HD-AGR-Ventil und das ND-AGR-Ventil nicht gleichzeitig geöffnet werden dürfen, da sonst die AGR-Massenströme nicht richtig bestimmt werden können.

Als Ergebnis der anfänglichen Versuchsplanung sind in den Abbildungen 5.2 und 5.3 die erzeugten anfänglichen Applikationsmesspunkte und Gaußprozessmodelle veranschaulicht.

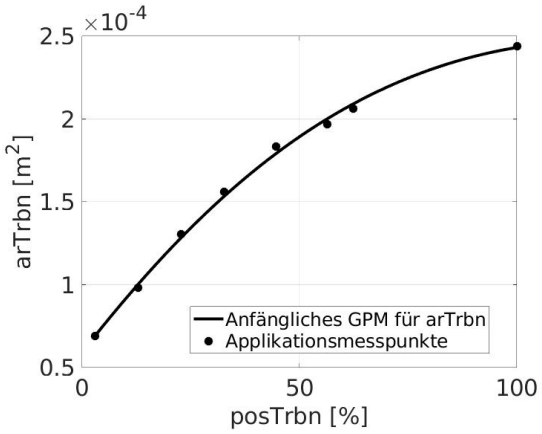
5.1.2 Adaptive Versuchsplanung

In dieser Phase wird als Erstes versucht, basierend auf der Menge $\mathbf{GPM}_{\mathrm{Akt}}$[31] der aktuellen Gaußprozessmodelle das Optimierungsproblem in Formel (4.61) zu lösen, was den optimalen Eingangsvektor $\boldsymbol{u}_{\mathrm{Opt,Akt}}$ liefert. Der Suchraum $\mathcal{U}_{\mathrm{Opt,Akt}}$ des Optimierungsproblems ist ein ganzzahliger achtdimensionaler Raum und wird durch die unbenutzten Elemente aus der jeweiligen Eingangsdimension zusammengebaut. Und zwar gilt $\mathcal{U}_{\mathrm{Akt}} = [\mathcal{U}_{\mathrm{pos}_{\mathrm{TVA}},\mathrm{Akt}}, \mathcal{U}_{\mathrm{pos}_{\mathrm{Trbn}},\mathrm{Akt}}, \mathcal{U}_{\mathrm{pos}_{\mathrm{EGRHP}},\mathrm{Akt}}, \mathcal{U}_{\mathrm{pos}_{\mathrm{EGRLP}},\mathrm{Akt}}, \mathcal{U}_{\mathrm{pos}_{\mathrm{ExhFlp}},\mathrm{Akt}}, \mathcal{U}_{q,\mathrm{Akt}}, \mathcal{U}_{n_{\mathrm{Eng,Akt}}}, \mathcal{U}_{\mathrm{ag}_{\mathrm{ES}},\mathrm{Akt}}]$, wobei beispielsweise $\mathcal{U}_{\mathrm{pos}_{\mathrm{TVA}}}$ für die Menge der unbenutzten Elemente im Eingangsraum von $\mathrm{pos}_{\mathrm{TVA}}$ steht. Wenn wir uns die Informationsfunktion in Formel (4.61) als Zielfunktion

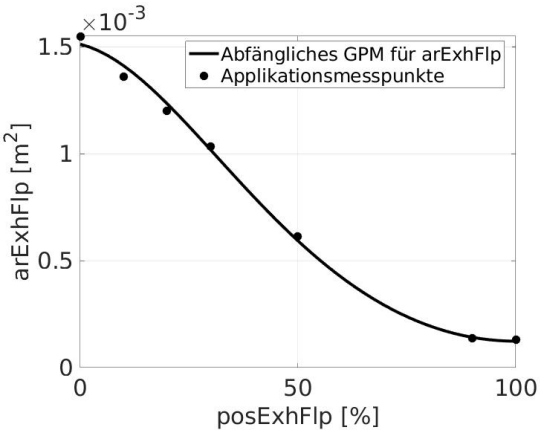
[31] $\mathbf{GPM}_{\mathrm{Akt}} = [\mathrm{GPM}_{\mathrm{ar}_{\mathrm{TVA}}}, \mathrm{GPM}_{\mathrm{ar}_{\mathrm{Trbn}}}, \mathrm{GPM}_{\mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp}}}, \mathrm{GPM}_{\mathrm{ar}_{\mathrm{EGRHP}}}, \mathrm{GPM}_{\mathrm{ar}_{\mathrm{EGRLP}}}, \mathrm{GPM}_{\mathrm{fac}_{\mathrm{p22cor}}}, \mathrm{GPM}_{\mathrm{T}_{\mathrm{Diff,Eng}}}]$.



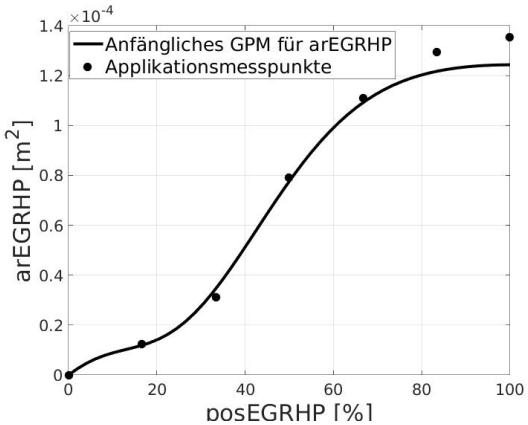
(a) Verteilung der anfänglichen Applikationsmesspunkte $\boldsymbol{D}_{\mathrm{App},0,\mathrm{ar}_{\mathrm{TVA}}}$ und das anfängliche Gaußprozessmodell für das empirische Modell $\mathrm{ar}_{\mathrm{TVA}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{TVA}})$.



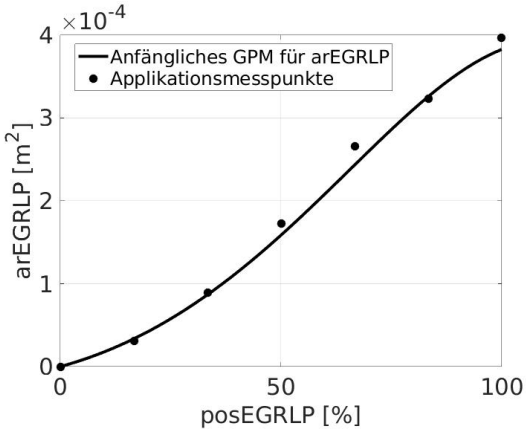
(b) Verteilung der anfänglichen Applikationsmesspunkte $\boldsymbol{D}_{\mathrm{App},0,\mathrm{ar}_{\mathrm{Trbn}}}$ und das anfängliche Gaußprozessmodell für das empirische Modell $\mathrm{ar}_{\mathrm{Trbn}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{Trbn}})$.



(c) Verteilung der anfänglichen Applikationsmesspunkte $\boldsymbol{D}_{\mathrm{App},0,\mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp}}}$ und das anfängliche Gaußprozessmodell für das empirische Modell $\mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{ExhFlp}})$.

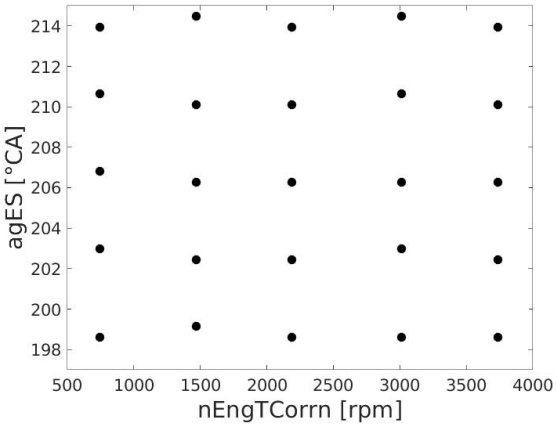


(d) Verteilung der anfänglichen Applikationsmesspunkte $\boldsymbol{D}_{\mathrm{App},0,\mathrm{ar}_{\mathrm{EGRHP}}}$ und das anfängliche Gaußprozessmodell für das empirische Modell $\mathrm{ar}_{\mathrm{EGRHP}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{EGRHP}})$.

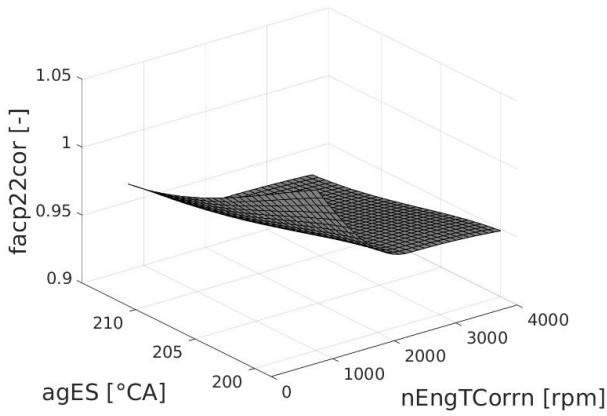


(e) Verteilung der anfänglichen Applikationsmesspunkte $\boldsymbol{D}_{\mathrm{App},0,\mathrm{ar}_{\mathrm{EGRLP}}}$ und das anfängliche Gaußprozessmodell für das empirische Modell $\mathrm{ar}_{\mathrm{EGRLP}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{EGRLP}})$.

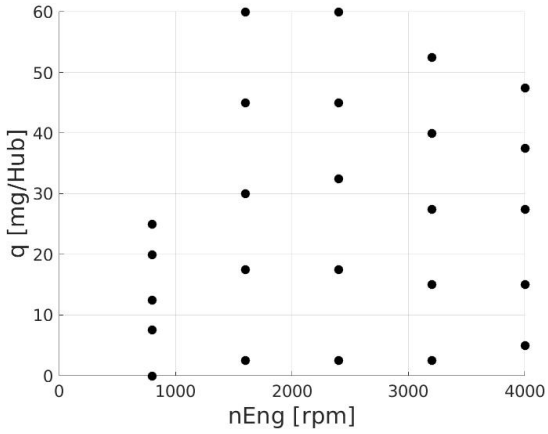
Abbildung 5.2: Anfängliche Applikationsmesspunkte und Gaußprozessmodelle.



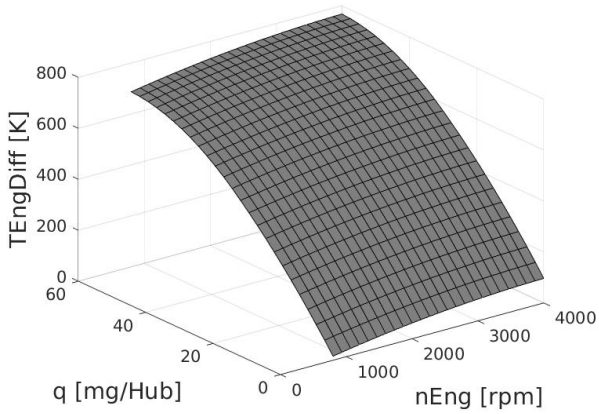
(a) Verteilung der anfänglichen Applikationsmesspunkte $\boldsymbol{D}_{\mathrm{App},0,\mathrm{fac}_{\mathrm{p22cor}}}$ auf dem Eingangsraum des empirische Modells $\mathrm{fac}_{\mathrm{p22cor}}(n_{\mathrm{EngTCorrn}}, \mathrm{ag}_{\mathrm{ES}})$; die Verteilung ist hierbei ein Rechteck.



(b) Anfängliches Gaußprozessmodell für das empirische Modell $\mathrm{fac}_{\mathrm{p22cor}}(n_{\mathrm{EngTCorrn}}, \mathrm{ag}_{\mathrm{ES}})$.



(c) Verteilung der Applikationsmesspunkte $\boldsymbol{D}_{\mathrm{App},0,T_{\mathrm{Diff,Eng}}}$ auf dem Eingangsraum des empirischen Modells $T_{\mathrm{Diff,Eng}}(n_{\mathrm{Eng}}, q)$; die Verteilung, die kein Rechteck ist, ergibt sich aus der Beschränkung des Motorbetriebsbereichs.



(d) Anfängliches Gaußprozessmodell für das empirische Modell $T_{\mathrm{Diff,Eng}}(n_{\mathrm{Eng}}, q)$.

Abbildung 5.3: Weitere anfängliche Applikationsmesspunkte und die dadurch trainierten anfänglichen Gaußprozessmodelle.

näher anschauen, stellt sich heraus, dass die analytische Ableitung der Informationsfunktion sehr schwer oder nahezu unmöglich zu berechnen ist, denn:

- Die Berechnung des Informationsgehalts enthält das Lösen des Gleichungssystems in Formel (4.100).
- Das Ausschließen der Messpunkte, welche die Motorgrenzen verletzen, verstärkt die Unstetigkeit der Informationsfunktion.

Für Optimierungsprobleme dieser Art erweist sich ein ableitungsfreies Optimierungsverfahren wie ein genetischer Algorithmus (GA) als zweckmäßiger Ansatz. In der vorliegenden Arbeit wurde die in Matlab eingebaute Funktion *ga* für die Suche nach $\boldsymbol{U}_{\text{Opt,Akt}}$ erfolgreich eingesetzt. Das Optimierungsverfahren dauert mit einem Arbeitslaptop ca. zwei bis drei Minuten.

Anschließend wird der Motorprüfstand mit $\boldsymbol{U}_{\text{Opt,Akt}}$ gespeist und die Experimente durchgeführt. Man muss mindestens zwei Minuten warten, bis sich die Messsignale stabilisieren. Dadurch können die Beobachtungsmesspunkte $\boldsymbol{D}_{\text{Sen,Akt}}$ erfasst werden. Auf der Basis von $\mathbf{GPM}_{\text{Akt}}$ und $\boldsymbol{D}_{\text{Sen,Akt}}$ können die Applikationsparameter und deren Varianzen mittels eines EKF durch ein ähnliches Verfahren wie in Abschnitt 4.6.2 geschätzt werden. Diesmal können die a-posteriori-Systemzustände $\hat{\mathbf{s}}_{j+1|j+1}$ in Formel (4.121) anhand der realen Messdaten berechnet werden. Somit kann die Menge $\boldsymbol{D}_{\text{App,Akt}}$[32] der Applikationsmesspunkte erzeugt und als Trainingsdatensatz für die Aktualisierung von $\mathbf{GPM}_{\text{Akt}}$ verwendet werden. Danach werden die aktualisierten Gaußprozessmodelle in KF/KL konvertiert. Der Prozess der adaptiven Versuchsplanung setzt sich fort, bis das in Abschnitt 4.3.3 entwickelte Stopp-Kriterium für alle empirische Modelle erfüllt ist.

5.2 Experimente und Ergebnisse

In diesem Abschnitt werden zunächst die Details des Versuchsaufbaus vorgestellt. Danach werden die Ergebnisse erläutert und analysiert.

5.2.1 Versuchsaufbau

Die Kenndaten des Versuchsmotors sind Tabelle 5.1 zu entnehmen.

[32] $\boldsymbol{D}_{\text{App}} = [\boldsymbol{D}_{\text{App,ar}_{\text{TVA}}}, \boldsymbol{D}_{\text{App,ar}_{\text{Trbn}}}, \boldsymbol{D}_{\text{App,ar}_{\text{ExhFlp}}}, \boldsymbol{D}_{\text{App,ar}_{\text{EGRHP}}}, \boldsymbol{D}_{\text{App,ar}_{\text{EGRLP}}}, \boldsymbol{D}_{\text{App,fac}_{\text{p22cor}}}, \boldsymbol{D}_{\text{App,T}_{\text{Diff,Eng}}}]$.

Eigenschaft	Versuchsmotor
Hubraum	1,6 l
Nennleistung	110 kW
Max. Drehmoment	340 Nm
Aufladungssystem	Abgasturboladung mit VTG
AGR-System	HD- und ND-AGR
Ventilsteuerung	Variables Einlassventilschließen

Tabelle 5.1: Kenndaten des Versuchsmotors.

Automatisierung des Vermessungsvorgangs

Während die Maximierung des Informationsgehalts eines Systemeingangs den benötigten Messaufwand für die ECU-Funktionsapplikation wesentlich reduziert, ist ein Vermessungsvorgang mit einem hohen Maß an Automatisierung in der Lage, unnötige menschliche Eingriffe massiv zu vermeiden, was auch dazu beiträgt, die Effizienz des Applikationsprozesses zu verbessern. Die Erstellung, Steuerung und Anpassung des Versuchsplans am Prüfstand wird ausgeführt durch Matlab, die Applikationssoftware INCA und PUMA, die für Steuerung und Überwachung des Prüfstands zuständig sind. Da der Hauptteil des Algorithmus, um die Aktivitäten am Motorprüfstand zu steuern, in Matlab implementiert ist, muss ein stabiler Kommunikationskanal zwischen Matlab und INCA aufgebaut werden. Zu diesem Zweck wurde die von ETAS zur Verfügung gestellte Anwendungsprogrammierschnittstelle API verwendet, um das Lesen und Schreiben von Daten in INCA losgelöst von Matlab zu ermöglichen.

Wie in Abbildung 5.4 gezeigt wird, kann Matlab mit Hilfe der API die Steuersignale für optimale Systemeingänge $\boldsymbol{U}_{\mathrm{Opt}}$ einschließlich der Steuerungssignale für die Luftsteller und den Motorarbeitspunkt an INCA senden und die Messdaten $\boldsymbol{D}_{\mathrm{Sen}}$ von INCA auslesen. Die Messdaten werden entweder durch ECU-Sensoren $\boldsymbol{D}_{\mathrm{Sen,ECU}}$ oder durch Sensoren am Prüfstand $\boldsymbol{D}_{\mathrm{Sen,PUMA}}$ erfasst und im Anschluss über CAN-Bus in INCA übertragen. Auf diese Weise lassen sich die Luftsteller und Motorarbeitspunkte über INCA durch die in Matlab ausgeführten Skripte offline einstellen.

Experiment und Auswertungskonzept

Im Experiment ist der Eingangsraum ein diskreter achtdimensionaler Raum, wobei die Granularität jeder Dimension in Tabelle 5.2 aufgelistet ist.

Nach dem Durchlaufen des in Abschnitt 5.1 beschriebenen Prozesses wurden die gewünschten KF/KL erzeugt. Anschließend wurden die erhaltenen KF/KL mit ihren in der ECU des Prüfmotors gespeicherten Gegenstücken, die nach dem standardmäßigen Verfahren der

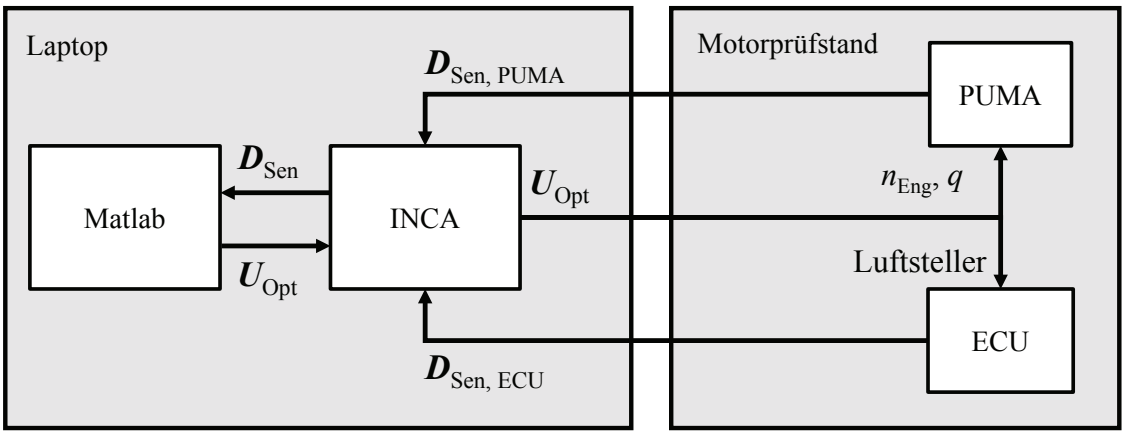


Abbildung 5.4: Verbindungsplan am Motorprüfstand; die Signale *Luftsteller* in der Abbildung repräsentieren die Steuersignale für die Systemeingänge $\text{ag}_{\text{ES}}, \text{pos}_{\text{TVA}}, \text{pos}_{\text{EGRHP}}, \text{pos}_{\text{EGRLP}}, \text{pos}_{\text{ExhFlp}}, \text{pos}_{\text{Trbn}}$; während die Tastverhältnisse der Luftsteller durch das Überschreiben der entsprechenden Applikationsparameter in der ECU geändert werden können, muss die Anpassung des Motorarbeitspunkts n_{Eng} und q über PUMA erfolgen.

Rastermessung generiert werden, hinsichtlich der Applikationsqualität verglichen. Bei der Rastermessung werden üblicherweise ca. 800 Messpunkte verwendet. Das Hauptkriterium, das zur Beurteilung der Applikationsqualität der KF/KL verwendet wird, ist die Genauigkeit der Modellausgaben, welche die entsprechenden KF/KL liefern. Zum Beispiel wird die Qualität der Kennlinie $\text{ar}_{\text{ExhFlp}}(\text{pos}_{\text{ExhFlp}})$ in Formel (4.103) durch die Ermittlung der Qualität der Modellausgabe des Drucks p_{42} stromaufwärts der Abgasklappe beurteilt. In Tabelle 5.3 werden die Modellausgaben der jeweiligen KF/KL aufgelistet.

Zu diesem Zweck wurden drei unabhängige Testfälle mit und ohne AGR als Referenzdatensatz erzeugt, wobei die Systemeingänge ausreichend verändert wurden, um die Überzeugungskraft der Referenzdatensätze sicherzustellen. In Tabelle 5.4 werden die Referenzdatensätze gezeigt.

Basierend auf den nach dem Standardverfahren der Rastermessung und dem vorgeschlagenen Ansatz applizierten KF/KL wurden die Modellausgaben berechnet und mit den entsprechenden Sensorwerten in den Referenzdatensätzen verglichen. Hierbei wird MAPE aus Formel (4.59) als Fehlermetrik eingesetzt. Es ist zu vermerken, dass aufgrund der Einschränkungen der Messtechnik am Motorprüfstand der AGR-Massenstrom nicht direkt durch einen physikalischen Sensor gemessen werden kann. Hier wird die Qualität des AGR-Massenstroms indirekt durch die Qualität des Frischluft-Massenstroms beurteilt, der in RS_2 durch $\text{mf}_{\text{Air}} = \text{mf}_{\text{Cyl}} - \text{mf}_{\text{EGRHP}}$ und in RS_3 durch $\text{mf}_{\text{Air}} = \text{mf}_{\text{Cyl}} - \text{mf}_{\text{EGRLP}}$ berechnet wird.

Systemeingang	Granularität
$\mathrm{pos}_{\mathrm{TVA}}$	50
$\mathrm{pos}_{\mathrm{Trbn}}$	50
$\mathrm{pos}_{\mathrm{EGRHP}}$	50
$\mathrm{pos}_{\mathrm{EGRLP}}$	50
$\mathrm{pos}_{\mathrm{ExhFlp}}$	50
n_{Eng}	30
q	25
$\mathrm{ag}_{\mathrm{ES}}$	30

Tabelle 5.2: Granularität der Systemeingänge.

KF/KL	Modellausgabe
$\mathrm{ar}_{\mathrm{TVA}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{TVA}})$	Druck p_{21} stromaufwärts der Drosselklappe
$\mathrm{ar}_{\mathrm{Trbn}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{Trbn}})$	Druck p_{31} stromaufwärts der Turbine
$\mathrm{ar}_{\mathrm{EGRHP}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{EGRHP}})$	Massenstrom $\mathrm{mf}_{\mathrm{EGRHP}}$ durch das HD-AGR-Ventil
$\mathrm{ar}_{\mathrm{EGRLP}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{EGRLP}})$	Massenstrom $\mathrm{mf}_{\mathrm{EGRLP}}$ durch das ND-AGR-Ventil
$\mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{ExhFlp}})$	Druck p_{42} stromaufwärts der Abgasklappe
$\mathrm{fac}_{\mathrm{p22cor}}(n_{\mathrm{EngTCorrn}}, \mathrm{ag}_{\mathrm{ES}})$	Massenstrom $\mathrm{mf}_{\mathrm{Cyl}}$ der Zylinderfüllung
$T_{\mathrm{Eng,Diff}}(n_{\mathrm{Eng}}, q)$	Abgastemperatur T_{31}

Tabelle 5.3: Modellausgabe der gewünschten KF/KL.

5.2.2 Ergebnisse und Analyse

In der Phase der anfänglichen Versuchsplanung wurden 42 Messpunkte für die Erstellung der anfänglichen Gaußprozessmodelle $\mathbf{GPM}_0$ verarbeitet. Darauf basierend generierte der entwickelte Algorithmus automatisch weitere 83 Messpunkte während der Phase der adaptiven Versuchsplanung zur Lösung der Applikationsaufgabe. Dabei wurde keine Verletzung der Motorgrenzen beobachtet. Anschließend wurden die Qualitäten der erhaltenen KF/KL mit Hilfe der oben erwähnten Referenzdatensätze bewertet; die Ergebnisse sind Tabelle 5.5 zu entnehmen.

Die in Tabelle 5.5 dargestellten Werte zeigen, dass bei Verwendung einer mit mehr als 80% signifikant reduzierten Anzahl von Messpunkten die durch unseren Algorithmus erzeug-

Referenzdatensatz	HD-AGR	ND-AGR
RS_1	Nein	Nein
RS_2	Ja	Nein
RS_3	Nein	Ja

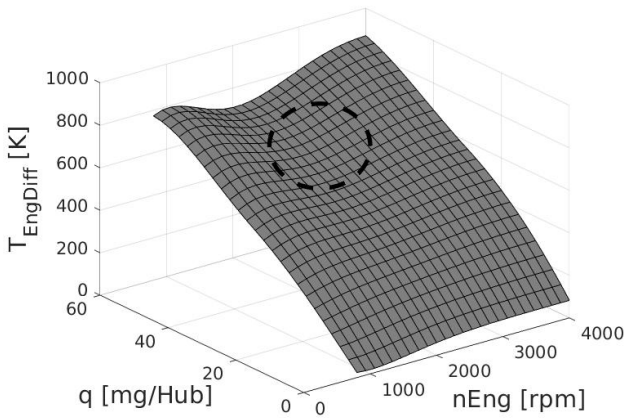
Tabelle 5.4: Referenzdatensätze für die Validierung der Ergebnisse.

Methode	Rastermessung	Entwickelter Algorithmus	Referenzsatz
N_{MP}	Ca. 800	Ca. 125	-
MAPE von $\mathrm{mf}_{\mathrm{Cyl}}$	1,58%	1,42%	RS_1
MAPE von T_{31}	3,65%	4,99%	RS_1
MAPE von p_{31}	3,24%	3,31%	RS_1
MAPE von $\mathrm{mf}_{\mathrm{EGRHP}}$	10,89%	4,95%	RS_2
MAPE von $\mathrm{mf}_{\mathrm{EGRLP}}$	5,43%	3,87%	RS_3
MAPE von p_{42}	0,44%	0,45%	RS_1
MAPE von p_{21}	2,35%	2,84%	RS_1

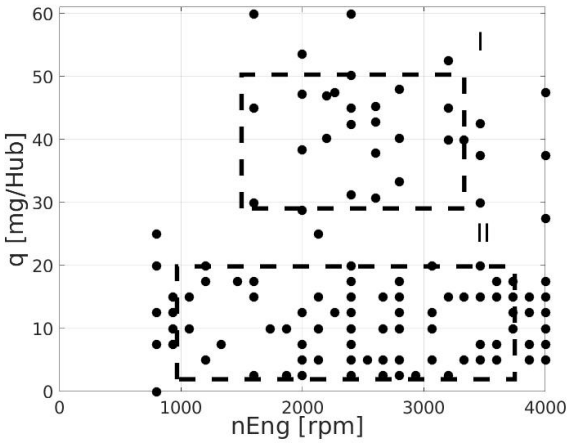
Tabelle 5.5: Applikationsqualität der relevanten KF/KL.

ten KF/KL eine vergleichbare Applikationsqualität wie die durch eine Rastermessung erzeugten KF/KL erreichten. Die Verteilung der endgültigen Applikationsmesspunkte $\boldsymbol{D}_{\mathrm{App}}$ und die endgültigen Gaußprozessmodelle für jedes empirische Modell sind in den Abbildungen 5.5, 5.6 und 5.8 dargestellt. Während insgesamt der Eingangsraum jedes empirischen Modells gut abgedeckt war, was ein solides Fundament für eine hochwertige ECU-Funktionsapplikation bildet, verdient die Verteilung der Applikationsmesspunkte in den Abbildungen 5.5b und 5.6 mehr Aufmerksamkeit und Erklärung.

In Abbildung 5.5b ist zu erkennen, dass zwei Bereiche im Motorbetriebsbereich mehr abgetastet wurden als andere. Eine Erklärung ist, dass der Algorithmus mehr in dem in Abbildung 5.5a mit einem gestrichelten Kreisen markierten Bereich I abgetastet hat, um die Nichtlinearität dort zu erfassen, was genau der in Abschnitt 4.3.2 vorgeschlagenen adaptiven Abtaststrategie entspricht. Die erhöhte Konzentration der Abtastpunkte im Bereich II, einem Bereich niedriger Motorlast, zeigt, dass der Algorithmus die Summe der Informationsgehalte aus allen relevanten empirischen Modellen mit Berücksichtigung der Motorgrenze maximieren wollte. Die Logik ist: Weil (1) zu viel AGR im Bereich hoher Motorlast für die Verbrennungsqualität schädlich sein kann und (2) die AGR-Ventile geöffnet sein



(a) Endgültiges Gaußprozessmodell für das empirische Modell $T_{\mathrm{Diff,Eng}}(n_{\mathrm{Eng}}, q)$; der Bereich der Nichtlinearität ist mit einem gestrichelten Kreis gekennzeichnet.



(b) Verteilung der Applikationsmesspunkte $\boldsymbol{D}_{\mathrm{App},T_{\mathrm{Diff,Eng}}}$ des empirischen Modells $T_{\mathrm{Diff,Eng}}(n_{\mathrm{Eng}}, q)$ auf dem Eingangsraum; die beiden Bereiche I und II, die mehr abgetastet werden, sind durch gestrichelte Rechtecke markiert.

Abbildung 5.5: Endgültige Applikationsmesspunkte und Gaußprozessmodell für das empirische Modell $T_{\mathrm{Diff,Eng}}(n_{\mathrm{Eng}}, q)$.

sollten, um den erhaltenen Gesamtinformationsgehalt zu erhöhen, hat der Algorithmus mehr im Bereich der niedrigen Motorlast mit geöffnetem AGR-Ventil abgetastet.

Es ist bekannt, dass der Druckabfall $\Delta p_{\mathrm{TVA}} = p_{21} - p_{22}$ über eine weit geöffnete Drosselklappe so klein ist, dass die effektive Fläche $\mathrm{ar}_{\mathrm{TVA}}$ nicht richtig abgeschätzt werden kann. Um dies zu dennoch bewältigen, wurde basierend auf dem geometrischen Modell der Drosselklappe ein Satz von künstlichen Applikationsmesspunkten erzeugt und zu den Trainingsdaten als a-priori-Wissen hinzugefügt. In Abbildung 5.6 sind die künstlichen Applikationsmesspunkte und das endgültige Gaußprozessmodell dafür dargestellt.

Wie schon erwähnt wurde, spielt in unserem Algorithmus die Unsicherheit eines Applikationsparameters bei der Versuchsplanung eine wichtige Rolle. In Abbildung 5.7 wird versucht, diesen Effekt nachzuweisen, wozu das Druckverhältnis über das ND-AGR-Ventil abhängig vom Tastverhältnis des ND-AGR-Ventils dargestellt ist. Im Bild werden zum Vergleich die Druckverhältnisse der durch Rastermessung generierten Messpunkte aus RS_3 und die Druckverhältnisse der Messpunkte, die unser Algorithmus aktiv erzeugt hat, dargestellt. Hierbei bedeutet ein größeres Druckverhältnis eine geringere Unsicherheit. In Abbildung 5.7 ist zu beobachten, dass wenn das ND-AGR-Ventil weit geöffnet ist (innerhalb des gestrichelten Rechtecks), unser Algorithmus sehr großen Wert auf die Unsicherheit des Applikationsparameters gelegt und aktiv hohe Druckverhältnisse erzeugt hat, die bei den Messpunkten aus RS_3 nicht erreicht werden. Aus der Analyse in den Abschnitten 1.2.2 und 4.4.1 ergibt sich, dass es genau die Situation mit geringem Druckgefälle ist, in der die Un-

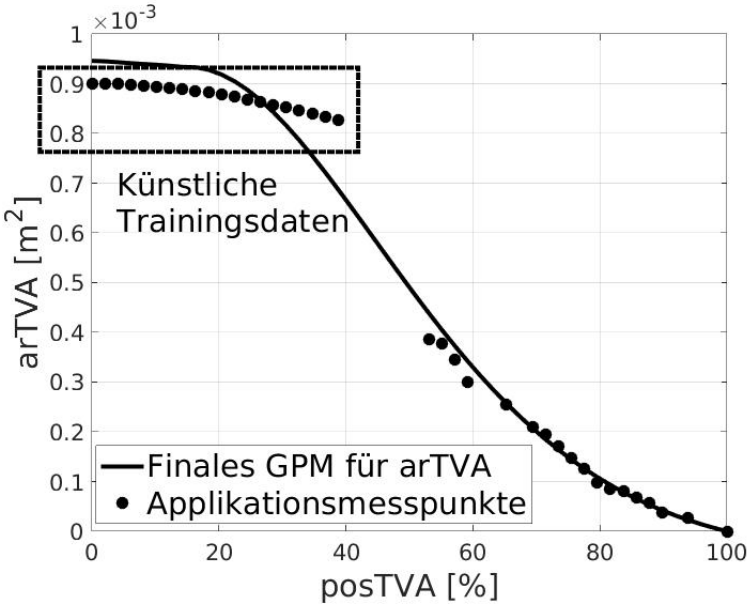


Abbildung 5.6: Applikationsmesspunkte $\boldsymbol{D}_{\mathrm{App,ar_{TVA}}}$ und das endgültige Gaußprozessmodell für das empirische Modell $\mathrm{ar_{TVA}}(\mathrm{pos_{TVA}})$; die Punkte, die durch das gestrichelte Rechteck hervorgehoben sind, repräsentieren den künstlich erzeugten Trainingsdatensatz.

sicherheit des Applikationsparameters beachtet werden muss. D.h. unser Algorithmus hat zum richtigen Zeitpunkt das Richtige getan.

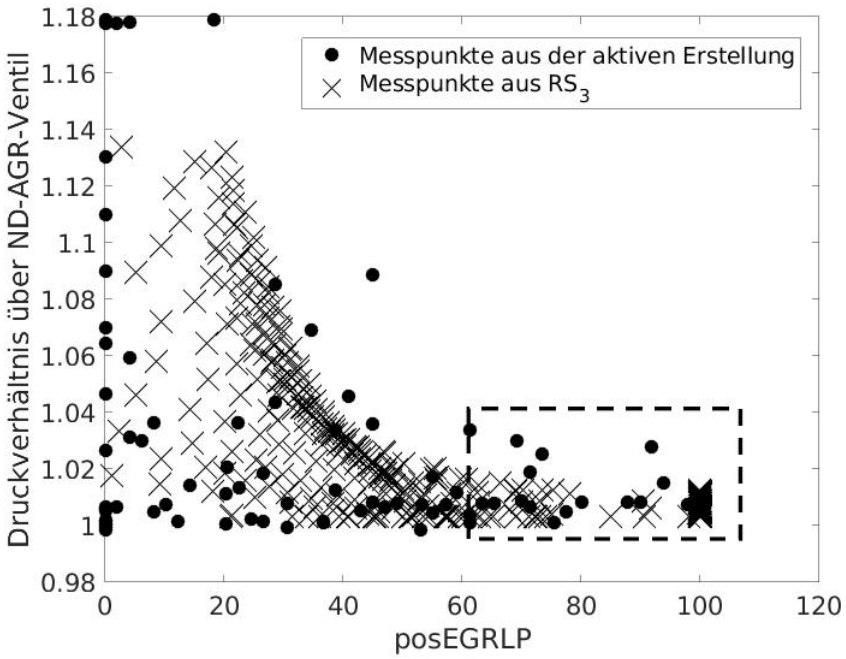
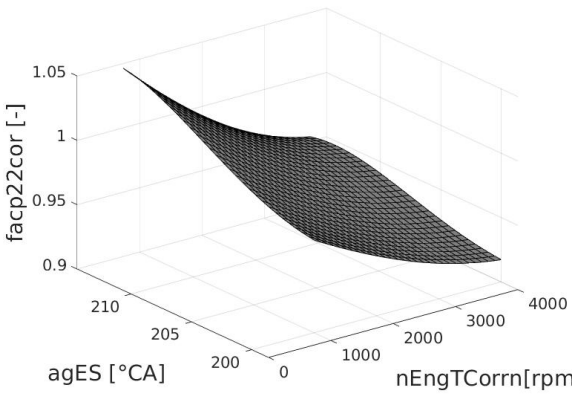
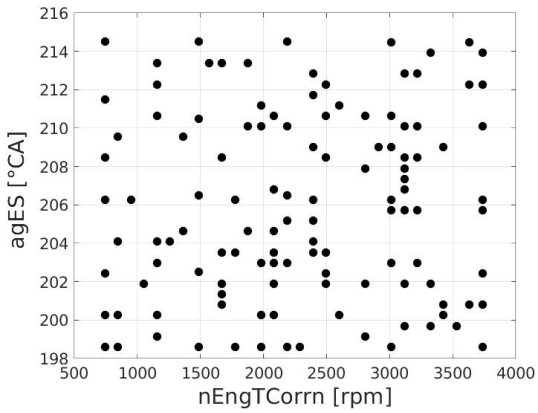


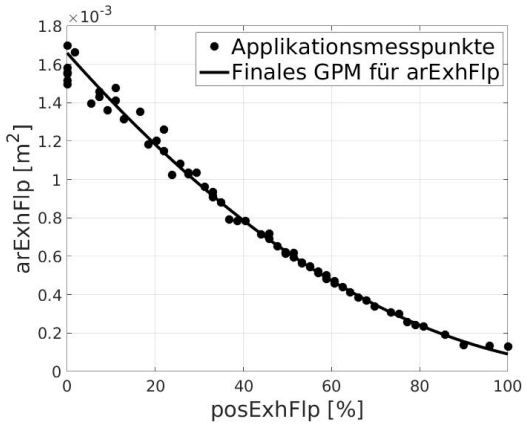
Abbildung 5.7: Vergleich der Druckverhältnisse am ND-AGR-Ventil; die schwarzen Punkte stehen für die Messpunkte, die mittels unseres Algorithmus aktiv erzeugt wurden; die Kreuze markieren die Messpunkte aus RS_3; der durch die gestrichelte Linie umrahmte Bereich ist derjenige Bereich, in dem das Druckverhältnis kritisch für die Schätzung der effektiven Fläche ist.



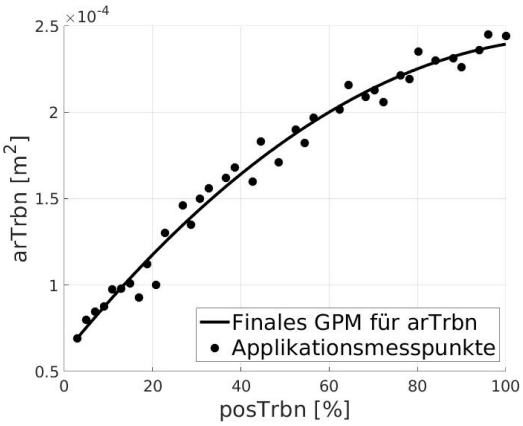
(a) Endgültiges Gaußprozessmodell für das empirische Modell $\mathrm{fac}_{\mathrm{p22cor}}(n_{\mathrm{EngTCorrn}}, \mathrm{ag}_{\mathrm{ES}})$.



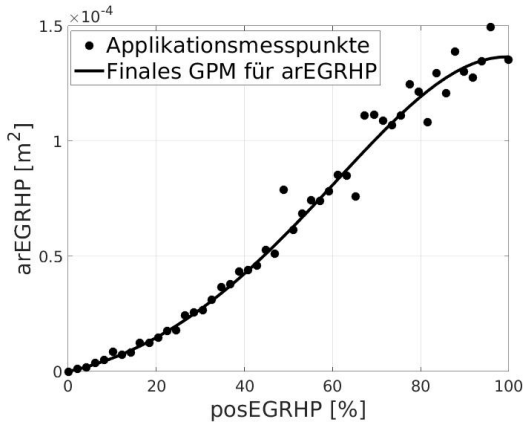
(b) Verteilung der Applikationsmesspunkte $\boldsymbol{D}_{\mathrm{App},\mathrm{fac}_{\mathrm{p22cor}}}$ des empirischen Modells $\mathrm{fac}_{\mathrm{p22cor}}(n_{\mathrm{EngTCorrn}}, \mathrm{ag}_{\mathrm{ES}})$ auf dem Eingangsraum.



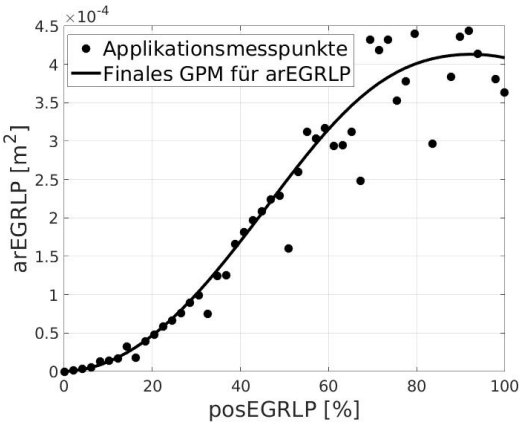
(c) Applikationsmesspunkte $\boldsymbol{D}_{\mathrm{App},\mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp}}}$ und das endgültige Gaußprozessmodell für das empirische Modell $\mathrm{ar}_{\mathrm{ExhFlp}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{ExhFlp}})$.



(d) Applikationsmesspunkte $\boldsymbol{D}_{\mathrm{App},\mathrm{ar}_{\mathrm{Trbn}}}$ und das endgültige Gaußprozessmodell für das empirische Modell $\mathrm{ar}_{\mathrm{Trbn}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{Trbn}})$.



(e) Applikationsmesspunkte $\boldsymbol{D}_{\mathrm{App},\mathrm{ar}_{\mathrm{EGRHP}}}$ und das endgültige Gaußprozessmodell für das empirische Modell $\mathrm{ar}_{\mathrm{EGRHP}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{EGRHP}})$.



(f) Applikationsmesspunkte $\boldsymbol{D}_{\mathrm{App},\mathrm{ar}_{\mathrm{EGRLP}}}$ und das endgültige Gaußprozessmodell für das empirische Modell $\mathrm{ar}_{\mathrm{EGRLP}}(\mathrm{pos}_{\mathrm{EGRLP}})$.

Abbildung 5.8: Weitere endgültige Gaußprozessmodelle und Verteilungen der Applikationsmesspunkte.

6 Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wird ein Arbeitsprozess entwickelt, der die ECU-Funktionen für stationäre Zusammenhänge z.B. im Diesel-Luftsystem automatisch und mit möglichst geringem Messaufwand hinsichtlich der Anzahl der Messpunkte applizieren kann. Der Arbeitsprozess wird am Motorprüfstand eingesetzt, um Messpunkte zu erzeugen bzw. zu stimulieren, die den höchsten Informationsgehalt besitzen. Der Algorithmus besteht aus zwei Bestandteilen: einem geeigneten Regressionsmodell und einem dafür entwickelten Versuchsplan.

Regressionsmodell

Aus den Anforderungen, dass der Applikationsprozess automatisch erfolgen und möglichst wenig Messpunkte verbrauchen soll, werden konkrete Anforderungen an die Modellierungsansätze abgeleitet. Mithilfe der konkreten Kriterien bzw. Anforderungen werden Kandidatenmodelle bezüglich ihrer Eignung bewertet und miteinander verglichen. Als Ergebnis wird das Gaußprozessmodell als das für unsere Anwendung geeignetste Regressionsmodell identifiziert, da es automatisch die Modellkomplexität bestimmen, bequem heteroskedastische Messdaten behandeln und eine vernünftige probabilistische Prädiktion über den Modellausgang liefern kann.

Dennoch leidet das standardmäßige Gaußprozessmodell unter dem Nachteil, dass es Probleme damit hat, Nichtstationaritäten zu erfassen und zu modellieren, die eventuell in zu applizierenden Zusammenhängen auftreten können. Dafür wird ein neuartiges Gaußprozessmodell TGPRNS mit nichtstationärer Kovarianzfunktion entwickelt. Für die Behandlung der Nichtstationarität wird bei TGPRNS der Eingangsraum so verformt, dass die Nichtstationarität neutralisiert wird. Mit Hilfe des Partitionsverfahrens aus LOLIMOT ist TGPRNS in der Lage, ungleichmäßige Glattheit aus den Messpunkten automatisch zu erkennen und später im Modelltraining zu berücksichtigen. Während die Verformung des Eingangsraums dem Gaußprozessmodell erlaubt, die Nichtstationarität in einem Zusammenhang modellieren zu können, bringt diese Methode auch weitere Freiheitsgrade bzw. Hyperparameter beim Modelltraining mit sich. Für das Lernen eines Hyperparametersatzes kommt die Methode der *Multilevel Coordinate Search* für globale Optimierungsprobleme zum Einsatz.

Versuchsplanung

Die Messdaten für das Modelltraining werden im Rahmen einer sequentiellen Versuchsplanung erzeugt, die aus anfänglicher Versuchsplanung und adaptiver Versuchsplanung besteht. Bei der anfänglichen Versuchsplanung wird das Gittersampling verwendet, weil es einfach zu implementieren ist und die Überdeckung der Ecken und der Kanten des Versuchsraums sicherstellen kann. Für die adaptive Versuchsplanung wird eine Hybride Abtaststrategie vorgeschlagen, welche die *Exploration* des Versuchsraums (MI-Ansatz), die *Ex-*

ploitation der Regionen von Interesse (Regionen mit hoher Krümmung) und die Unsicherheit der Abtastpunkte berücksichtigt. Darüber hinaus wird ein heuristisches automatisches Stopp-Kriterium für den automatischen Abbruch eines Vermessungsvorgangs entwickelt.

Die Unsicherheit der Abtastpunkte bzw. der Applikationsparameter, die in der verwandten Literaturen nicht berücksichtigt wird, spielt eine sehr wichtige praktische Rolle bei der adaptiven Versuchsplanung für die Applikation eines Netzwerks von ECU-Funktionen. Die Unsicherheiten der geschätzten Applikationsparameter werden weitgehend von den Arbeitspunkten der relevanten Gleichungen oder Prozesse bestimmt, wenn die relevanten Prozesse Nichtlinearitäten aufweisen. In dieser Arbeit werden die Arbeitspunkte durch die Lösung von Gleichungssystemen abhängig von den Systemeingängen prädiziert, die das stationäre Verhalten des betrachteten Systems beschreiben und sich aus physikalischen Gesetzen und datenbasierten Modellen zusammensetzen. Basierend auf den vorhergesagten Arbeitspunkten werden die Unsicherheit der Applikationsparameter mittels geeigneter EKF geschätzt und in die Hybride Abtaststrategie integriert.

Anwendungsbeispiele

Der Algorithmus wurde zunächst erfolgreich an einem kleinen Beispiel implementiert, der Auswahl der informativsten Teilmenge aus einem bestehenden Datensatz, was eher als *Proof of Concept* dient. Anschließend wird der Arbeitsprozess eingesetzt, um aktiv und unabhängig Messpunkte für die Applikation der hauptsächlichen KF/KL im Diesel-Luftsystem zu erzeugen. Als Ergebnis ergibt sich trotz der stark reduzierten Anzahl von Applikationsmesspunkten eine vergleichbare Applikationsqualität der gesuchten KF/KL wie bei klassischer Rastervermessung. Außerdem spiegeln sich die konzipierten Ideen für die Abtaststrategie auch in der Verteilung der Messpunkte wider; z. B. werden Regionen mit hoher Nichtlinearität intensiver abgetastet und Unsicherheiten von Applikationsmesspunkten in kritischen Bereichen beachtet.

Ausblick

Als Verbesserungsmöglichkeit des entwickelten Algorithmus ergeben sich:

- ***Güte der Hyperparameter als Kriterium für die Versuchsplanung***
  Der MI-Ansatz für die *Exploration* des Versuchsraums wird eingesetzt, um die Prädiktionsfehler der Modellausgänge zu reduzieren. Dieser Ansatz liefert allerdings nur die beste Leistung, wenn die dabei verwendeten Hyperparameter den wahren Hyperparametern entsprechen. Ein besserer Versuchsplan wird erzeugt, wenn bei der Versuchsplanung die Güte der Hyperparameter durch den Einsatz z. B. ihrer FIM berücksichtigt wird.

- ***Adaptiver Trade-off zwischen Exploration und Exploitation***
  In dieser Arbeit wird bei der adaptiven Versuchsplanung sowohl die *Exploration* als

auch die *Exploitation* berücksichtigt. Die beiden Aspekte haben dabei gleiches Gewicht. Eine automatische Anpassung der Gewichtung der beiden Aspekte kann jedoch aus den Eigenschaften eines zu applizierenden Zusammenhangs eine bessere Leistung liefern. Als mögliche Lösung für die automatische Anpassung kann z. B. die geometrische Analyse eines aktuellen Gaußprozessmodells dienen, welche die Komplexität des lokalen Modellverhaltens ermittelt.

- ***Weitere praktische Kriterien für die Versuchsplanung***
  Weitere Kriterien von praktischem Interesse können zur Abtaststrategie hinzugefügt werden, beispielsweise die Verschiebung der Messpunkte zwischen Iterationen. Da in dieser Arbeit das stationäre Motorverhalten untersucht wird, müssen sich die Signale stabilisieren, bevor die Messdaten erfasst werden. Deswegen kann eine kleine Verschiebung der Messpunkte zwischen Iterationen hinsichtlich ihrer thermischen Bedingungen die Messzeit reduzieren.

- ***Algorithmus als Werkzeug***
  Die Integration des Algorithmus als Tool in den bestehenden Applikationsprozess kann einen breiteren Anwendungsbereich erschließen. Mögliche Richtungen sind: Design einer kompakten und praktischen Benutzerschnittstelle, Modularisierung des Luftsystemmodells etc.

Literaturverzeichnis

[A+10] S. Arlot, A. Celisse u. a. „A survey of cross-validation procedures for model selection“. In: *Statistics Surveys* 4 (2010), S. 40–79.

[ADT07] A. Atkinson, A. Donev und R. Tobias. *Optimum experimental designs, with SAS*. Bd. 34. Oxford University Press, 2007.

[AF07] J. Abonyi und B. Feil. *Cluster analysis for data mining and system identification*. Springer Science & Business Media, 2007.

[AG07] S. Asmussen und P. W. Glynn. *Stochastic simulation: algorithms and analysis*. Bd. 5-7. Springer Science & Business Media, 2007.

[Aka98] H. Akaike. „Information theory and an extension of the maximum likelihood principle“. In: *Selected Papers of Hirotugu Akaike*. Springer, (1998), S. 199–213.

[AL07] P. M. Atkinson und C. D. LLoyd. „Non-stationary variogram models for geostatistical sampling optimisation: An empirical investigation using elevation data“. In: *Computers & Geosciences* 33.10 (2007), S. 1285–1300.

[Alt92] N. S. Altman. „An introduction to kernel and nearest-neighbor nonparametric regression“. In: *The American Statistician* 46.3 (1992), S. 175–185.

[And+03] C. Andrieu u. a. „An introduction to MCMC for machine learning“. In: *Machine learning* 50.1-2 (2003), S. 5–43.

[And02] D. R. Anderson. *Model selection and multi-model inference: a practical information-theoretic approach*. Springer, 2002.

[ANS10] B. Ankenman, B. L. Nelson und J. Staum. „Stochastic kriging for simulation metamodeling“. In: *Operations Research* 58.2 (2010), S. 371–382.

[Ave13] M. Avery. „Literature review for local polynomial regression“. 2013. URL: https://casual-inference.com/post/local-polynomial-smoothing.pdf.

[BA98] J. M. Bland und D. G. Altman. „Bayesians and frequentists“. In: *Bmj* 317.7166 (1998), S. 1151–1160.

[Bac13] F. Bachoc. „Cross Validation and Maximum Likelihood estimations of hyper-parameters of Gaussian processes with model misspecification“. In: *Computational Statistics & Data Analysis* 66 (2013), S. 55–69.

[Ban+08] S. Banerjee u. a. „Gaussian predictive process models for large spatial data sets“. In: *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology)* 70.4 (2008), S. 825–848.

[Bay+13] J. Bayer u. a. „Training neural networks with implicit variance“. In: *International Conference on Neural Information Processing*. Springer. (2013), S. 132–139.

[BD07] G. E. Box und N. R. Draper. *Response surfaces, mixtures, and ridge analyses*. Bd. 649. John Wiley & Sons, 2007.

[BD13] P. J. Brockwell und R. A. Davis. *Time series: theory and methods*. Springer Science & Business Media, 2013.

[Ber12] B. Berger. „Modeling and Optimization for Stationary Base Engine Calibration“. Diss. Technische Universität München, 2012.

[Ber13] J. O. Berger. *Statistical decision theory and Bayesian analysis*. Springer Science & Business Media, 2013.

[BG16] J. Beck und S. Guillas. „Sequential design with Mutual Information for Computer Experiments (MICE): emulation of a tsunami model“. In: *SIAM/ASA Journal on Uncertainty Quantification* 4.1 (2016), S. 739–766.

[Bis06] C. M. Bishop. *Pattern Recognition and Machine Learning (Information Science and Statistics)*. Secaucus, NJ, USA: Springer-Verlag New York, Inc., 2006.

[Bit+04] A. Bittermann u. a. „Emissionsauslegung des dieselmotorischen Fahrzeugantriebs mittels DoE und Simulationsrechnung“. In: *MTZ-Motortechnische Zeitschrift* 65.6 (2004), S. 466–474.

[BJH11] S. Burhenne, D. Jacob und G. P. Henze. „Sampling based on Sobol sequences for Monte Carlo techniques applied to building simulations“. In: *Proc. Int. Conf. Build. Simulat*. (2011), S. 1816–1823.

[BK66] H. D. Baehr und S. Kabelac. *Thermodynamik*. Bd. 11. Springer, 1966.

[Bol+13] A. Bolduan u. a. „From Local Towards Global: Models for Diesel Engine Calibration“. In: *7th Conference on DoE in Engine Development. Berlin: Expert Verlag*. (2013).

[Boo07] J. E. Boon. „Generating exact D-optimal designs for polynomial models“. In: *Proceedings of the 2007 spring simulation multiconference-Volume 3*. Society for Computer Simulation International. (2007), S. 121–126.

[BR12] B. Berger und F. Rauscher. „Robust Gaussian process modelling for engine calibration“. In: *IFAC Proceedings Volumes* 45.2 (2012), S. 159–164.

[Bro+11] S. Brooks u. a. *Handbook of markov chain monte carlo*. Chapman und Hall/CRC, 2011.

[BS01] J. M. Bernardo und A. F. Smith. *Bayesian theory*. John Wiley & Sons, 2001.

[BST04] S. Bates, J. Sienz und V. Toropov. „Formulation of the optimal Latin hypercube design of experiments using a permutation genetic algorithm“. In: *45th AIAA/ASME/ASCE/AHS/ASC Structures, Structural Dynamics & Materials Conference*. (2004), S. 2011.

[BT12] C. Bryant und G. Terejanu. „An information-theoretic approach to optimally calibrate approximate models“. In: *50th AIAA Aerospace Science Meeting*. (2012), S. 09–12.

[Buh00] M. D. Buhmann. „Radial basis functions“. In: *Acta Numerica* 9 (2000), S. 1–38.

[BW92] G. E. Box und K. Wilson. „On the experimental attainment of optimum conditions“. In: *Breakthroughs in Statistics*. Springer, (1992), S. 270–310.

[C+08] G. Claeskens, N. L. Hjort u. a. *Model selection and model averaging*. Bd. 330. Cambridge University Press, Cambridge, 2008.

[Cal+14] R. Calandra u. a. „Manifold Gaussian processes for regression“. In: *arXiv preprint arXiv:1402.5876* (2014).

[Cas+08] M. Castagné u. a. „Comparison of engine calibration methods based on design of experiments (doe)“. In: *Oil & Gas Science and Technology-Revue de l'IFP* 63.4 (2008), S. 563–582.

[Cas+12] M. Castagné u. a. „New calibration method and tool to minimize emissions on cold-start driving cycle“. In: *SIA International Conference: Diesel Powertrain*. (2012), S. 5–6.

[CCG91] S. Chen, C. F. Cowan und P. M. Grant. „Orthogonal least squares learning algorithm for radial basis function networks“. In: *IEEE Transactions on neural networks* 2.2 (1991), S. 302–309.

[CDS12] S.-W. Cheng, T. K. Dey und J. Shewchuk. *Delaunay mesh generation*. CRC Press, 2012.

[CGJ96] D. A. Cohn, Z. Ghahramani und M. I. Jordan. „Active learning with statistical models“. In: *Journal of artificial intelligence research* 4 (1996), S. 129–145.

[Chr11] R. Christensen. *Plane answers to complex questions: the theory of linear models*. Springer Science & Business Media, 2011.

[Cli73] A. Clifford. *Multivariate Error Analysis: A Handbook of Error Propagation and Calculation in Many-Parameter System*. Applied Science Publishers Ltd, London, 1973.

[Cop83] J. B. Copas. „Regression, prediction and shrinkage“. In: *Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological)* (1983), S. 311–354.

[Cra16] H. Cramér. *Mathematical Methods of Statistics (PMS-9)*. Bd. 9. Princeton University Press, 2016.

[CT12] T. M. Cover und J. A. Thomas. *Elements of information theory*. John Wiley & Sons, 2012.

[CV95a] K. Chaloner und I. Verdinelli. „Bayesian experimental design: A review“. In: *Statistical Science* (1995), S. 273–304.

[CV95b] C. Cortes und V. Vapnik. „Support-vector networks“. In: *Machine learning* 20.3 (1995), S. 273–297.

[Czi99] V. Czitrom. „One-factor-at-a-time versus designed experiments“. In: *The American Statistician* 53.2 (1999), S. 126–131.

[Das02] A. Das. „An introduction to optimality criteria and some results on optimal block design“. In: *Design Workshop Lecture Notes*. (2002), S. 1–21.

[DBC11] P. Dallaire, C. Besse und B. Chaib-Draa. „An approximate inference with Gaussian process to latent functions from uncertain data“. In: *Neurocomputing* 74.11 (2011), S. 1945–1955.

[Dea+15] A. Dean u. a. *Handbook of design and analysis of experiments*. Chapman und Hall, CRC, 2015.

[Def11] M. Deflorian. „Versuchsplanung und Methoden zur Identifikation zeitkontinuierlicher Zustandsraummodelle am Beispiel des Verbrennungsmotors“. Diss. Technische Universität München, 2011.

[Del34] B. Delaunay. „Sur la sphere vide“. In: *Izv. Akad. Nauk SSSR, Otdelenie Matematicheskii i Estestvennyka Nauk* 7.793-800 (1934), S. 1–2.

[DF10] N. Darbeheshti und W. Featherstone. „A review of non-stationary spatial methods for geodetic least-squares collocation“. In: *Journal of Spatial Science* 55.2 (2010), S. 185–204.

[DI09] E. Davis und M. Ierapetritou. „A kriging based method for the solution of mixed-integer nonlinear programs containing black-box functions“. In: *Journal of Global Optimization* 43.2-3 (2009), S. 191–205.

[DM63] A. Dulmage und N. Mendelsohn. „Two algorithms for bipartite graphs“. In: *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics* 11.1 (1963), S. 183–194.

[DMP04] H. Dette, V. B. Melas und A. Pepelyshev. „Optimal designs for a class of nonlinear regression models“. In: *Annals of statistics* (2004), S. 2142–2167.

[DRS10] J. De Loera, J. Rambau und F. Santos. *Triangulations: Structures for Algorithms and Applications*. Bd. 25. Springer Science & Business Media, 2010.

[DS96] J. E. Dennis Jr und R. B. Schnabel. *Numerical methods for unconstrained optimization and nonlinear equations*. Bd. 16. Society for Industrial und Applied Mathematics, 1996.

[DSG01] D. Damian, P. D. Sampson und P. Guttorp. „Bayesian estimation of semi-parametric non-stationary spatial covariance structures“. In: *Environmetrics* 12.2 (2001), S. 161–178.

[DSH08] I. L. Dalal, D. Stefan und J. Harwayne-Gidansky. „Low discrepancy sequences for Monte Carlo simulations on reconfigurable platforms“. In: *Application-Specific Systems, Architectures and Processors*. IEEE. (2008), S. 108–113.

[EC14] J. Eason und S. Cremaschi. „Adaptive sequential sampling for surrogate model generation with artificial neural networks“. In: *Computers & Chemical Engineering* 68 (2014), S. 220–232.

[Efr+04] B. Efron u. a. „Least angle regression“. In: *The Annals of statistics* 32.2 (2004), S. 407–499.

[El +13] J. El Hadef u. a. *Neural Model for Real-Time Engine Volumetric Efficiency Estimation*. Techn. Ber. SAE Technical Paper, 2013.

[Ern98] S. Ernst. „Hinging hyperplane trees for approximation and identification“. In: *Decision and Control, 1998. Proceedings of the 37th IEEE Conference*. Bd. 2. IEEE. (1998), S. 1266–1271.

[FHT01] J. Friedman, T. Hastie und R. Tibshirani. *The elements of statistical learning*. Bd. 1. Springer series in statistics Springer, Berlin, 2001.

[FK09] A. I. Forrester und A. J. Keane. „Recent advances in surrogate-based optimization“. In: *Progress in Aerospace Sciences* 45.1 (2009), S. 50–79.

[FKL07] L. Fahrmeir, T. Kneib und S. Lang. *Regression: modelle, methoden und anwendungen*. Springer-Verlag, 2007.

[FL13] V. V. Fedorov und S. L. Leonov. *Optimal design for nonlinear response models*. CRC Press, 2013.

[For12] S. Fortmann-Roe. *Understanding the bias-variance tradeoff*. 2012. URL: http://scott.fortmann-roe.com/docs/BiasVariance.html.

[Fre09] D. A. Freedman. *Statistical models: theory and practice*. Cambridge University Press, 2009.

[Fri06] G. Friedman. *Constraint theory: Multidimensional mathematical model management*. Bd. 23. Springer Science & Business Media, 2006.

[FS01] M. Fuentes und R. Smith. *A New Class of Nonstationary Spatial Models*. Techn. Ber. North Carolina State University. Dept. of Statistics, 2001. URL: https://repository.lib.ncsu.edu/bitstream/handle/1840.4/213/nonstat.pdf?sequence=1&isAllowed=y.

[Fue01] M. Fuentes. „A high frequency kriging approach for non-stationary environmental processes“. In: *Environmetrics* 12.5 (2001), S. 469–483.

[GBD92] S. Geman, E. Bienenstock und R. Doursat. „Neural networks and the bias/variance dilemma“. In: *Neural computation* 4.1 (1992), S. 1–58.

[Gel+14] A. Gelman u. a. *Bayesian data analysis*. Bd. 2. Chapman & Hall/CRC Boca Raton, FL, USA, 2014.

[Gib98] M. N. Gibbs. „Bayesian Gaussian processes for regression and classification“. Diss. University of Cambridge, 1998.

[Gil01] R. C. S. L. L. Giles. „Overfitting in Neural Nets: Backpropagation, Conjugate Gradient, and Early Stopping“. In: *Advances in Neural Information Processing Systems 13: Proceedings of the 2000 Conference*. Bd. 13. MIT Press. (2001), S. 402.

[Gil06] H. Gilgen. *Univariate time series in geosciences*. Springer, 2006.

[GJ11] P. Goos und B. Jones. *Optimal design of experiments: a case study approach*. John Wiley & Sons, 2011.

[Gol93] R. Goldstein. *Conditioning diagnostics: Collinearity and weak data in regression*. Taylor & Francis, 1993.

[Gre03] W. H. Greene. *Econometric analysis*. Pearson Education India, 2003.

[Gsc+01] K. Gschweitl u. a. „Steigerung der Effizienz in der modellbasierten Motorenapplikation durch die neue CAMEO Online DoE-Toolbox“. In: *ATZ-Automobiltechnische Zeitschrift* 103.7-8 (2001), S. 636–643.

[Gur97] K. Gurney. *An introduction to neural networks*. CRC Press, 1997.

[GWB97] P. W. Goldberg, C. K. Williams und C. M. Bishop. „Regression with input-dependent noise: A Gaussian process treatment“. In: *Advances in neural information processing systems* 10 (1997), S. 493–499.

[Haa04] D. Haase. „Ein neues Verfahren zur modellbasierten Prozessoptimierung auf der Grundlage der statistischen Versuchsplanung am Beispiel eines Ottomotors mit elektromagnetischer Ventilsteuerung (EMVS)“. Diss. Technische Universität Dresden, 2004.

[Hal99] A. Hald. „On the history of maximum likelihood in relation to inverse probability and least squares“. In: *Statistical Science* (1999), S. 214–222.

[Har14] B. Hartmann. „Lokale Modellnetze zur Identifikation und Versuchsplanung nichtlinearer Systeme“. Diss. Universität Siegen, 2014.

[Hel08] L. Held. *Methoden der statistischen Inferenz: Likelihood und Bayes*. Spektrum Akademischer Verlag, 2008.

[HK70] A. E. Hoerl und R. W. Kennard. „Ridge regression: Biased estimation for nonorthogonal problems“. In: *Technometrics* 12.1 (1970), S. 55–67.

[HL09] K. Haskard und R. Lark. „Modelling non-stationary variance of soil properties by tempering an empirical spectrum“. In: *Geoderma* 153.1 (2009), S. 18–28.

[HN99] W. Huyer und A. Neumaier. „Global optimization by multilevel coordinate search“. In: *Journal of Global Optimization* 14.4 (1999), S. 331–355.

[Hor93] K. Hornik. „Some new results on neural network approximation“. In: *Neural Networks* 6.8 (1993), S. 1069–1072.

[HP13] H. Hiereth und P. Prenninger. *Aufladung der Verbrennungskraftmaschine*. Springer-Verlag, 2013.

[HSB06] V. Hombal, A. C. Sanderson und R. Blidberg. „A non-parametric iterative algorithm for adaptive sampling and robotic vehicle path planning“. In: *2006 IEEE/RSJ International Conference on Intelligent Robots and Systems*. IEEE. (2006), S. 217–222.

[HSK99] D. Higdon, J. Swall und J. Kern. „Non-stationary spatial modeling“. In: *Bayesian statistics* 6.1 (1999), S. 761–768.

[HT89] C. M. Hurvich und C.-L. Tsai. „Regression and time series model selection in small samples“. In: *Biometrika* 76.2 (1989), S. 297–307.

[Hyö01] H. Hyötyniemi. *Multivariate regression: Techniques and tools*. Helsinki University of Technology, 2001. URL: http://neocybernetics.com/report125/.

[Ise10] R. Isermann. *Elektronisches Management motorischer Fahrzeugantriebe*. Springer, 2010.

[Ise14] R. Isermann. *Engine modeling and control*. Springer, 2014.

[Jam+13] G. James u. a. *An introduction to statistical learning*. Bd. 6. Springer, 2013.

[Jan08] K. Jankov. „Beitrag zur automatisierten Steuerkennfeld-Applikation bei Fahrzeug-Dieselmotoren“. Diss. Technische Universität Berlin, 2008.

[Jaz07] A. H. Jazwinski. *Stochastic processes and filtering theory*. Courier Corporation, 2007.

[JCS01] R. Jin, W. Chen und T. W. Simpson. „Comparative studies of metamodelling techniques under multiple modelling criteria“. In: *Structural and multidisciplinary optimization* 23.1 (2001), S. 1–13.

[JHS08] V. R. Joseph, Y. Hung und A. Sudjianto. „Blind kriging: A new method for developing metamodels“. In: *Journal of mechanical design* 130.3 (2008), S. 031102.

[Jon01] D. R. Jones. „A taxonomy of global optimization methods based on response surfaces“. In: *Journal of global optimization* 21.4 (2001), S. 345–383.

[Kaj08] H. Kaji. „Automotive engine calibration with experiment-based evolutionary multi-objective optimization“. Diss. Kyoto University, 2008.

[KCR13] M. R. Kianifar, L. F. Campean und D. Richardson. „Sequential DoE framework for steady state model based calibration“. In: *SAE International Journal of Engines* 6.2013-01-0972 (2013), S. 843–855.

[Kec01] V. Kecman. *Learning and soft computing: support vector machines, neural networks, and fuzzy logic models*. MIT Press, 2001.

[Ker+07] K. Kersting u. a. „Most likely heteroscedastic Gaussian process regression“. In: *Proceedings of the 24th international conference on Machine learning*. ACM. (2007), S. 393–400.

[Kie59] J. Kiefer. „Optimum experimental designs“. In: *Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological)* (1959), S. 272–319.

[Kie74] J. Kiefer. „General equivalence theory for optimum designs (approximate theory)“. In: *The annals of Statistics* (1974), S. 849–879.

[KL51] S. Kullback und R. A. Leibler. „On information and sufficiency“. In: *The annals of mathematical statistics* 22.1 (1951), S. 79–86.

[Kle08] J. P. Kleijnen. *Design and analysis of simulation experiments*. Bd. 20. Springer, 2008.

[Klö09] F. Klöpper. *Entwicklung und Einsatz modellgestützter Online-Methoden zur Parameteroptimierung von Verbrennungsmotoren am Prüfstand*. Shaker, 2009.

[Koc13] K.-R. Koch. *Einführung in die Bayes-Statistik*. Springer-Verlag, 2013.

[Kol+14] B. Kolewe u. a. „Gaussian mixture regression and local linear network model for data-driven estimation of air mass“. In: *IET Control Theory & Applications* 9.7 (2014), S. 1083–1092.

[Kra08] A. Krause. *Optimizing sensing: Theory and applications*. ProQuest, 2008.

[KSG08] A. Krause, A. Singh und C. Guestrin. „Near-optimal sensor placements in Gaussian processes: Theory, efficient algorithms and empirical studies“. In: *Journal of Machine Learning Research* 9.Feb (2008), S. 235–284.

[KT14] J. S. Kadosh und R. Theunissen. „Curvature-based spatially adaptive sampling of heteroskedastic data with application to Laser Doppler Velocimetry“. In: *17th International Symposium on Applications of Laser Techniques to Fluid Mechanics*. (2014).

[Kul97] S. Kullback. *Information theory and statistics*. Courier Corporation, 1997.

[KW59] J. Kiefer und J. Wolfowitz. „Optimum designs in regression problems“. In: *The Annals of Mathematical Statistics* (1959), S. 271–294.

[KZL13] D. Khashabi, M. Ziyadi und F. Liang. „Heteroscedastic relevance vector machine“. In: *arXiv preprint arXiv:1301.2015* (2013).

[Lan+08] H. Langouët u. a. „Optimization for engine calibration“. In: *ENGOPT International conference on engineering optimization, Rio de Janeiro, Brazil*. (2008), S. 1–5.

[Lia12] W. W. J. Liang. „Bayesian nonstationary Gaussian process models via treed process convolutions“. Diss. University of California, Santa Cruz, 2012.

[LLL13] J. Liu, S. C. Li und X. Luo. „Iterative reweighted noninteger norm regularizing svm for gene expression data classification“. In: *Computational and mathematical methods in medicine* (2013).

[LR11] A. Lovison und E. Rigoni. „Adaptive sampling with a Lipschitz criterion for accurate metamodeling“. In: *Communications in Applied and Industrial Mathematics* 1.2 (2011), S. 110–126.

[LS08] J. Laurenceau und P. Sagaut. „Building efficient response surfaces of aerodynamic functions with kriging and cokriging“. In: *AIAA journal* 46.2 (2008), S. 498–507.

[Lum+04] G. Lumsden u. a. *Mapping Complex Engines*. Techn. Ber. SAE Technical Paper, 2004.

[M+03] E. Martini, H. Voß, S. Töpfer u. a. „Effiziente Motorapplikation mit lokal linearen neuronalen Netzen“. In: *MTZ-Motortechnische Zeitschrift* 64.5 (2003), S. 406–413.

[MA09] T. Mackman und C. Allen. „Adaptive sampling for CFD data interpolation using radial basis functions“. In: *27th AIAA Applied Aerodynamics Conference*. (2009), S. 3515.

[Mac03] D. J. MacKay. *Information theory, inference and learning algorithms*. Cambridge University Press, 2003.

[Mac92] D. J. MacKay. „Information-based objective functions for active data selection“. In: *Neural computation* 4.4 (1992), S. 590–604.

[Mal+10] G. W. Malaczynski u. a. *Replacing volumetric efficiency calibration look-up tables with artificial neural network-based algorithm for variable valve actuation*. Techn. Ber. SAE Technical Paper, 2010.

[MAP08] A. A. Malikopoulos, D. N. Assanis und P. Y. Papalambros. *Optimal engine calibration for individual driving styles*. Techn. Ber. SAE Technical Paper, 2008.

[Mar+12] F. Mariani u. a. *Artificial intelligence methodologies for oxygen virtual sensing at diesel engine intake*. Techn. Ber. SAE Technical Paper, 2012.

[MJ97] R. Murray-Smith und T. Johansen. *Multiple model approaches to nonlinear modelling and control*. CRC Press, 1997.

[Mon08] D. C. Montgomery. *Design and analysis of experiments*. John Wiley & Sons, 2008.

[Moo+95] J. Moody u. a. „A simple weight decay can improve generalization“. In: *Advances in neural information processing systems* 4 (1995), S. 950–957.

[Mor80] H. Moritz. „Advanced physical geodesy“. In: *Advances in Planetary Geology* 1 (1980).

[MR09] A. Melkumyan und F. Ramos. „A Sparse Covariance Function for Exact Gaussian Process Inference in Large Datasets.“ In: *IJCAI*. Bd. 9. (2009), S. 1936–1942.

[Mur12] K. P. Murphy. *Machine learning: a probabilistic perspective*. MIT Press, 2012.

[Nat10] M. Natrella. *e-handbook of statistical methods*. NIST/SEMATECH, 2010.

[Nel13] O. Nelles. *Nonlinear system identification: from classical approaches to neural networks and fuzzy models*. Springer Science & Business Media, 2013.

[Nel97] O. Nelles. „LOLIMOT-Lokale, lineare Modelle zur Identifikation nichtlinearer, dynamischer Systeme“. In: *at-Automatisierungstechnik* 45.4 (1997), S. 163–174.

[Ng04] A. Y. Ng. „Feature selection, L 1 vs. L 2 regularization, and rotational invariance“. In: *Proceedings of the twenty-first international conference on Machine learning*. ACM. (2004), S. 78.

[NSP09] D. Nguyen-Tuong, M. Seeger und J. Peters. „Model learning with local gaussian process regression“. In: *Advanced Robotics* 23.15 (2009), S. 2015–2034.

[OB06] B. Ochoa und S. Belongie. „Covariance propagation for guided matching“. In: *Proceedings of the Workshop on Statistical Methods in Multi-Image and Video Processing*. (2006).

[Pap93] V. Papathanasiou. „Some characteristic properties of the Fisher information matrix via Cacoullos-type inequalities“. In: *Journal of Multivariate analysis* 44.2 (1993), S. 256–265.

[Par+12] J. M. Parr u. a. „Enhancing infill sampling criteria for surrogate-based constrained optimization“. In: *Journal of Computational Methods in Sciences and Engineering* 12.1, 2 (2012), S. 25–45.

[Par94] J.-S. Park. „Optimal Latin-hypercube designs for computer experiments“. In: *Journal of statistical planning and inference* 39.1 (1994), S. 95–111.

[Pay14] N. Payne. „Evaluating the Impact of Heteroscedasticity on the Predictive Ability of Modern Regression Techniques“. Simon Fraser University, 2014.

[PB46] R. L. Plackett und J. P. Burman. „The design of optimum multifactorial experiments“. In: *Biometrika* 33.4 (1946), S. 305–325.

[PKB08] C. Plagemann, K. Kersting und W. Burgard. „Nonstationary Gaussian process regression using point estimates of local smoothness“. In: *Joint European Conference on Machine Learning and Knowledge Discovery in Databases*. Springer. (2008), S. 204–219.

[PKR06] T. Pfingsten, M. Kuss und C. E. Rasmussen. „Nonstationary gaussian process regression using a latent extension of the input space“. In: *Eighth World Meeting of the International Society for Bayesian Analysis*. (2006).

[Pla08] C. Plagemann. „Gaussian processes for flexible robot learning“. Diss. Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, 2008.

[PM07] J. Peyton Jones und K. Muske. „Automatic calibration of 1 and 2-d look-up tables using recursive least-squares identification techniques“. In: *Electronic Engine Controls* 2007-01 (2007), S. 1343.

[PM12] L. Pronzato und W. G. Müller. „Design of computer experiments: space filling and beyond“. In: *Statistics and Computing* 22.3 (2012), S. 681–701.

[PS04] C. Paciorek und M. Schervish. „Nonstationary covariance functions for Gaussian process regression“. In: *Advances in neural information processing systems* 16 (2004), S. 273–280.

[Puk06] F. Pukelsheim. *Optimal design of experiments*. Society for Industrial und Applied Mathematics, 2006.

[PW88] L. Pronzato und É. Walter. „Robust experiment design via maximin optimization“. In: *Mathematical Biosciences* 89.2 (1988), S. 161–176.

[Rei12] K. Reif. *Grundlagen des Dieselmotors*. Hrsg. von K. Reif. Wiesbaden: Vieweg+Teubner Verlag, 2012, S. 28–45.

[RHW88] D. E. Rumelhart, G. E. Hinton und R. J. Williams. „Learning representations by back-propagating errors“. In: *Cognitive modeling* 5.3 (1988), S. 1.

[Rid07] G. Ridgeway. *All of Nonparametric Statistics*. Taylor & Francis, 2007.

[RPS11] D. Rasch, J. Pilz und P. Simecek. *Optimal experimental design with R*. CRC Press Boca Raton, FL, 2011.

[RS12] B. Rosenbaum und V. Schulz. „Comparing sampling strategies for aerodynamic Kriging surrogate models“. In: *ZAMM-Journal of Applied Mathematics and Mechanics/Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik* 92.11-12 (2012), S. 852–868.

[Rüs14] L. Rüschendorf. *Mathematische Statistik*. Springer, 2014.

[RW06] C. E. Rasmussen und C. K. Williams. *Gaussian processes for machine learning*. Bd. 2. 3. MIT Press Cambridge, MA, 2006.

[Sch+78] G. Schwarz u. a. „Estimating the dimension of a model“. In: *The annals of statistics* 6.2 (1978), S. 461–464.

[Seo+00] S. Seo u. a. „Gaussian process regression: Active data selection and test point rejection“. In: *Mustererkennung 2000*. Springer, (2000), S. 27–34.

[Set10] B. Settles. *Active learning literature survey*. Techn. Ber. 55-66. University of Wisconsin-Madison, Department of Computer Sciences, 2010, S. 11.

[SG05] E. Snelson und Z. Ghahramani. „Sparse Gaussian processes using pseudo inputs“. In: *Advances in neural information processing systems* (2005), S. 1257–1264.

[SG12] E. Snelson und Z. Ghahramani. „Variable noise and dimensionality reduction for sparse Gaussian processes“. In: *arXiv preprint arXiv:1206.6873* (2012).

[SH84] D. M. Steinberg und W. G. Hunter. „Experimental design: review and comment“. In: *Technometrics* 26.2 (1984), S. 71–97.

[Sha01] C. E. Shannon. „A mathematical theory of communication“. In: *ACM SIGMOBILE Mobile Computing and Communications Review* 5.1 (2001), S. 3–55.

[Sim06] D. Simon. *Optimal state estimation: Kalman, H infinity, and nonlinear approaches*. John Wiley & Sons, 2006.

[SKP01] F. Schwenker, H. A. Kestler und G. Palm. „Three learning phases for radial-basis-function networks“. In: *Neural networks* 14.4 (2001), S. 439–458.

[SLK05] A. Sóbester, S. J. Leary und A. J. Keane. „On the design of optimization strategies based on global response surface approximation models“. In: *Journal of Global Optimization* 33.1 (2005), S. 31–59.

[SM08] M. Stehlik und W. G. Müller. „Fisher information in the design of computer simulation experiments“. In: *Journal of Physics: Conference Series*. Bd. 135. 1. IOP Publishing. (2008), S. 012095.

[SR13] P. Stephan und W. Roetzel. „VDI-Wärmeatlas“. In: *Arbeitsblatter CA* (2013).

[SS02] B. Schölkopf und A. J. Smola. *Learning with kernels: support vector machines, regularization, optimization, and beyond*. MIT Press, 2002.

[SS04] A. J. Smola und B. Schölkopf. „A tutorial on support vector regression“. In: *Statistics and computing* 14.3 (2004), S. 199–222.

[SSI09] H. Sequenz, A. Schreiber und R. Isermann. „Identification of nonlinear static processes with local polynomial regression and subset selection“. In: *IFAC Proceedings Volumes* 42.10 (2009), S. 138–143.

[SV97] A. Smola und V. Vapnik. „Support vector regression machines“. In: *Advances in neural information processing systems* 9 (1997), S. 155–161.

[SVH10] K. Siebertz, D. Van Bebber und T. Hochkirchen. *Statistische Versuchsplanung: design of experiments (DoE)*. Springer-Verlag, 2010.

[SW97] P. Sebastiani und H. P. Wynn. „Bayesian experimental design and Shannon information“. In: *Proceedings of the Section on Bayesian Statistical Science*. Bd. 44. The Association. (1997), S. 176–181.

[The+15] S. Thewes u. a. „Advanced Gaussian Process Modeling Techniques“. In: *Design of Experiments (DoE) in Engine Development. Expert Verlag* (2015).

[Tib96] R. Tibshirani. „Regression shrinkage and selection via the lasso“. In: *Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological)* (1996), S. 267–288.

[Tik63] A. Tikhonov. „Solution of incorrectly formulated problems and the regularization method“. In: *Soviet Math. Dokl.* 5 (1963), S. 1035–1038.

[Tip01] M. E. Tipping. „Sparse Bayesian learning and the relevance vector machine“. In: *Journal of machine learning research* 1.Jun (2001), S. 211–244.

[TK12] D. J. J. Toal und A. J. Keane. „Non-stationary kriging for design optimization“. In: *Engineering Optimization* 44.6 (2012), S. 741–765.

[Tri08] F. Triefenbach. „Design of experiments: the D-optimal approach and its implementation as a computer algorithm“. South Westphalia University of Applied Sciences, 2008.

[Van+61] H. Van der Vaart u. a. „Some extensions of the idea of bias“. In: *The Annals of Mathematical Statistics* 32.2 (1961), S. 436–447.

[Via13] F. A. Viana. „Things you wanted to know about the Latin hypercube design and were afraid to ask“. In: *10th World Congress on Structural and Multidisciplinary Optimization*. (2013), S. 1–9.

[Vla08] A. Vlachos. „A stopping criterion for active learning“. In: *Computer Speech & Language* 22.3 (2008), S. 295–312.

[Was10] J. A. Wass. „First Steps in Experimental Design-The Screening Experiment“. In: *Journal of Validation Technology* 16.2 (2010), S. 49.

[WCZ14] W. Wang, W. Cai und Y. Zhang. „Stability-Based Stopping Criterion for Active Learning“. In: *2014 IEEE International Conference on Data Mining*. IEEE. (2014), S. 1019–1024.

[WGZ06] L. Wang, M. D. Gordon und J. Zhu. „Regularized least absolute deviations regression and an efficient algorithm for parameter tuning“. In: *Sixth International Conference on Data Mining (ICDM'06)*. IEEE. (2006), S. 690–700.

[Whi80] H. White. „A heteroskedasticity-consistent covariance matrix estimator and a direct test for heteroskedasticity“. In: *Econometrica: Journal of the Econometric Society* (1980), S. 817–838.

[WL11] D. C. Woods und S. M. Lewis. „Continuous optimal designs for generalized linear models under model uncertainty“. In: *Journal of Statistical Theory and Practice* 5.1 (2011), S. 137–145.

[Won94] W. K. Wong. „Comparing robust properties of A, D, E and G-optimal designs“. In: *Computational statistics & data analysis* 18.4 (1994), S. 441–448.

[WS07] G. G. Wang und S. Shan. „Review of metamodeling techniques in support of engineering design optimization“. In: *Journal of Mechanical design* 129.4 (2007), S. 370–380.

[XC11] Y. Xu und J. Choi. „Adaptive sampling for learning Gaussian processes using mobile sensor networks“. In: *Sensors* 11.3 (2011), S. 3051–3066.

[Xio+07] Y. Xiong u. a. „A non-stationary covariance-based Kriging method for metamodelling in engineering design“. In: *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 71.6 (2007), S. 733–756.

[Yat78] F. Yates. *The design and analysis of factorial experiments*. Imperial Bureau of Soil Science Harpenden, UK, 1978.

[YS09] M. Yang und J. Stufken. „Support points of locally optimal designs for nonlinear models with two parameters“. In: *The Annals of Statistics* (2009), S. 518–541.

[YT02] H.-F. Yu und S.-T. Tseng. „Designing a screening experiment for highly reliable products“. In: *Naval Research Logistics (NRL)* 49.5 (2002), S. 514–526.

[Zag14] S. Zaglauer. „Methode zur multikriteriellen Optimierung des Motorverhaltens anhand physikalisch motivierter Modelle“. Diss. Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnbeg (FAU), 2014.

[ZTT77] O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor und R. L. Taylor. *The finite element method*. Bd. 3. McGraw-Hill London, 1977.

[ZWH08] J. Zhu, H. Wang und E. Hovy. „Multi-criteria-based strategy to stop active learning for data annotation“. In: *Proceedings of the 22nd International Conference on Computational Linguistics-Volume 1*. Association for Computational Linguistics. (2008), S. 1129–1136.