

3 Parameterschätzung und Modelldiskriminierung

Befasst man sich mit dem Thema Modellierung eines Prozesses, so muss man sich im ersten Schritt mit der Frage nach dem Ziel beschäftigen. Abhängig von der Zielsetzung ist die Herangehensweise, das Bearbeiten und Bewerten eines Modells eine andere, insbesondere sind die Kriterien, die über die Akzeptanz eines Modells entscheiden, unterschiedlich. Wir wollen im Folgenden in formloser Art und Weise darstellen, dass Modellierung keine triviale Aufgabe ist und es kein eingleisiges Kochbuch gibt, anhand dessen ein Modell aufgestellt und bewertet werden kann. Aus diesem Grund ist es unabdingbar, dass dem Modellierer Hilfsmittel an die Hand gegeben werden, anhand derer er das Produkt seiner Bemühungen (nämlich das Modell) testen kann.

Sei nun ein ausreichend komplexer Datensatz gegeben, d.h. der interessierende Prozess sei unter verschiedenen Versuchsbedingungen gemessen und es seien jeweils (wenn möglich) eine Vielzahl an Systemgrößen gemessen. Der folgende „Zielbaum“ erhebt keinerlei Anspruch auf Vollständigkeit, weder was die Grundziele noch die Vorgehensweisen betrifft. (Für den Begriff der Parameterschätzung verwenden wir im folgenden auch *parameter estimation*, kurz PE.)

3.1 Ziel-Baum der Modellierung

Es gibt mindestens folgende Startpunkte, Grundziele und Vorgehensweisen zum Auffinden eines guten Modells:

1. Grundziel: Sorgfältige, schrittweise Entwicklung eines Modells, welches zu den vorgegebenen Daten „gut passt“. Dieses Ziel wird noch nicht unter dem Stichwort Modelldiskriminierung notiert.
 - (a) Startpunkt: es gibt noch keinerlei Modellidee
 - i. Eine Verfahrensmöglichkeit ist die Reduzierung der Daten (z.Bsp. auf Datensatz mit nur einer Temperatur, isothermer Prozess) so weit, bis man die verbleibenden Daten durch strukturelle Modellvorgaben (Kinetikbeschreibungen) abbilden kann. Es stellt sich die Frage, welche Güte dieses Modell hat. Als Gütetest bietet sich zum Beispiel das Residuum an. Eine Parameterschätzung passt die Parameter des Modells bestmöglich an die Messdaten an und liefert das verbleibende Residuum F_R (zwischen Messdaten und simulierten Daten). Es liegt im Ermessen des Modellierers, ab welcher Größenordnung das ermittelte Residuum ausreichend gut ist. Wenn das Residuum nicht ausreichend klein ist, muss das Modell verworfen bzw. modifiziert werden. Soll das Modell im Weiteren verwendet und aufgestockt werden, so dass es auch die ursprünglichen vollständigeren Daten abbildet, so sollten die Parameter untersucht werden. In manchen Prozessen treten Größen auf, deren Wert durch bestimmte Prozessbedingungen nicht verändert wird. Kann eine solche Größe als konstanter Parameter eines Modells identifiziert werden (Beispiel: eine gewisse Initiation zwischen Reaktant A und B tritt immer mit einer Geschwindigkeit von k_1 auf,

unabhängig von Temperatur oder Zuflüssen oder anderem), so kann sie als Testgröße genommen werden (eine Modellerweiterung, die verlangt, dass eine solche Konstante unter einer PE ihren Wert ändern muss, um bestimmte Daten zu erreichen, kann nicht sinnvoll sein). Auch die Einbeziehung einer Messdatenvarianz ist bei der Beurteilung der Parameter von Nutzen. Was macht das Modell mit seinen Parametern in einer PE, wenn sich die Messdaten leicht ändern würden? Müssen diese völlig geändert werden, so könnte das andeuten, dass die Modellstruktur nicht zu den Daten passt. Kommt man mit leichten Änderungen der Parameter zum Ziel, so würde das Vertrauen in das vorliegende Modell schaffen.

Sobald ein Modell als Rumpfmmodell, also als ein Modell akzeptiert ist, welches als Grundlage für Erweiterungen sinnvoll ist, geht es weiter mit 1b.

- (b) Startpunkt: ein Rumpfmmodell liegt vor, welches einen bestimmten Effekt nachbildet.

Das Modell kann als Baustein für komplexere Modelle verstanden und nun aufgestockt werden, um weitere Effekte abzubilden (z.B. von 1a kommend wird der Datensatz wieder erweitert, weitere Temperaturbereiche werden hinzugenommen, oder grundsätzlich weitere Effekte in Daten dargestellt). Eine Parameterschätzung bringt Aufschluss darüber, ob das bisherige Modell bereits die zusätzlichen Messdaten abbilden kann (Residuum genügend klein); evtl. werden bisher insensitive Parameter nun sensitiv. Es liegt im Ermessen des Modellierers, welche mögliche Residuumsverschlechterung akzeptiert wird, um mit der Erweiterung weiterzuarbeiten.

- (c) Startpunkt: es liegt ein Total-Modell vor, welches nach bisherigem Kenntnisstand eine Vielzahl Effekte abbildet und eigentlich zu mächtig für die gegebenen Daten ist. Hier kann eine Sensitivitätsanalyse Hinweise auf überflüssige Parameter geben, die vielleicht eliminiert werden können. Soll dieses Modell nicht weiter als Baustein benutzt werden, so ist die Benutzbarkeit anhand des Residuums gegeben.

2. Grundziel: Aus verschiedenen vorliegenden und anerkannten Rumpfmmodellen soll eines oder eine Kombination gefunden werden, die sogar eine mögliche Vermischung von verschiedenen Effekten in den Daten abbildet. Die Frage, welche Kombination den echten Prozess am besten abbildet, ist dann nicht mehr alleine mit einem Residuum zu klären, es sei denn, eines der resultierenden Modelle bildet den wahren Prozess nahestmöglich ab und zeigt (bei Vorliegen genügend vieler Daten!) damit einen überzeugend geringen Residuumswert. Wahrscheinlicher ist, dass es mehrere Kombinationen mit ähnlich schlechtem Residuum geben wird. Um nun dennoch Verständnis für den Prozess zu entwickeln und zu entscheiden, welches Modell weiteren Entwicklungsschritten unterworfen wird, muss das **grundsätzliche Vermögen der Modelle** verglichen werden, die Daten abzubilden - Modelldiskriminierung ist die dann folgende Aufgabe.
3. Grundziel: Aus Mangel an Einblick in die tieferen Strukturen eines Prozesses wird automatisch eine Vielzahl an Modellen generiert, von denen eines/eine Gruppe ausgewählt werden soll. Solche Modellen werden aus beliebigen Bausteinen zusammen „gewürfelt“. Hier steht nicht das Verstehen des Prozesses im

Vordergrund, sondern die Reproduzierbarkeit der Daten. Auch hier ist Modell-diskriminierung die Aufgabe.

3.2 Rolle der Parameterschätzung

Unabhängig vom Ziel einer Modellierung ist die Bestimmung der im Hinblick auf die Daten optimalen Parameter über eine Parameterschätzung notwendig. Sehr sinnvoll, wenn auch aufgrund der Datenmenge nicht immer machbar, ist es, sich vorab mit Hilfe einer Parametervariation ein Bild darüber zu machen, ob das untersuchte Modell überhaupt in der Lage ist, gewisse Merkmale der Daten abzubilden (lokale Extrema an bestimmten Stellen, stationäre Zustände, Kurvenverläufe). Bei einer Parametervariation variiert man jeden Parameter innerhalb eines eigenen Intervalls und berechnet für jede Kombination von Parameterwerten die Lösungstrajektorien. Der große Vorteil dieses simplen Vorgehens ist der, dass man einen Überblick über das Verhalten des Modells (innerhalb der gegebenen Parametergrenzen) bekommt und man sehr gut einschätzen kann, welche Möglichkeiten das Modell birgt. Damit kann man auch gut beurteilen, ob es eine Parameterkonstellation gibt oder geben kann, die die Merkmale nachbildet, die den Prozess auszeichnen. Gibt es keine solche Parameterkonstellation, so hat das Modell sicher ein Defizit (verursacht zum Beispiel durch fehlerhafte Implementierung oder fehlerhafte Modellierung).

Eine Parametervariation ist aber nicht immer so weit vollständig machbar, dass dadurch auch tatsächlich optimale Parameter ermittelt werden könnten. Diese Aufgabe der Parameterschätzung besteht weiterhin, da diese zusätzlich den exakten Wert des Residuums bestimmen kann und (je nach Implementation) Aussagen über die Sensitivität der Parameter machen kann.

3.2.1 Problemstellung einer Parameterschätzung

Gegeben sei ein Modell \mathbf{M} eines chemischen Reaktionssystems, d.h. gegeben sei die Repräsentation dieses Prozesses in einem m -dimensionalen System gewöhnlicher Differentialgleichungen (m sei die Anzahl an Zustandsgrößen, $m \in \mathbb{N}^+$) mit Startwerten y_0 . Das Modell hänge von einem Parametersatz $p \in \mathbb{R}^n$ ab.

$$\frac{d}{dt}y(t) = f(y(t), p), \quad y_0 = y(t_0) \quad (2)$$

Der Verlauf der Lösung $y \in \mathbb{R}^m$ wird durch m Trajektorien $\Phi^j(t, p)$, $j = 1, \dots, m$ beschrieben.

Gegeben seien ebenso Messdaten $d \in \mathbb{R}^s$, $s \leq m$, für alle oder einen Teil der Trajektorien an bestimmten Messpunkten t_i , $i = 1, \dots, \hat{N}$. Jeder der Messdatenpunkte $d_i^l = d^l(t_i)$, $l = 1, \dots, s$ unterliege einem Messfehler δd_i^l . Die Annahme, dass die Messdaten den Zustandsgrößen direkt zugeordnet werden können, sei OE erfüllt. Aus Gründen der Konsistenz zu den im folgenden beschriebenen Verfahren und später auch aus Implementationsgründen sortieren wir die Messdaten um (dies wird noch genauer in 5.1 durchgeführt), ersetzen \hat{N} durch $N = \hat{N} * s$ und erhalten OE die folgende Darstellung:

Die Lösung des DGL-Systems sei in $\Phi(t, p)$ beschrieben. Gegeben seien Messpunkte $t_i, i = 1, N$ sowie Messdaten $d_i, i = 1, N$ mit Messfehlern δd_i .

Das Ziel sei es nun, die Parameter des Modells so zu bestimmen (schätzen), dass Modell und Messdaten „möglichst gut zueinander passen“. Das verlangt zum Einen, dass die Parameter als die Stellgrößen des Modells eindeutig definiert sind (wovon wir im Folgenden ausgehen werden), und zum Anderen, dass es eine Definition von „zueinander passen“ gibt. Für diese Definition, die man auch als Abstandsbegriff (Residuum) auffassen kann, gibt es verschiedene Ansätze, die wir im folgenden kurz vorstellen werden.

3.2.2 Methode der gewichteten kleinsten Quadrate

Die gebräuchlichste Definition ist die von Carl Friedrich Gauß entwickelte Methode der kleinsten Quadrate (eine sehr schöne Einführung dieses Verfahrens findet sich in [10]). Mit deren Hilfe lässt sich das Ziel mit obiger Darstellung (2) folgendermassen formulieren:

$$\sum_{i=1}^N \left(\frac{d_i - \Phi(t_i, p)}{\delta d_i} \right)^2 = \min \quad (3)$$

Dieses Problem lässt sich mit Hilfe der Bezeichnung

$$F(p) = (f_i(p)) = \left(\frac{d_i - \Phi(t_i, p)}{\delta d_i} \right), i = 1, \dots, N \quad (4)$$

umformulieren in

$$\|F(p)\| = \min \quad (5)$$

und wir erhalten ein Minimierungsproblem.

3.2.3 Maximum-likelihood-Schätzer

Die Maximum-Likelihood-Methode betrachtet jeden Messpunkt (t_i, d_i) als Zufallsvariable. Durch k verschiedene Messungen in jedem Punkt ist die (Wahrscheinlichkeitsdichte)verteilung $P(d_i)$ der gemessenen Werte bekannt. Man kann nun fragen: wie müssen die Parameter p gewählt sein, so dass die Wahrscheinlichkeit möglichst groß ist, dass die Modellwerte $\Phi(t_i, p)$ und die gemessenen Daten übereinstimmen? Dazu muss man die Wahrscheinlichkeit für das Übereinstimmen von Messwert und Modellwert betrachten - die sogenannte Likelihood-Funktion definiert sich zu

$$L(p) = P(d_1|p)P(d_2|p)\dots P(d_N|p) = \prod_{i=1}^N P(d_i|p) \quad (6)$$

Gesucht wird nun derjenige Parameter p , bei dem diese Funktion maximal wird.

$$L(p) = \max \quad (7)$$

Für dieses Verfahren ist die genaue Kenntnis der Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung in jedem Messpunkt notwendig, was nicht praktikabel ist. Daher gibt es als Einschränkung dieser Methode den:

ML-Schätzer für Gauß-verteilte Messungen Unter der Annahme, dass die Messungen Gauß-verteilt sind mit Erwartungswert $f(t_i, p)$ und Varianz σ_i^2 , so folgen sie der Dichteverteilung

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_i} \exp \left[-\frac{(d_i - f(t_i, p))^2}{2\sigma_i^2} \right] \quad (8)$$

Die negative logarithmische Likelihood-Funktion, die i.a. anstelle der direkten Likelihood-Funktion betrachtet wird, ist dann

$$F(p) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^l \left(\frac{d_i - f(t_i, p)}{\sigma_i} \right)^2 + const \quad (9)$$

und stimmt damit (bis auf den Faktor 1/2) mit der Methode der kleinsten Quadrate überein.

Als Fazit kann man den Gauß'schen Ansatz als den Ansatz betrachten, der in allgemeiner Form verwendet werden sollte und auch verwendet wird, um die Schätzung von optimalen Parametern zu ermöglichen.

3.3 Modelldiskriminierung

Punkt 2 (und auch 3) des Zielbaumes beschreiben die Lage, die für unsere Thematik gedacht sind: es liegen verschiedene Modelle mit schlechtem Residuum bzgl. der gegebenen Daten vor. Ein zusätzliches Modellmerkmal sollte dann (wie oben motiviert) sicherlich die Frage sein: wie verhalten sich die Trajektorien bei Variation der Parameter. Kann das Modell, auch wenn es in der aktuellen Form die Daten nicht unbedingt gut trifft, grundsätzlich die Formen der Messdaten nachbilden? Eine solche Variation der Parameter kann man im Anschluss an eine PE-Anpassung durchführen - allerdings bleibt dies unbefriedigend, weil man zwar optisch Trajektorien bei variierten Parametern und Messkurven vergleichen kann, es aber kein Maß für das Ergebnis gibt und damit kein weiteres Modellunterscheidungskriterium vorliegt. Die Alternative ist die Einführung von Parametervarianzen in jedes Modell und das Mitrechnen der Auswirkungen von Varianz in den Parametern (Störungsentwicklung, Propagation). Dieses Mitrechnen bedarf gewisser Einschränkungen, damit das Verfahren durchführbar bleibt. Eine Grundannahme wird sein, dass die Parameter gaussverteilte Zufallsvariable sind. Eine weitere Einschränkung ist die Durchführung einer linearen Propagation anstelle einer vollständigen Propagation. Es wurde ein Konzept entwickelt, mit dessen Hilfe man nun in jedem Punkt, insbesondere in jedem Messpunkt, angeben kann, wie sich die Störung in einem Parameter auf die Trajektorie auswirkt.

Stellt man jetzt an die Messdaten die äquivalente Frage (nämlich: welcher Wert wird angenommen, wenn nicht gerade der Erwartungswert angenommen wird, d.h. wie sieht die Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung aus), so kann man durch Definition der Überlappung von Messdatenwahrscheinlichkeitsdichteverteilung und Modell-Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung in jedem Messpunkt ein Maß dafür angeben, wie gut das Modell die Messdaten, jeweils als Zufallsvariable gesehen, abbildet. Dies betrifft Aussagen wie: (Beispiel 1) für einen gewissen Messbereich sind die Daten sehr

verschmiert, kann man Parametervarianzen angeben, so dass das Modell das entsprechend abbildet? (Beispiel 2) Für einen gewissen Messbereich sind die Daten sehr scharf und genau gemessen, was macht das Modell in diesem Bereich?

Die Definition der Überlappung (Overlap) werden wir im folgenden Kapitel bereitstellen.

Ansatz Der Ansatz des Overlap-Konzepts geht aber über das Vergleichen von Modelltrajektorien bei bestimmten, festen Parametervarianzen und Messdaten mit Messvarianzen hinaus: die Parametervarianzen werden in die Parameterschätzung miteinbezogen! Das Zielfunktional betrifft dann nicht mehr nur den Abstand zwischen Messdaten und Trajektorie, sondern (durch das Auffassen sowohl der Daten als auch der Trajektorien als Erwartungswert mit Varianz) den Abstand zwischen den jeweiligen Erwartungswerten F_R^i und zusätzlich den neu definierten Overlap F_O^i . Es wird ein Zielfunktional gebildet, welches aus beiden Anteilen besteht:

$$F^i(p, \delta p) := (\alpha \cdot F_R^i(p), (1 - F_O^i(p, \delta p)))$$

in welchem α die Rolle eines Spiel- oder Gewichtungsparemters übernimmt.

Zu erwarten ist, dass eine Parameterschätzung bzgl. dieser neuen Zielfunktion bei kleinen Varianzen in den Messdaten etwa dieselben optimalen Werte der Parameter ausgibt; sind die Messdatenvarianzen aber nicht klein, so sollte der Overlap im Zielfunktional zu einer Verschiebung der optimalen Parameter und einer Belegung der Parametervarianzen mit einem deutlich von Null verschiedenen Wert führen.

Abgrenzung des Ansatzes Das Overlap-Konzept ist gedacht für den Zeitpunkt innerhalb einer Modellentwicklung, in dem noch wenig strukturelles Wissen über den Prozess vorhanden ist und mehrere in Frage kommende Modelle zur Verfügung stehen. Es gibt natürlich bereits verschiedene Ansätze zur Modellbewertung in dieser Situation. Ihnen gemeinsam ist sicher die Durchführung einer Parameterschätzung, die einen Eindruck geben kann, wie Modell und Messdaten zueinander passen. Einer dieser Ansätze beruht darauf, im Anschluss an die PE zusätzliche statistische Tests durchzuführen, über die die sogenannten Konfidenzintervalle für die Parameter angegeben werden oder Werte wie der f-Test oder t-Test. Ein anderer Ansatz, der sogenannte Bayessche Ansatz, testet die Modelle anhand einer durch zusätzliches Wissen erworbenen vorgegebenen Verteilung der Parameter. Im Gegensatz zum Overlap-Konzept testen diese Ansätze das Modell an den durch die PE erhaltenen Parameterwerte, während das Overlap-Konzept durch seine neu definierte Zielfunktion andere Aussagen zu den Parametern macht. Eine genaue und ausführliche Abgrenzung des Overlap-Konzepts zu den erwähnten Ansätzen (Frequentist Methode sowie Bayesscher Ansatz) findet sich in [30].

Aufgabe Aufgabe ist es daher, das Programmpaket PRESTO-KINETICS so zu erweitern, dass es

1. die Eingabe von Parametervarianzen zulässt
2. eine (lineare) Propagation der Parametervarianzen berechnet
3. den Overlap berechnet
4. die Parameterschätzung bzgl. des erweiterten Zielfunktionals durchführt

Im Laufe der Entwicklungen zeigte es sich, dass weitere Hilfestellungen innerhalb einer Parameterschätzung implementiert werden mussten, um sowohl die Komplexität als auch den Rechenaufwand in vertretbaren Grenzen zu halten. Als wichtigstes Hilfsmittel ist das Verfahren zur Reduktion von Richtungen bei korrelierten Parametern zu nennen, welches auch unabhängig vom Overlap-Konzept bereits erfolgreich innerhalb von Optimierungen eingesetzt werden konnte.

Sämtliche Aufgaben wurden gelöst und werden im weiteren beschrieben werden.

Modellbewertung ist ein bisher noch ungelöstes strategisches Problem und es wird auch keinen generellen Ansatz dafür geben. Jeder Modellierer muss für sich definieren, was er erreichen will bzw. was und in welchem Ausmass sein Modell beschreiben soll.