

Michael Buchholz

**Subspace-Identification
zur Modellierung von
PEM-Brennstoffzellen-Stacks**

Michael Buchholz

**Subspace-Identification zur Modellierung von
PEM-Brennstoffzellen-Stacks**

Schriften des
Instituts für Regelungs- und Steuerungssysteme
Karlsruher Institut für Technologie

Band 07

Subspace-Identification zur Modellierung von PEM-Brennstoffzellen-Stacks

von
Michael Buchholz

Dissertation, Karlsruher Institut für Technologie,
Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik, 2010

Impressum

Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
KIT Scientific Publishing
Straße am Forum 2
D-76131 Karlsruhe
www.uvka.de

KIT – Universität des Landes Baden-Württemberg und nationales
Forschungszentrum in der Helmholtz-Gemeinschaft



Diese Veröffentlichung ist im Internet unter folgender Creative Commons-Lizenz
publiziert: <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/3.0/de/>

KIT Scientific Publishing 2010
Print on Demand

ISSN 1862-6688
ISBN 978-3-86644-477-5

Subspace-Identification zur Modellierung von PEM-Brennstoffzellen-Stacks

Zur Erlangung des akademischen Grades eines

DOKTOR-INGENIEURS

von der Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik
der Universität Karlsruhe (TH)
genehmigte

DISSERTATION

von

Dipl.-Ing. Michael Buchholz
geboren in Nagold

Tag der mündlichen Prüfung: 23. Februar 2010

Hauptreferent: Prof. Dr.-Ing. Volker Krebs

Korreferent: Prof. Dr.-Ing. Gert F. Trommer

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand im Rahmen meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Regelungs- und Steuerungssysteme (IRS) der Universität Karlsruhe (TH). Dem Institutsleiter im Ruhestand und Hauptreferenten dieser Arbeit, Herrn Prof. Dr.-Ing. Volker Krebs, danke ich für das mir entgegengebrachte Vertrauen und die Freiheit in der Forschung, aber auch für die Möglichkeiten zur Entwicklung im Bereich der Lehre, die einen nicht zu vernachlässigenden und für mich auch wertvollen Anteil der Arbeitszeit einer solchen Tätigkeit ausmacht. Herrn Prof. Dr.-Ing. Gert F. Trommer danke ich für die freundliche Übernahme des Korreferats.

Eine solche Arbeit kann nur in einem Umfeld entstehen, in dem Kollegen für fachliche Fragen, aber auch für Gesprächsthemen aus dem alltäglichen Leben ein offenes Ohr haben. Daher möchte ich allen Kollegen, auch den „Nicht-Wissenschaftlern“, für die Zeit am IRS danken. Besonderer Dank geht an Erhard Hodrus, der nicht nur der Betreuer meiner Studien- und Diplomarbeit, sondern später auch mein Zimmernachbar und Mitstreiter an der „Rechnerfront“ war. Jens Niemeyer hat mir den Einstieg in die Thematik dieser Arbeit durch seine Vorarbeiten und die fachlichen Gespräche zum Thema Brennstoffzelle sehr erleichtert. Frau Gabriele Müller hatte stets ein offenes Ohr und aufmunternde Worte, außerdem haben mich ihre Berichte vom Car-Sharing überzeugt.

Ganz spezieller Dank gebührt Dirk Feßler und Florian Wolff, nicht nur für die unzähligen Mittagspausen mit Gesprächen rund um die Themen Regelungstechnik, Familie, Steuern und Versicherungen, Politik, Zukunft und viele mehr, sondern auch für die kritische Durchsicht der Arbeit. Ich drücke Euch die Daumen für Euren Endspurt!

Darüberhinaus danke ich auch den Kollegen bei meinem Industriepartner für die konstruktive Zusammenarbeit und die Projekte, durch die immer wieder der konkrete Anwendungsaspekt ins Blickfeld der Arbeiten gerückt wurde.

Allen von mir betreuten Studienarbeitern und Diplomanden danke ich herzlich für ihre Mitwirkung im Umfeld dieser Arbeit.

Da ich eine neue Tätigkeit angenommen habe, bevor diese schriftliche Ausarbeitung fertiggestellt war, habe ich auch von den neuen Kollegen am Institut für Mess-, Regel- und Mikrotechnik der Universität Ulm unter der Leitung von Herrn Prof.

Dr.-Ing. Klaus Dietmayer Unterstützung erfahren. Ich danke Euch – und insbesondere Dir, Klaus — für die freundliche Aufnahme, das Vertrauen, die Flexibilität und die Aufmunterungen, welche die Fertigstellung dieser Monografie beschleunigt haben.

Zum Erfolg meiner Arbeit haben meine Familie und Freunde maßgeblich beigetragen, in dem sie mir stets Rückhalt gaben, auch wenn sie, insbesondere im letzten Jahr des Schreibens, auch die Leidtragenden der hohen Arbeitsbelastung waren. Ich danke Euch allen für Euer Verständnis und Eure Unterstützung.

Für Deinen Anteil, Sandra, fehlen die passenden Worte, ich kann mich nur für Deine Liebe und Geduld sowie natürlich für die Korrektur der Rechtschreibfehler bedanken. Und nachdem Du, Jonathan, allein durch das lange Zusehen schon nahezu perfekt mit Tastatur und Maus umgehen kannst, ist nun endlich Zeit für neue, gemeinsame Entdeckungen in dieser spannenden Welt.

Neu-Ulm, den 26. Februar 2010

Michael Buchholz

„Damit das Mögliche entsteht,
muss immer wieder das Unmögliche versucht werden.“

Hermann Hesse (1877 - 1962)

Für meine Familie

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen der Systemidentifikation	7
2.1	Modellformen zur Beschreibung statischer und dynamischer Systeme	9
2.1.1	Statische Systeme	10
2.1.2	Lineare dynamische Systeme	15
2.1.3	Nichtlineare dynamische Systeme	25
2.2	Identifikationsverfahren für statische und dynamische Systeme	28
2.2.1	Methode der kleinsten Quadrate (LS-Schätzung)	30
2.2.2	Methode der Hilfsvariablen	33
2.2.3	Nichtlineare LS-Schätzung	35
2.2.4	Maximum-Likelihood-Schätzung	37
3	Subspace-based State-Space System Identification	43
3.1	Mathematische Grundlagen und Nomenklatur	44
3.1.1	Parameter- und Datenmatrizen	45
3.1.2	Matrixzerlegungen	50
3.1.3	Abbildungen und Projektionen	57
3.2	Allgemeiner Aufbau und Funktionsweise der 4SID-Algorithmen	63
3.2.1	Datenaufbereitung	64
3.2.2	Datenvorverarbeitung	66
3.2.3	Ordnungsbestimmung	77
3.2.4	Parameterschätzung	81
3.3	Geometrische Algorithmen	85
3.3.1	N4SID	87
3.3.2	MOESP	88
3.3.3	Generischer Algorithmus	89
3.4	Statistische Algorithmen	91
3.4.1	CVA	91
3.4.2	Statistische Herleitung der CVA	92
3.4.3	Weitere Verfahren	93
3.5	Prädiktor-basierte Algorithmen	94
3.5.1	PBSID	95
3.5.2	PBSIDopt	95

3.6	Vergleich der Algorithmen und mögliche Erweiterungen	96
3.6.1	Eigenschaften und Vergleich	96
3.6.2	Erweiterungen	100
3.7	Beispiel zur Arbeitsweise der 4SID-Verfahren	101
3.8	Zusammenfassung	107
4	Grundlagen der PEM-Brennstoffzelle	109
4.1	Funktionsweise der PEM-Brennstoffzelle	111
4.2	Aufbau eines PEMFC-Systems	115
4.3	Nachbildung des PEMFC-Systems auf einem Stack-Teststand	118
4.4	Systemtheoretische Betrachtung	119
5	Simulationsmodelle für PEMFC-Stacks	123
5.1	Existierende Ansätze für PEMFC-Stack-Modelle	125
5.2	Uryson-Modell	126
5.2.1	Datensätze	127
5.2.2	Statisches Teilmodell	135
5.2.3	Dynamisches Teilmodell	138
5.2.4	Ergebnisse des Gesamtmodells und Validation	156
5.2.5	Bewertung des Modellansatzes	161
5.3	Lineares Zustandsraummodell	166
5.3.1	Voruntersuchungen	166
5.3.2	Datensätze	168
5.3.3	Vorgehensweise und Ergebnisse	173
5.3.4	Bewertung des Modellansatzes	180
5.4	Zusammenfassung	180
6	Diagnoseansätze für PEMFC-Systeme	183
6.1	Existierende Ansätze zur PEMFC-Diagnose	184
6.2	Datensätze	185
6.3	Konzepte der Diagnoseansätze	187
6.3.1	Kalman-Filter	187
6.3.2	Partiell inverses Modell	189
6.4	Untersuchungen und Ergebnisse	190
6.5	Zusammenfassung	195
7	Zusammenfassung	199
A	Ergänzende Berechnungen zur 4SID	203
A.1	Berechnung der Projektionen mittels LQ-Zerlegung	203
A.2	IV-Schätzung des schiefen Prädiktors mittels LQ-Zerlegung	207
B	Parameter der PEMFC-Stack-Modelle	209
B.1	Uryson-Modell	209
B.2	Lineares Zustandsraummodell	211
B.3	Partiell inverse Modelle	212

C	Betreute Studien- und Diplomarbeiten	215
C.1	Studienarbeiten	215
C.2	Diplomarbeiten	216
D	Veröffentlichungen und Tagungsbeiträge	217
	Nomenklatur	219
	Literaturverzeichnis	225

Kapitel 1

Einleitung

Das Prinzip der Brennstoffzelle wurde 1838 vom deutsch-schweizerischen Chemiker Christian Friedrich Schönbein¹ entdeckt und im Januar des Jahres 1839 veröffentlicht [Sch39]. Nahezu zeitgleich zu Schönbeins Arbeit führte der Anwalt und Naturwissenschaftler Sir William Robert Grove² Versuche mit einem von ihm später als „gashaltige Voltasche Batterie“ bezeichneten Aufbau durch [Gro39, Gro42]. Dieser Aufbau gilt als die erste Brennstoffzelle und Grove somit als deren Erfinder.

Die einige Jahre später entwickelte Dynamomaschine drängte aufgrund ihrer einfachen Verwendbarkeit in Kombination mit der Dampfmaschine die Brennstoffzellen in den Hintergrund. Erst in den fünfziger Jahren des 20. Jahrhunderts wurde das Konzept der Brennstoffzelle für die Raumfahrtforschung wieder aufgegriffen. Der erste technische Einsatz von Brennstoffzellen, bei der diese einen Teil der elektrischen Energieversorgung übernahmen, erfolgte im Rahmen der „Gemini V“-Mission der NASA³.

Die Brennstoffzellenforschung der letzten Jahrzehnte konzentrierte sich überwiegend auf den Bereich der Werkstoffwissenschaften und den technischen Aufbau unter Berücksichtigung verschiedener Brennstoffzellentypen und Brenngasarten. Sowohl die Verbesserung der Brennstoffzellensysteme bis hin zur Marktreife als auch die notwendige Senkung der Kosten für ein konkurrenzfähiges Produkt im Vergleich zu konventionellen Lösungen zur Energieversorgung sind Gegenstand zahlreicher interdisziplinärer Forschungsanstrengungen weltweit.

Erst in den letzten Jahren, nachdem die Zellen die notwendige Leistungsfähigkeit erreicht hatten, wurde damit begonnen, auch die regelungstechnischen Aspekte der Brennstoffzellen zusammen mit den notwendigen peripheren Komponenten verstärkt

¹Christian Friedrich Schönbein, * 18. Oktober 1799 in Metzgingen, † 29. August 1868 in Baden-Baden; Studium der Chemie in Erlangen und an der Sorbonne in Paris; Professor in Basel

²Sir William Robert Grove, * 11. Juli 1811 in Swansea, Wales, † 1. August 1896 in London; Anwalt und Naturwissenschaftler; „Fellow“ der Royal Society und Mitbegründer der Chemical Society

³National Aeronautics and Space Administration (zivile Bundesbehörde der USA für Luft- und Raumfahrt), gegründet 1958

zu untersuchen, insbesondere im Hinblick auf die Integration als Energiewandler in technischen Systemen. Durch eine Vielzahl variabler Betriebsparameter sowie sehr komplexer — teilweise bis heute nicht abschließend untersuchter — chemischer und physikalischer Vorgänge beim Betrieb der Zellen stellen die Integration sowie die Regelung und Überwachung eines solchen Systems herausfordernde Aufgaben dar. Dabei muss gewährleistet werden, dass das System sicher und in einem Arbeitsbereich betrieben wird, der zu keiner Schädigung vor allem der Brennstoffzelle als besonders teurer und empfindlicher Komponente des Systems führt. Nur so kann durch eine lange Lebensdauer ein konkurrenzfähiges Produkt entwickelt werden.

Für Anwendungen im täglichen Leben sind Brennstoffzellen bisher nur in Nischen oder als Prototypen verfügbar. Brennstoffzellen, die als galvanisches Element direkt die in einem Brennstoff gespeicherte chemische Energie in elektrische Energie wandeln, haben beispielsweise gegenüber Batterien und Akkumulatoren den Vorteil, dass bei kontinuierlicher Zuführung des Brennstoffs die Energieversorgung aufrecht erhalten bleibt und keine Zeit zum Austausch oder Aufladen benötigt wird. Wie bei Batterien oder Akkumulatoren wird durch eine elektrisch serielle Verschaltung mehrerer Einzelzellen, einem sogenannten Brennstoffzellen-Stack⁴, der gewünschte Spannungsbereich erreicht.

Bei Verwendung von Wasserstoff als Brenngas entsteht als Reaktionsprodukt in der Brennstoffzelle nur Wasser, und es entstehen keine klimaschädlichen Gase. Dadurch werden Brennstoffzellen auch für die Hersteller von Automobilen interessant, da diese durch Gesetze in vielen Ländern und Regionen der Erde⁵ dazu gezwungen sind, sowohl den Ausstoß klimaschädlicher Abgase einzelner Fahrzeuge wie auch den der verkauften Fahrzeugflotte insgesamt unter vorgegebenen Grenzen zu halten.

Diese Arbeit beschränkt sich auf die Polymerelektrolytmembran-Brennstoffzellen (PEM-Brennstoffzellen, PEMFC⁶), welche von den meisten Automobilherstellern im Bereich der Brennstoffzellenfahrzeuge favorisiert wird. Diese werden bei Temperaturen unter 100 °C und mit Wasserstoff als Brenngas betrieben.

Der in der Kombination mit einem Brennstoffzellen-Stack verwendete Elektromotor im Fahrzeug kann, im Gegensatz zu einem Verbrennungsmotor, auch zur Rekuperation verwendet werden. Dabei wird die beim Bremsen eines Fahrzeugs frei werdende kinetische Energie durch den generatorischen Betrieb des Motors als chemische Energie in der Batterie gespeichert, anstatt sie durch die konventionellen Bremsen in thermische Energie zu wandeln. Dies senkt zusätzlich den Kraftstoffverbrauch, was

⁴engl. für Stapel. In der deutschsprachigen Literatur sind die Verwendung des englischen Begriffs sowie die Bezeichnung „Brennstoffzelle“ als Synonym für die Gesamtheit der verschalteten Zellen üblich.

⁵Eine Vorreiterrolle übernimmt hierbei der US-Bundesstaat Kalifornien mit seiner strikten Gesetzgebung. Weiterführende Informationen sind beispielsweise in [Bac06] zu finden.

⁶FC steht für „fuel cell“ (engl. für Brennstoffzelle).

neben dem positiven Effekt auf die Abgase in Zeiten steigender Rohstoffpreise auch ein direkter Vorteil für den Kunden ist.

Für die Auslegung des Antriebsstrangs in einem Brennstoffzellenfahrzeug, der sich deutlich von dem eines konventionellen Automobils mit Verbrennungsmotor unterscheidet, sind etliche Untersuchungen erforderlich, bei welchen die Effekte des Zusammenspiels der verschiedenen Komponenten analysiert werden müssen. Da der Aufbau vieler verschiedener Konfigurationen eines Antriebsstrangs zu kostspielig wäre, behilft man sich mit Simulationen, für die ein Gesamtmodell aus den Modellen der einzelnen Komponenten im Antriebsstrang zusammengesetzt wird. Dazu wird auch ein Modell des PEMFC-Stacks benötigt. Die große Zahl an durchzuführenden Simulationen erfordert ein Modell, das einerseits möglichst wenig Rechenzeit beansprucht, andererseits aber das Verhalten des Brennstoffzellen-Stacks auch im dynamischen Betrieb, wie er in einem Automobil durch die stark schwankenden Leistungsanforderungen bei normalen Fahrmanövern auftritt, gut widerspiegelt.

Stehen bei solchen Simulationen häufig sehr leistungsfähige Rechner zur Verfügung, bei denen gegebenenfalls auch etwas komplexere Modelle noch in annehmbarer Zeit simuliert werden können, so werden spätestens beim Entwurf modellbasierter Verfahren zur Betriebsführung und Diagnose von Brennstoffzellen in einem Fahrzeug sehr einfache Modelle benötigt, die auch auf den relativ leistungsschwachen Steuergeräten implementiert werden können. Da insbesondere in einem Fahrzeug einige wichtige Größen des PEMFC-Stacks messtechnisch oder aus Kostengründen nicht erfassbar sind, spielt deren Überwachung eine wichtige Rolle. Ein PEMFC-Stack ist aufgrund der komplexen chemischen Vorgänge empfindlich gegenüber Abweichungen vom leistungsabhängig gewählten optimalen Arbeitspunkt. Diese Abweichungen können zu einer schnelleren Alterung oder sogar zur Zerstörung führen. Daher ist es notwendig, mit geeigneten Diagnosemethoden aus den gemessenen Größen Rückschlüsse auf den Arbeitspunkt des Stack und die nicht gemessenen Größen zu ziehen. Aufgrund ihrer Leistungsfähigkeit sowie der Komplexität des Brennstoffzellensystems ist hierbei die modellbasierte Diagnose gegenüber anderen Methoden vorzuziehen, weshalb Modelle benötigt werden, die auch im Fahrzeugbetrieb ständig den Zustand der Brennstoffzellen überwachen können.

In den letzten Jahren wurden verschiedene Ansätze zur Modellierung von PEMFC entwickelt, welche überwiegend auf physikalisch-mathematischen Beschreibungen der Vorgänge in einer Brennstoffzelle basieren. Viele dieser theoretischen Modelle sind aufgrund der Komplexität der PEMFC rein statische Modelle, basieren auf zumindest teilweise konstanten Betriebsbedingungen oder beschreiben nur einen Teilaspekt der Brennstoffzelle [Nie09]. Der Vorteil dieser Modelle liegt in der Möglichkeit, auch innere Größen der Zelle berechnen und somit beispielsweise auf Verbesserungsmöglichkeiten im Aufbau schließen zu können. Aufgrund der noch nicht abgeschlossenen Untersuchungen über die chemisch-physikalischen Vorgänge in der Zelle sowie der

teilweise nur schwer zu identifizierenden unbekanntem Parameter ist die theoretische Modellbildung allerdings sehr aufwändig. Auch sind die resultierenden Modelle in Form von nichtlinearen partiellen Differenzialgleichungen sehr rechenintensiv und müssen durch geeignete Verfahren zunächst vereinfacht werden, um für Echtzeitanwendungen überhaupt in Frage zu kommen. Dieser als Modellreduktion bezeichnete Schritt basiert auf vereinfachenden Annahmen und Näherungen, durch die ein Teil der Genauigkeit der physikalisch motivierten Modelle wieder verloren geht.

Die Alternative stellen Modelle dar, die auf Basis von Grey-Box- und Black-Box-Verfahren gewonnen werden. Diese Verfahren erlauben keinen (Black-Box) oder nur einen beschränkten (Grey-Box) Einblick in die inneren Vorgänge eines Systems, sondern bilden das durch Messdaten der Ein- und Ausgänge beschriebene Verhalten nach. Der Aufwand hierfür kann deutlich geringer sein als bei der theoretischen Modellierung, und auch die Modelle haben oft bereits eine ähnlich einfache Form wie die theoretischen Modelle nach der Modellreduktion. Solche Ansätze sind für PEMFC-Stacks in der Literatur bisher kaum zu finden, da sie bei der mechanischen und werkstoffwissenschaftlichen Entwicklung von Brennstoffzellen selten brauchbar sind.

In dieser Arbeit stehen bei der Modellierung der PEMFC-Stacks die Nachbildung des Ein-/Ausgangsverhaltens sowie ein möglichst einfaches und wenig Rechenzeit beanspruchendes Modell, auch im Hinblick auf die Diagnose im Fahrzeug, im Vordergrund, weshalb Modelle auf Basis von Grey-Box- und Black-Box-Verfahren entwickelt und untersucht wurden. Es hat sich gezeigt, dass für den in dieser Arbeit betrachteten Betriebsbereich des PEMFC-Stacks mit vergleichsweise einfachen Modellformen bereits eine sehr gute Nachbildung des Ein-/Ausgangsverhaltens erreicht werden kann.

Der entwickelte Grey-Box-Ansatz besteht aus einem statischen Modellteil für das stationäre Verhalten und einem dynamischen Modellteil für die Abweichungen von den stationären Punkten im dynamischen Betrieb. Ausgehend von den daraus gewonnenen Ergebnissen wurde zusätzlich ein Black-Box-Ansatz gewählt, mit dem das Verhalten des nichtlinearen Stacks durch ein rein lineares, zeitinvariantes dynamisches Modell gut nachgebildet werden kann. Sowohl der dynamische Anteil des Grey-Box-Modells als auch dieser Black-Box-Ansatz wurden dabei mit Identifikationsmethoden gewonnen, die zur Klasse der sogenannten „Subspace-based State-Space System Identification“⁷ (4SID⁸) gehört. Bei dieser werden — im Gegensatz zu vielen anderen Methoden, die eine vorherige Annahme der Ordnung durch den Anwender erfordern — zunächst die Ordnung und dann die zugehörigen Matrizen eines

⁷engl. für Unterraum-basierte Systemidentifikation in Zustandsraumdarstellung. Üblicherweise wird auch in der deutschsprachigen Literatur der englische Begriff oder die ebenfalls übliche verkürzte Variante „Subspace Identification“ verwendet.

⁸In 4SID steht „4S“ anstelle von „SSSS“ für „Subspace-based State-Space System“.

Zustandsraummodells nicht-iterativ aus den Messdaten geschätzt. Die Klasse der 4SID-Methoden umfasst mehrere Algorithmen, die auf verschiedenen Herleitungen beruhen und sich darüber hinaus in ihren Eigenschaften unterscheiden. Der theoretische Schwerpunkt der Arbeit liegt daher in einer ausführlichen Analyse und einem Vergleich der in der Literatur am häufigsten zitierten Algorithmen.

Über die Simulationsmodelle hinaus kommt die 4SID in dieser Arbeit auch für zwei Ansätze zur Diagnose zum Einsatz. Diese haben das Ziel, Eingangsgrößen des Stacks, die in der automobilen Anwendung nicht messtechnisch erfassbar sind, wie beispielsweise die relativen Feuchten der Betriebsgase, mithilfe der am Stack messbaren Ein- und Ausgangsgrößen zu überwachen. Dadurch sollen relevante Abweichungen vom durch die Betriebsstrategie vorgegebenen Arbeitspunkt frühzeitig erkannt werden, um eine Schädigung des PEMFC-Stacks zu vermeiden. Der Stack dient somit in dieser Anwendung als eine Art Sensor, mit dessen messbaren Größen modellbasiert auf die messtechnisch nicht erfassbaren Eingangsgrößen geschlossen werden soll. Gelingt diese Schätzung gut, können damit nicht nur Abweichungen erkannt werden, sondern die Schätzungen direkt als Ersatz für eine Messung bei der Betriebsstrategie herangezogen werden.

Der erste in dieser Arbeit vorgeschlagene Diagnoseansatz basiert auf ein Kalman-Filter (benannt nach Rudolf Kalman⁹), dem ein lineares Black-Box-Simulationsmodell für alle Ausgangsgrößen des PEMFC-Stacks zu Grunde liegt. Dabei werden die nicht messbaren Eingangsgrößen als zusätzliche, konstant angenommene Zustandsgrößen mit dem Filter geschätzt. Die zweite untersuchte Möglichkeit zur Diagnose ist ein Modell, bei dem alle relevanten messbaren Größen des Stacks als Eingangsgrößen des Modells verwendet werden und welches als Ausgangsgrößen die zu schätzenden Größen liefert. Da alle gemessenen Größen unabhängig davon, ob sie physikalisch eine Ein- oder Ausgangsgröße darstellen, als Eingänge des Modells verwendet werden, handelt es sich dabei um eine partiell inverse Struktur, die ebenfalls mit der 4SID geschätzt wird.

Die für die Modellierung und Diagnose verwendeten Daten in dieser Arbeit stammen von einem Industriepartner. Dort wurden die Messungen nach Versuchsplänen, die im Rahmen dieser Arbeit erstellt und auf die Problemstellung abgestimmt wurden, an selbst entwickelten PEMFC-Stacks des Industriepartners aufgenommen.

Formal ist die Arbeit wie folgt gegliedert:

Zunächst wird im *Kapitel 2* ein knapper Überblick über mögliche Modellbeschreibungen für dynamische Systeme und die üblichen Identifikationsverfahren zur Ge-

⁹Rudolf Emil Kalman (ungarisch Kálmán), * 19. Mai 1930 in Budapest; Mathematiker und Systemtheoretiker; Professor an der Stanford University, der University of Florida und der Eidgenössischen Technischen Hochschule Zürich; Mitglied der amerikanischen, der ungarischen, der französischen und der russischen Akademie der Wissenschaften, der amerikanischen National Academy of Engineering sowie der American Academy of Arts and Sciences

winnung der Modellstruktur und -parameter gegeben. Daran schließt sich das umfangreiche *Kapitel 3* über die 4SID an. Neben einem Überblick über die Idee und den Ablauf der 4SID enthält es die Beschreibung und Analyse der in der neueren Literatur üblicherweise unterschiedenen drei Arten von 4SID-Algorithmen sowie einen Vergleich der sich ergebenden Eigenschaften.

Ein kurzer Überblick über die Funktionsweise von PEM-Brennstoffzellen sowie über deren systemtheoretische Betrachtung insbesondere im dynamischen Betrieb wird im *Kapitel 4* gegeben. Das *Kapitel 5* umfasst eine Übersicht über existierende Modelle für PEMFC-Stacks sowie die Beschreibung und Ergebnisse der in dieser Arbeit entwickelten Modellierungsansätze. Daran schließt sich das *Kapitel 6* mit einem Überblick über existierende Diagnoseverfahren für PEMFC-Stacks sowie den beiden neu entwickelten Verfahren und den damit erzielten Ergebnissen an.

Die wichtigsten Ergebnisse der Arbeit werden im *Kapitel 7* nochmals zusammengefasst.

Im *Anhang A* sind ergänzende Berechnungen und Beweise zur 4SID enthalten, um das Kapitel 3 übersichtlicher zu halten. Der *Anhang B* enthält die Parameter der identifizierten Modelle. Im *Anhang C* wird eine Übersicht über die betreuten Studien- und Diplomarbeiten gegeben. Eine Liste der im Rahmen dieser Dissertation entstandenen Veröffentlichungen und Tagungsbeiträge ist im *Anhang D* zu finden.

Kapitel 2

Grundlagen der Systemidentifikation

Für die Arbeit eines Regelungstechnikers sind Modelle von technischen Systemen oder Prozessen eine wichtige Grundlage. Unter einem Modell versteht man dabei ein mehr oder weniger stark abstrahiertes Abbild der in der Realität ablaufenden Vorgänge. Bei technischen Systemen sind diese Modelle in Form von mathematischen Zusammenhängen, aber auch in graphischer oder tabellarischer Form wie beispielsweise Kennlinien oder Wertetabellen üblich. Ohne Modelle sind weder die systemtheoretische Analyse noch der Entwurf von Regelungen oder Diagnosemethoden möglich. Daher gehört es zu den Kernaufgaben eines Regelungstechnik-Ingenieurs, in einem ersten Schritt ein solches Modell aufzustellen. Nicht selten nimmt diese Aufgabe sogar einen Hauptteil der benötigten Zeit ein, da mit einem geeigneten Modell des Systems beispielsweise eine Regelung leicht mit Standardverfahren entworfen werden kann.

Bei der Modellerstellung, auch Modellbildung oder Modellierung genannt, unterscheidet man grundsätzlich drei Vorgehensweisen [Gan05, Nel01, DP04, Lju99]:

White-Box-Modellierung: Bei dieser Vorgehensweise werden die im Inneren des Systems ablaufenden Vorgänge mathematisch mithilfe der geltenden Gesetzmäßigkeiten aus Mathematik, Physik, Chemie usw. beschrieben. Durch die Verkopplung dieser Gleichungen gemäß der Zusammenhänge im System erhält man ein Gesamtmodell, das die inneren Größen und Struktur des Systems abbildet. Aufgrund der Vorgehensweise wird ein so gewonnenes Systemmodell auch *theoretisches, rigoroses, physikalisch-chemisches* oder „*first principles*“-Modell genannt.

Black-Box-Modellierung: Hier wird das Modell aus Messdaten der Ein- und Ausgangsgrößen eines Systems gewonnen. Dazu werden mittels der Messdaten die Parameter einer Modellstruktur berechnet, die vorgegeben oder, falls sie nicht

bekannt ist, ggf. aus mehreren Möglichkeiten durch einen Vergleich der Ergebnisse ausgewählt wird. Das Modell bildet nur den Zusammenhang ab, der zwischen den gemessenen Ein- und Ausgangssignalen besteht. Eine weitere Deutung oder ein Rückschluss auf innere Systemgrößen ist mit diesen Modellen im Allgemeinen nicht möglich.

Grey-Box-Modellierung: Diese Form stellt eine Mischung der beiden vorangegangenen Ansätze dar. Hierbei werden Teile durch theoretische Ansätze beschrieben, der Rest durch Black-Box-Ansätze. So kann beispielsweise aus physikalischen Überlegungen die Struktur der Verschaltung von Teilmodellen stammen, welche jeweils als Black-Box-Modelle vorliegen. Dadurch ist, abhängig vom Anteil der theoretisch gewonnenen Modellteile, eine teilweise Interpretation möglich.

Bei der White-Box-Modellierung werden meistens vereinfachende Annahmen wie konzentrierte Parameter oder starre Körper getroffen (vgl. z. B. [Sch07]). Durch diese Annahmen können die in den Gleichungen vorkommenden Parameter nicht so aus theoretischen Überlegungen ermittelt werden, dass das Verhalten des Modells exakt mit der Realität (ausgedehnter Körper, Elastizität) übereinstimmt. Daher werden diese Parameter häufig durch *Identifikation* aus Messdaten gewonnen, d. h. auf Basis der Messdaten werden die Parameter so bestimmt, dass die Messungen bezogen auf ein Gütemaß optimal durch das Modell dargestellt werden können. Diese Vorgehensweise wird im Folgenden als *Parameteridentifikation* bezeichnet. Auch vernachlässigte Effekte wie z. B. Reibung in mechanischen Systemen werden durch diese Methode implizit im Modell berücksichtigt. Streng genommen liegt damit kein White-Box-Modell, sondern bereits ein Grey-Box-Modell vor [Lju99], auch wenn in der Literatur diese Abgrenzung nicht immer so klar vorgenommen wird.

Die Black-Box-Modellierung wird auch als Black-Box-Identifikation bezeichnet, da hierbei die Parameter einer (zuvor zu wählenden) Modellstruktur aus Messdaten gewonnen werden. Diese Black-Box-Identifikation oder eine Grey-Box-Modellierung sind üblicherweise gemeint, wenn in der Literatur der Begriff *Systemidentifikation* verwendet wird (z. B. [SS89, Lju99, DP04]). Seltener (vgl. beispielsweise [Sch07]) ist mit Systemidentifikation die oben beschriebene reine Bestimmung von Parametern eines Grey-Box-Modells gemeint, die in dieser Arbeit zur klareren Abgrenzung als Parameteridentifikation bezeichnet wird.

Beim Vergleich von Simulationsergebnissen des Modells mit Messdaten treten nicht nur Abweichungen durch Vereinfachungen im Modell auf, sondern auch durch Effekte wie Rauschen, das im System oder bei Messungen auftritt. Diese Effekte können durch stochastische Komponenten im Modell berücksichtigt werden. In der Literatur wird bei den Parameterschätzverfahren häufig die Annahme getroffen, dass die auftretenden stochastischen Prozesse ergodische (und damit auch stationäre) nor-

malverteilte Prozesse sind, die unabhängig und identisch verteilt sind. Diese Annahme gilt auch in dieser Arbeit für alle stochastischen Größen, solange keine anderen Annahmen explizit genannt sind.

Auch alle auftretende Zufallsvariablen werden, wenn nicht anders angegeben, stets als unabhängig und identisch normalverteilt angenommen. Alle rein stochastischen Größen, wie beispielsweise das Messrauschen, werden mit griechischen Buchstaben bezeichnet. Größen, die sowohl einen deterministischen als auch einen stochastischen Anteil haben, werden wie die rein deterministischen Größen mit lateinischen Buchstaben bezeichnet.

Allen drei oben eingeführten Vorgehensweisen zur Modellierung ist gemein, dass man als Ergebnis eine Beschreibung des Systemverhaltens bekommt. Dafür kommen verschiedene Modellformen in Betracht, von denen die wichtigsten Vertreter im Abschnitt 2.1 in einem kurzen Überblick vorgestellt werden. Da im Rahmen dieser Arbeit aufgrund der Komplexität des PEMFC-Stacks (vgl. Kapitel 1 und 5) reine Black-Box-Modelle sowie aus Black-Box-Modellen zusammengesetzte Grey-Box-Modelle betrachtet werden, spielen Identifikationsverfahren eine wichtige Rolle. Im Abschnitt 2.2 wird daher ein kurzer Überblick über die gebräuchlichsten Verfahren zur Parameter- und Systemidentifikation dynamischer Systeme gegeben. Die in dieser Arbeit hauptsächlich verwendete spezielle Black-Box-Identifikationsmethode 4SID wird ausführlich im sich anschließenden Kapitel 3 beschrieben.

2.1 Modellformen zur Beschreibung statischer und dynamischer Systeme

Bei der Beschreibung von Systemen können diese zunächst in Abhängigkeit der Anzahl ihrer Ein- und Ausgangsgrößen aufgeteilt werden. Ein sehr häufig betrachteter Fall sind Systeme mit nur einer Ein- und einer Ausgangsgröße (SISO-Systeme¹), der auch als *Eingrößenfall* bezeichnet wird. Im Gegensatz dazu steht der allgemeine *Mehrgrößenfall* (MIMO²), bei dem jeweils mehr als eine Ein- und Ausgangsgröße existieren. Der Mehrgrößenfall beinhaltet SISO-Systeme als Spezialfall ebenso wie die Mischformen SIMO und MISO.

Zusätzlich werden Systeme nach ihren Eigenschaften in Kategorien unterteilt [Föl07, Möl07, Mün06, Bos04, SS89], wie beispielsweise

- *statisch* oder *dynamisch*,
- *linear* oder *nichtlinear*,

¹SISO steht für „single input, single output“ (engl. für einzelner Eingang, einzelner Ausgang).

²MIMO steht für „multiple input, multiple output“ (engl. für mehrere Eingänge, mehrere Ausgänge).

- *zeitinvariant* oder *zeitvariant*,
- *zeitgetrieben* oder *ereignisgetrieben*.

Entsprechend dieser Kategorien existieren verschiedene Formen von Modellen für die Systeme. Bei den dynamischen Systemen sind lineare, zeitinvariante Systeme (LTI-Systeme³) die am häufigsten betrachtete Klasse, da dafür sehr viele Analyse- und Entwurfsmethoden zur Verfügung stehen. Häufig besitzen dabei die tatsächlichen Systeme diese Eigenschaften nur näherungsweise, beispielsweise unter Vernachlässigung von Reibung oder durch Beschränkung auf einen bestimmten Gültigkeitsbereich des Modells.

Im Folgenden wird ein kurzer Überblick über verschiedene Beschreibungsformen von Systemen gegeben. Dieser ist nicht vollständig und beschränkt sich auf die in dieser Arbeit benötigten statischen und zeitgetriebenen dynamischen Systeme. Zeitvariante Systeme, die als Spezialfall nichtlinearer Systeme aufgefasst werden können, werden in dieser Arbeit nicht betrachtet. Ebenso werden keine autonomen Systeme oder Systeme mit Totzeit benötigt. Modelle für die hier nicht betrachteten Systemklassen sowie zusätzliche Beschreibungsformen für die im Folgenden beschriebenen Systeme können beispielsweise [Lun08a, Lun08b, Gan05, Nel01, Lju99, SS89] entnommen werden.

Für die folgenden Definitionen und Erläuterungen gilt stets, dass die Eingänge $\mathbf{u} \in \mathcal{U} \subseteq \mathbb{R}^p$ des Systems bekannt sind. Die als messbar vorausgesetzten Ausgänge werden mit $\mathbf{y} \in \mathcal{Y} \subseteq \mathbb{R}^q$ bezeichnet. Dabei wird davon ausgegangen, dass alle auftretenden Eingangsgrößen das System auf unterschiedliche Weise beeinflussen und alle Ausgangsgrößen unterschiedliche Informationen über das System enthalten [Lun08b]. Anders ausgedrückt bedeutet dies, dass keine der Eingangsgrößen als Linearkombination der übrigen Eingangsgrößen geschrieben werden kann, analog gilt dasselbe für die Ausgangsgrößen. Für die auftretenden Rauschprozesse wird in diesem Abschnitt zusätzlich die Mittelwertfreiheit vorausgesetzt. Der Vektor des Messrauschens wird mit $\boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^q$ bezeichnet und hat dieselbe Dimension wie der Vektor der Ausgangsgrößen. Alle auftretenden Rauschprozesse seien paarweise unkorreliert.

2.1.1 Statische Systeme

Die einfachste Modellbeschreibung erhält man für lineare statische Systeme:

Definition 2.1 (lineares statisches System):

Ein lineares statisches System lässt sich durch ein Modell der Form

$$\mathbf{y} = \mathbf{D} \mathbf{u} + \boldsymbol{\xi} \tag{2.1}$$

³LTI steht für „linear time-invariant“ (engl. für linear zeitinvariant).

beschreiben. Die Matrix $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{q \times p}$ stellt dabei die lineare Abbildung der Eingangsgrößen auf die Ausgangsgrößen dar.

Teilweise wird in der Literatur ein Modell bzw. System auch dann noch als linear bezeichnet, wenn auf der rechten Seite der Gleichung (2.1) zusätzlich ein konstanter (deterministischer) Summand \mathbf{d} auftritt. Genau genommen handelt es sich dann aber um ein *affines System*, das jedoch leicht durch eine Koordinatentransformation in ein lineares System überführt werden kann.

Analog zur obigen Definition für ein lineares System gilt für einen nichtlinearen statischen Zusammenhang die folgende Definition:

Definition 2.2 (nichtlineares statisches System):

Ein nichtlineares statisches System lässt sich durch ein Modell der Form

$$\mathbf{y} = \mathbf{g}(\mathbf{u}) + \boldsymbol{\xi} \quad (2.2)$$

beschreiben. Die q -dimensionale vektorielle Funktion $\mathbf{g}(\cdot)$ stellt dabei die nichtlineare Abbildungsvorschrift der Eingangsgrößen auf die Ausgangsgrößen dar.

Besonders bei graphischer Darstellung wird der nichtlineare Zusammenhang $\mathbf{g}(\cdot)$ zwischen den Ein- und Ausgangsgrößen auch *Kennlinienfeld* oder kurz *Kennfeld* genannt, im Spezialfall für jeweils eine Ein- und Ausgangsgröße auch *Kennlinie*.

Die wahre nichtlineare Abbildung kann ohne zusätzliches Wissen über die nichtlineare Systemfunktion und wegen des Messrauschens nicht exakt aus Messdaten gewonnen werden, weshalb hier häufig Approximationen mittels ausgewählter analytischer Funktionen bzw. einer Funktionenbasis verwendet werden (vgl. z. B. [KKE01, Str04]), deren Parameter dann mit Schätzverfahren (vgl. Abschnitt 2.2) bestimmt werden.

Häufig verwendete Approximationsmethoden sind die stückweise lineare Interpolation, bei der die Bereiche zwischen Messwerten durch ein lineares (oder affines) Modell angenähert werden. Auch Polynome können über den gesamten Bereich oder stückweise zur Approximation bzw. Interpolation verwendet werden. Häufig verwendet man bei der stückweisen Polynom-Interpolation die sogenannten *Splines*:

Definition 2.3 (Spline):

Unter einem Spline n -ter Ordnung versteht man eine Funktion, die stückweise aus Polynomen n -ter Ordnung zusammengesetzt ist. Für die Nahtstellen werden dabei zusätzliche Bedingungen gestellt. Meist wird gefordert, dass der Funktionswert und die ersten $n - 1$ Ableitungen stetig sein müssen.

Häufig werden kubische Splines, also Splines dritter Ordnung verwendet, da dadurch die meisten Krümmungen bereits gut nachgebildet werden und die Komple-

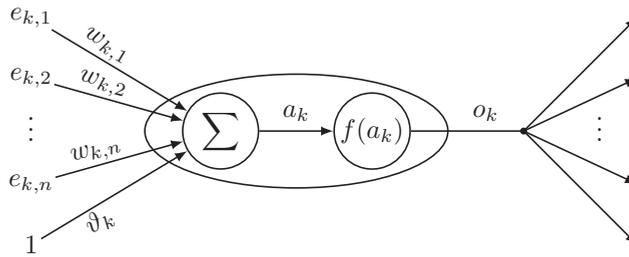


Abbildung 2.1: Neuron k mit dem Schwellwert ϑ_k , den Gewichten $w_{k,i}$, der Aktivierung a_k sowie den Eingängen $e_{k,i}$ und dem Ausgang o_k

xität noch nicht zu hoch ist. Näheres zur Splines und deren Verwendung kann beispielsweise [Boo01, BHS93] entnommen werden. Nähere Informationen zu weiteren Approximations- und Interpolationsverfahren finden sich z. B. in [Gan05, Sto02].

Ein spezielles Modell zur Approximation einer nichtlinearen Funktion stellt ein *künstliches neuronales Netz* dar:

Definition 2.4 (künstliches neuronales Netz):

Ein künstliches neuronales Netz (KNN) ist eine vernetzte Struktur von sogenannten Neuronen (siehe Abbildung 2.1). Neben den Parametern Gewichte, Schwellwert und Aktivierungsfunktion eines jeden Neurons sind auch die Vernetzungsstruktur sowie die Anzahl der Neuronen Parameter des gesamten Netzes.

Die am häufigsten verwendeten Netzstrukturen bei den KNN sind die *Radial-Basis-funktionen-Netzwerke (RBFN)* und das *mehrlagige Perzeptron⁴ (MLP)*, wobei häufig in der Literatur sogar KNN mit MLP gleichgesetzt wird [Nel01]. Ein Perzeptron⁵ ist ein einfach strukturiertes, vorwärts gerichtetes KNN [Ros58, MP90, BH94], das beim MLP durch mindestens eine zusätzliche Schicht erweitert wird:

Definition 2.5 (mehrlagiges Perzeptron):

Ein mehrlagiges Perzeptron (MLP) ist ein KNN, bei dem zwischen einer Eingangsschicht, die der reinen Verteilung der Eingangsgrößen dient und selbst keine Verarbeitung der Signale durchführt, und einer Ausgangsschicht, die zur Berechnung der Ausgangsgrößen dient, eine oder mehrere verdeckte Schichten von Neuronen (auch Zwischenschichten genannt) liegen. Dabei werden als Eingänge jedes Neurons der verdeckten Schicht(en) und der Ausgangsschicht die Ausgänge der Neuronen der vorhergehenden Schicht verwendet („feed-forward“-Struktur⁶).

⁴Häufig findet man auch die englische Bezeichnung „multi-layer perceptron“ in der Literatur.

⁵von engl. „perception“ für Wahrnehmung

⁶engl. für vorwärts gerichtete Struktur

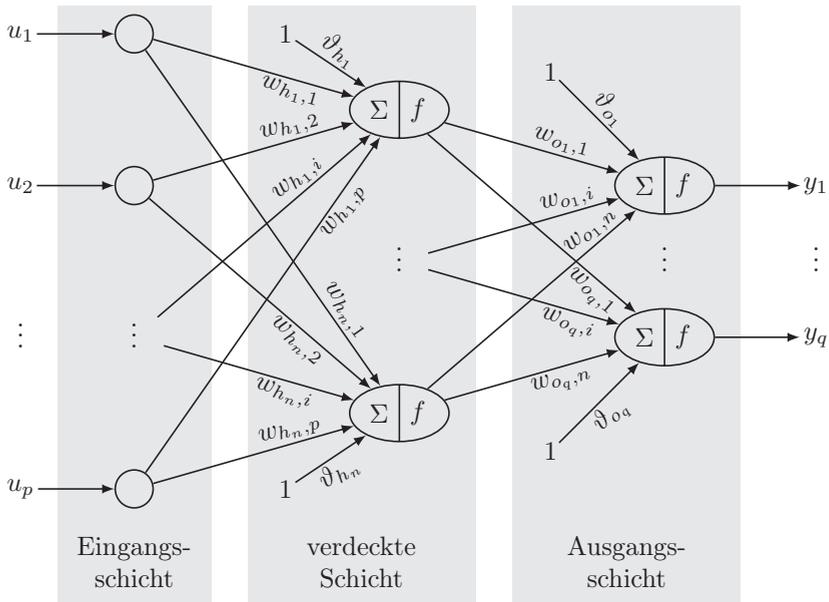


Abbildung 2.2: Struktur eines mehrlagigen Perzeptrons (MLP) mit einer verdeckten Schicht

Übliche Aktivierungsfunktionen beim MLP sind aufgrund ihrer Differenzierbarkeit sigmoidale Funktionen wie der hyperbolische Tangens

$$f(x) = \tanh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} \quad (2.3)$$

und die häufig auch unter dem Namen „Sigmoidfunktion“ gebrauchte logistische Funktion

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}. \quad (2.4)$$

Weitere Aktivierungsfunktionen sind beispielsweise treppenförmige, lineare oder semi-lineare (lineare und begrenzte) Funktionen, die jedoch alle nicht oder nicht beliebig oft differenzierbar sind und daher bei der Parameteranpassung, dem sogenannten Training, Probleme bereiten können (vgl. auch [BH94, Nel01]). Für das Training kommen üblicherweise numerische Verfahren zur nichtlinearen Parameterschätzung zum Einsatz, wie sie im Abschnitt 2.2.3 kurz vorgestellt werden.

Die Struktur eines MLP mit einer verdeckten Schicht ist in der Abbildung 2.2 dargestellt. Es lässt sich zeigen, dass eine verdeckte Schicht im MLP zur Approximation einer beliebigen Funktion ausreicht, solange diese Borel-messbar ist [HSW89]. Häufig

wird mit MLP daher auch ein Netz mit genau einer verdeckten Schicht bezeichnet [BH94, Nel01]. Auch die Ausprägung der Ausgangsschicht als Perzeptron mit nicht-linearer Aktivierungsfunktion oder als reine Linearkombination der Ausgaben der letzten verdeckten Schicht variiert in der Literatur.

Näheres zu Radial-Basisfunktionen-Netzwerken, welche in dieser Arbeit keine Verwendung finden, kann beispielsweise in [Nel01, Str04] nachgelesen werden.

Eine weitere, besonders einfache Möglichkeit zur Darstellung des nichtlinearen Zusammenhangs (2.2) stellt eine Nachschlagetabelle dar:

Definition 2.6 (Nachschlagetabelle):

Eine Nachschlagetabelle besteht aus einer Datenmatrix, die für (möglichst viele) Kombinationen der Eingangsgrößen die zugehörigen Ausgangsgrößen der nichtlinearen statischen Abbildung enthält, sowie einer Vorschrift, wie die Ausgangsgrößen zu bestimmen sind, wenn die Eingangsgrößenwerte nicht exakt in der Tabelle zu finden sind.

Die Vorschrift zur Bestimmung der Ausgangswerte kann beispielsweise die Methode des nächsten Nachbarn sein, bei welcher der — bezogen auf ein Abstandsmaß — am nächsten zum gesuchten Datenpunkt liegende Tabelleneintrag gewählt wird, oder eine (meist einfache) Interpolationsvorschrift, mithilfe welcher aus den benachbarten Tabellenpunkten der gesuchte Wert berechnet wird. Hierbei sind die lineare, die kubische und die Spline-Interpolation (siehe z. B. [Gan05, Sto02]) häufige Vertreter. Dabei wird mit den vorhandenen benachbarten Punkten in der Nachschlagetabelle ein entsprechendes lokal gültiges Modell geschätzt, welches dann an der gesuchten Stelle ausgewertet wird.

Einen wichtigen Spezialfall eines statischen nichtlinearen Systems nach der Definition 2.2 erhält man mit der Forderung, dass alle unbekannt Parameter linear in die Modellgleichung eingehen:

Definition 2.7 (nichtlineares statisches System, linear in Parametern):

Ein nichtlineares statisches System, das linear in den Parametern ist, lässt sich durch ein Modell der Form

$$\mathbf{y} = \mathbf{P} \mathbf{g}(\mathbf{u}) + \boldsymbol{\xi} \tag{2.5}$$

beschreiben. Die p_g -dimensionale vektorielle Funktion $\mathbf{g}(\cdot)$ stellt dabei die nichtlineare Abbildungsvorschrift der Eingangsgrößen dar, die bekannt sein muss. Die unbekannt Parameter der Abbildungsvorschrift werden durch die Matrix $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{q \times p_g}$ repräsentiert, die linear in die Abbildungsvorschrift eingeht.

Das lineare statische Modell aus der Definition 2.1 ist wiederum ein Spezialfall der eben vorgestellten Modellform, bei dem $\mathbf{g}(\mathbf{u}) = \mathbf{u}$ und $p_g = p$ gilt.

2.1.2 Lineare dynamische Systeme

Bei den dynamischen Systemen wird ebenfalls zwischen linearen und nichtlinearen Prozessen unterschieden. Für beide Fälle existieren die verschiedensten Modellformen (z. B. [Föl94, Lju99, Nel01]). Zusätzlich unterscheidet man dabei *zeitkontinuierliche* und *zeitdiskrete* Beschreibungen von Systemen. Zeitkontinuierliche Modelle beschreiben das System zu jedem beliebigen Zeitpunkt. Bei zeitdiskreten Modellen wird üblicherweise eine feste Abtastzeit T_A vorausgesetzt, wobei die Modelle dann das Systemverhalten nur zu den Zeitpunkten kT_A ($k \in \mathbb{Z}$) beschreiben. Diese Modelle haben besonders in Anwendungen mit (Mikro-)Rechnern einen Vorteil, wenn beispielsweise zu äquidistanten Zeitpunkten Messwerte aufgenommen und dann verarbeitet werden müssen. Dabei ist im Folgenden bei den System- und Modelldefinitionen zu beachten, dass trotz identischer Benennung der Parameter im zeitkontinuierlichen und zeitdiskreten Fall diese bei der Beschreibung ein und desselben Systems nicht identisch sind.

Die Dynamik des Systems beruht auf der Tatsache, dass die Ausgänge nicht nur von den Eingangsgrößen, sondern auch von den Ableitungen der Ausgangs- und Eingangsgrößen abhängen. Für den linearen Fall ergibt sich die folgende Definition:

Definition 2.8 (zeitkontinuierliches lineares dynamisches System):

Ein lineares dynamisches System wird durch ein lineares Differenzialgleichungssystem der Form

$$\mathbf{y}(t) = - \sum_{i=1}^n \mathbf{A}_i \frac{d^i}{dt^i} \mathbf{y}(t) + \sum_{i=0}^m \mathbf{B}_i \frac{d^i}{dt^i} \mathbf{u}(t) + \sum_{i=0}^l \mathbf{C}_i \frac{d^i}{dt^i} \mathbf{z}(t) + \sum_{i=0}^o \mathbf{D}_i \frac{d^i}{dt^i} \boldsymbol{\xi}(t) \quad (2.6)$$

beschrieben. Die Matrizen $\mathbf{A}_i \in \mathbb{R}^{q \times q}$, $\mathbf{B}_i \in \mathbb{R}^{q \times p}$, $\mathbf{C}_i \in \mathbb{R}^{q \times r}$ und $\mathbf{D}_i \in \mathbb{R}^{q \times q}$ stellen dabei die Parameter der Differenzialgleichungen dar, die höchste auftretende Ableitung der Ausgangsgröße n wird auch als Ordnung des Systems bezeichnet. Bei technischen Systemen gilt dabei stets $m \leq n$. Die Größe $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^r$ repräsentiert unbekannte (nicht messbare) deterministische oder stochastische Störungen (z. B. Systemrauschen), die über die Parameter \mathbf{C}_i in die Differenzialgleichung eingehen und zusätzlich zum Messrauschen auftreten können. Außerdem wird $l \leq n$ und $o \leq n$ angenommen.

Der (theoretische) Fall $m > n$ beschreibt Systeme mit einem rein differenzierenden Anteil, die technisch nicht realisierbar sind und daher im Folgenden nicht weiter betrachtet werden. Entsprechend gilt dies auch für die Anteile der Störgröße und des Rauschens für $l > n$ bzw. $o > n$. Für den Fall $m = n$ spricht man auch von einem System mit Durchgriff oder einem sprungfähigen System [Lun08a], da dann die Eingangsgrößen einen direkten Einfluss auf die Ausgangsgrößen haben und Sprünge in Eingangsgrößen auch direkt als Sprünge in Ausgangsgrößen sichtbar werden. Bei

sehr vielen technischen Systemen ist das nicht der Fall, sodass sich häufig auf den Fall $m < n$ beschränkt wird.

Betrachtet man ein lineares dynamisches System nur zu äquidistanten Zeitpunkten $t = kT_A$, kann man das System durch Differenzgleichungen beschreiben, wobei anstelle der Ableitungen entsprechend die Werte zu vergangenen Zeitpunkten mit in die Berechnung der aktuellen Ausgangsgrößen einfließen:

Definition 2.9 (zeitdiskretes lineares dynamisches System):

Ein lineares dynamisches System wird zu den äquidistanten Zeitpunkten $t = kT_A$, $k \in \mathbb{Z}$ durch ein Differenzgleichungssystem der Form

$$\begin{aligned} \mathbf{y}(kT_A) = & - \sum_{i=1}^n \mathbf{A}_i \mathbf{y}((k-i)T_A) + \sum_{i=0}^m \mathbf{B}_i \mathbf{u}((k-i)T_A) \\ & + \sum_{i=0}^l \mathbf{C}_i \mathbf{z}((k-i)T_A) + \sum_{i=0}^o \mathbf{D}_i \boldsymbol{\xi}((k-i)T_A) \end{aligned} \quad (2.7)$$

beschrieben. Die Matrizen $\mathbf{A}_i \in \mathbb{R}^{q \times q}$, $\mathbf{B}_i \in \mathbb{R}^{q \times p}$, $\mathbf{C}_i \in \mathbb{R}^{q \times r}$ und $\mathbf{D}_i \in \mathbb{R}^{q \times q}$ stellen dabei die Parameter der Differenzgleichungen dar. Hier stellt die höchste auftretende Verzögerung der Ausgangsgröße n die Ordnung des Systems dar und es gilt bei technischen Systemen ebenso $m \leq n$. Wie im zeitkontinuierlichen Fall repräsentiert die Größe $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^r$ unbekannte (nicht messbare) deterministische oder stochastische Störungen (z. B. Systemrauschen), die über die Parameter \mathbf{C}_i in die Differenzgleichung eingehen und zusätzlich zum Messrauschen auftreten können. Auch hier wird $l \leq n$ und $o \leq n$ angenommen.

Im zeitdiskreten Fall liegt ein System mit Durchgriff vor, wenn für den Parameter $\mathbf{B}_0 \neq \mathbf{0}$ gilt. Häufig wird anstelle der hier gewählten Schreibweise $\mathbf{y}(kT_A)$ kurz $\mathbf{y}(k)$ oder \mathbf{y}_k geschrieben. Selbst die Schreibweise $\mathbf{y}(t)$ wird in der Literatur immer wieder auch bei zeitdiskreten Modellen verwendet, was dann zu Ausdrücken wie beispielsweise $\mathbf{y}(t-1)$ führt. In dieser Arbeit bezeichnet t stets die kontinuierlich betrachtete Zeit, für die Zeitpunkte kT_A wird auch die abkürzende Schreibweise k gewählt, also z. B. $\mathbf{y}(k) := \mathbf{y}(kT_A)$. Für alle anderen zeitabhängigen Größen gilt diese Nomenklatur entsprechend.

Neben der direkten Beschreibung des Systems durch das jeweilige Differenzial- bzw. Differenzgleichungssystem existieren, besonders für den linearen Fall, eine Vielzahl von weiteren Beschreibungsmöglichkeiten. Zwei sehr häufig verwendete Formen sind dabei Übertragungsfunktionen und die Zustandsraumdarstellung, die — mit Ausnahme weniger, hier nicht betrachteter Spezialfälle — ineinander umgerechnet werden können [Föl93, Föl94, Lun08a, Lun08b]. Für diese beiden Darstellungen gilt für die Parameter in den Differenzial- bzw. Differenzgleichungen der Definitionen

2.8 und 2.9 der Zusammenhang

$$\mathbf{D}_0 = \mathbf{I} \quad \text{und} \quad \mathbf{D}_i = \mathbf{A}_i \quad \forall i = 1, \dots, o = n. \quad (2.8)$$

Diese Annahme bedeutet, dass das Messrauschen ξ nur direkt auf die Ausgangsgröße \mathbf{y} und nicht zusätzlich auf deren Ableitungen wirkt.

Übertragungsfunktionen stellen den Systemzusammenhang zwischen Ein- und Ausgängen nicht im Zeit-, sondern in einem Bildbereich dar:

Definition 2.10 (zeitkontinuierliche Übertragungsfunktion):

Das Verhalten eines LTI-Systems nach der Definition 2.8 lässt sich unter Voraussetzung der Bedingung (2.8) mithilfe der Laplace-Transformation \mathfrak{L} durch die Gleichung

$$\mathbf{y}(t) = \mathbf{G}(t) * \mathbf{u}(t) + \mathbf{H}(t) * \mathbf{z}(t) + \xi(t) \quad (2.9a)$$

\mathfrak{L}

$$\mathbf{y}_{\mathfrak{L}}(s) = \mathbf{G}_{\mathfrak{L}}(s) \mathbf{u}_{\mathfrak{L}}(s) + \mathbf{H}_{\mathfrak{L}}(s) \mathbf{z}_{\mathfrak{L}}(s) + \xi_{\mathfrak{L}}(s) \quad (2.9b)$$

beschreiben. Dabei stellen $\mathbf{y}_{\mathfrak{L}}(s)$, $\mathbf{u}_{\mathfrak{L}}(s)$, $\mathbf{z}_{\mathfrak{L}}(s)$ und $\xi_{\mathfrak{L}}(s)$ die Ausgangs-, Eingangs- und Störsignale sowie das Messrauschen im Laplace-Bereich (Laplace-Variable s , vgl. [Föl07]) dar. Die Größe $\mathbf{G}_{\mathfrak{L}}(s)$ ist die Matrix-Übertragungsfunktion und damit die Laplace-Transformierte der Impulsantwort-Matrix $\mathbf{G}(t)$, die Matrix $\mathbf{H}_{\mathfrak{L}}(s)$ repräsentiert die Störübertragungsfunktion und Laplace-Transformierte von $\mathbf{H}(t)$. Der Operator „*“ bezeichnet die Faltung.

Definition 2.11 (zeitdiskrete Übertragungsfunktion):

Das Verhalten zu den Zeitpunkten $t = kT_A$, $k \in \mathbb{Z}$ eines LTI-Systems nach der Definition 2.9 lässt sich unter Voraussetzung der Bedingung (2.8) mithilfe der z -Transformation \mathfrak{z} durch die Gleichung

$$\mathbf{y}(k) = \mathbf{G}(k) * \mathbf{u}(k) + \mathbf{H}(k) * \mathbf{z}(k) + \xi(k) \quad (2.10a)$$

\mathfrak{z}

$$\mathbf{y}_{\mathfrak{z}}(z) = \mathbf{G}_{\mathfrak{z}}(z) \mathbf{u}_{\mathfrak{z}}(z) + \mathbf{H}_{\mathfrak{z}}(z) \mathbf{z}_{\mathfrak{z}}(z) + \xi_{\mathfrak{z}}(z) \quad (2.10b)$$

beschreiben. Dabei stellen $\mathbf{y}_{\mathfrak{z}}(z)$, $\mathbf{u}_{\mathfrak{z}}(z)$, $\mathbf{z}_{\mathfrak{z}}(z)$ und $\xi_{\mathfrak{z}}(z)$ die Ausgangs-, Eingangs- und Störsignale sowie das Messrauschen im z -Bereich (mit $z = e^{sT_A}$, vgl. [Föl07]) dar. Analog zum kontinuierlichen Fall mit der Laplace-Transformation repräsentieren $\mathbf{G}_{\mathfrak{z}}(z)$ die (diskrete) Matrix-Übertragungsfunktion im z -Bereich und damit die z -Transformierte der diskreten Impulsfolgen-Matrix $\mathbf{G}(k)$ sowie $\mathbf{H}_{\mathfrak{z}}(z)$ die diskrete Störübertragungsfunktion und z -Transformierte von $\mathbf{H}(k)$. Hier stellt der Operator „*“ die diskrete Faltung dar.

Die Koeffizienten der einzelnen rationalen Übertragungsfunktionen, also die Koeffizienten der Elemente von $\mathbf{G}_{\mathcal{L}}(s)$ und $\mathbf{H}_{\mathcal{L}}(s)$ bzw. $\mathbf{G}_{\mathfrak{z}}(z)$ und $\mathbf{H}_{\mathfrak{z}}(z)$, lassen sich aus den Koeffizienten der einzelnen linearen Differenzialgleichungen (2.6) bzw. Differenzengleichungen (2.7) des Systems berechnen. Dazu werden zunächst die Größen

$$\mathbf{A}_{\mathcal{L}}(s) = \mathbf{I} + \mathbf{A}_1 s + \dots + \mathbf{A}_n s^n, \quad (2.11a)$$

$$\mathbf{B}_{\mathcal{L}}(s) = \mathbf{B}_0 + \mathbf{B}_1 s + \dots + \mathbf{B}_m s^m, \quad (2.11b)$$

$$\mathbf{C}_{\mathcal{L}}(s) = \mathbf{C}_0 + \mathbf{C}_1 s + \dots + \mathbf{C}_l s^l \quad (2.11c)$$

bzw. für die zeitdiskrete Betrachtung die Größen

$$\mathbf{A}_{\mathfrak{z}}(z) = \mathbf{I} + \mathbf{A}_1 z^{-1} + \dots + \mathbf{A}_n z^{-n}, \quad (2.12a)$$

$$\mathbf{B}_{\mathfrak{z}}(z) = \mathbf{B}_0 + \mathbf{B}_1 z^{-1} + \dots + \mathbf{B}_m z^{-m}, \quad (2.12b)$$

$$\mathbf{C}_{\mathfrak{z}}(z) = \mathbf{C}_0 + \mathbf{C}_1 z^{-1} + \dots + \mathbf{C}_l z^{-l} \quad (2.12c)$$

definiert, wobei die einzelnen Matrizen \mathbf{A}_i , \mathbf{B}_i und \mathbf{C}_i die Matrizen aus den ursprünglichen Differenzial- bzw. Differenzengleichungen sind. Mit diesen Matrixpolynomen lassen sich die Matrix-Übertragungsfunktionen schreiben als

$$\mathbf{G}_{\mathcal{L}}(s) = (\mathbf{A}_{\mathcal{L}}(s))^{-1} \mathbf{B}_{\mathcal{L}}(s) \quad \text{und} \quad (2.13a)$$

$$\mathbf{H}_{\mathcal{L}}(s) = (\mathbf{A}_{\mathcal{L}}(s))^{-1} \mathbf{C}_{\mathcal{L}}(s) \quad (2.13b)$$

bzw.

$$\mathbf{G}_{\mathfrak{z}}(z) = (\mathbf{A}_{\mathfrak{z}}(z))^{-1} \mathbf{B}_{\mathfrak{z}}(z) \quad \text{und} \quad (2.14a)$$

$$\mathbf{H}_{\mathfrak{z}}(z) = (\mathbf{A}_{\mathfrak{z}}(z))^{-1} \mathbf{C}_{\mathfrak{z}}(z). \quad (2.14b)$$

Im Gegensatz zu den Übertragungsfunktionen wird bei der Zustandsraumdarstellung das System weiterhin im Zeitbereich beschrieben. Allerdings werden dabei die Differenzial- bzw. Differenzengleichungen durch geeignet definierte Zwischengrößen, den sogenannten *Zuständen* so umgeformt, dass sich das ursprüngliche Gleichungssystem durch Differenzial- bzw. Differenzengleichungen erster Ordnung in diesen Zuständen darstellen lässt:

Definition 2.12 (zeitkontinuierliches lineares Zustandsraummodell):

Ein zeitkontinuierliches Zustandsraummodell eines LTI-Systems nach Definition 2.8 ist unter Voraussetzung der Bedingung (2.8) gegeben durch die Gleichungen

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{A} \mathbf{x}(t) + \mathbf{B} \mathbf{u}(t) + \mathbf{E} \mathbf{z}(t), \quad (2.15a)$$

$$\mathbf{y}(t) = \mathbf{C} \mathbf{x}(t) + \mathbf{D} \mathbf{u}(t) + \mathbf{F} \mathbf{z}(t) + \boldsymbol{\xi}(t). \quad (2.15b)$$

Dabei ist $\mathbf{x}(t) \in \mathbb{R}^n$ der Vektor der Zustandsgrößen zur Zeit t , $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ die System- oder Dynamikmatrix, $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times p}$ die Eingangsmatrix, $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{q \times n}$ die Ausgangsmatrix und $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{q \times p}$ die Durchgriffs- oder Durchgangsmatrix. Die Dimension des Zustandsvektors n entspricht der Ordnung des Systems. Die Matrizen $\mathbf{E} \in \mathbb{R}^{n \times r}$ bzw. $\mathbf{F} \in \mathbb{R}^{q \times r}$ beschreiben den Einfluss der unbekanntenen Störgröße $\mathbf{z}(t) \in \mathbb{R}^r$ auf die Zustände bzw. die Ausgänge des Systems.

Definition 2.13 (zeitdiskretes lineares Zustandsraummodell):

Ein zeitdiskretes Zustandsraummodell eines LTI-Systems nach Definition 2.9 ist unter Voraussetzung der Bedingung (2.8) gegeben durch die Gleichungen

$$\mathbf{x}(k+1) = \mathbf{A} \mathbf{x}(k) + \mathbf{B} \mathbf{u}(k) + \mathbf{E} \mathbf{z}(k), \quad (2.16a)$$

$$\mathbf{y}(k) = \mathbf{C} \mathbf{x}(k) + \mathbf{D} \mathbf{u}(k) + \mathbf{F} \mathbf{z}(k) + \boldsymbol{\xi}(k). \quad (2.16b)$$

Dabei ist $\mathbf{x}(k) \in \mathbb{R}^n$ der Vektor der (diskreten) Zustandsgrößen zum Zeitpunkt kT_A , $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ die (diskrete) System- oder Dynamikmatrix (auch Transitionsmatrix genannt), $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times p}$ die (diskrete) Eingangsmatrix, $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{q \times n}$ die (diskrete) Ausgangsmatrix und $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{q \times p}$ die Durchgriffs- oder Durchgangsmatrix⁷. Die Dimension des Zustandsvektors n entspricht der Systemordnung. Die Matrizen $\mathbf{E} \in \mathbb{R}^{n \times r}$ bzw. $\mathbf{F} \in \mathbb{R}^{q \times r}$ beschreiben wie im zeitkontinuierlichen Fall den Einfluss der unbekanntenen Störgröße $\mathbf{z}(k) \in \mathbb{R}^r$ auf die Zustände bzw. die Ausgänge des Systems.

Die Zustände sind innere Größen des Systems und nicht eindeutig definiert. Für jedes System existieren unendlich viele Zustandsraumbeschreibungen derselben Ordnung, die aus einem gültigen Zustandsraummodell mithilfe einer beliebigen Ähnlichkeitstransformation mit einer regulären und linearen Transformationsmatrix gewonnen werden können (Isomorphismus) [Föl94, Föl93, Lun08a, Lun08b, See09]. Die Parametermatrizen der Zustandsraumgleichungen können aus den Parametern der Differenzial- bzw. Differenzengleichungen oder den Übertragungsfunktionen nur dann eindeutig gewonnen werden, wenn eine konkrete Wahl des Zustandsvektors vorliegt.

Von dieser Vieldeutigkeit der Zustandsgrößen rührt auch die Tatsache her, dass bei den Zustandsraummodellen die Anzahl der Parameter in den Matrizen deutlich größer ist als die Anzahl an sogenannten invarianten Parametern, die das Ein-/Ausgangsverhalten bestimmen [Kru08, CBW79]. Dies ist bei der Schätzung eines Zustandsraummodells aus Messdaten der Ein- und Ausgangsgrößen zu berücksichtigen (vgl. Abschnitte 2.2.1 und 3.2.3).

⁷Die Durchgriffsmatrix ist die einzige der vier Parameter-Matrizen \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{C} und \mathbf{D} , die bei der Beschreibung desselben Systems in der zeitkontinuierlichen und der zeitdiskreten Zustandsraumbeschreibung stets gleich sind, weshalb hier auf den Zusatz „diskret“ verzichtet werden kann. Ebenso ist die Matrix \mathbf{F} für dasselbe System in beiden Fällen identisch. Die Ausgangsmatrix \mathbf{C} ist nur dann in beiden Beschreibungen identisch, wenn für die zeitdiskrete Zustandsraumbeschreibung dieselben Zustandsgrößen wie in der zeitkontinuierlichen Beschreibung gewählt werden.

Bei Systemen ohne Durchgriff fällt in den Zustandsraummodellen der Summand „ $D \mathbf{u}$ “ weg, da die Durchgriffsmatrix dann identisch mit einer Nullmatrix ist. Die Eingangsgrößen haben dann nur noch indirekt über die Zustände einen Einfluss auf die Ausgangsgrößen.

Einen häufig betrachteten Spezialfall bei den Zustandsraumbeschreibungen erhält man, wenn man die unbekannte Störgröße \mathbf{z} als n -dimensionalen Rauschprozess $\mathbf{z} = \boldsymbol{\psi} \in \mathbb{R}^n$ wählt, der direkt auf die Zustandsgrößen einwirkt (d. h. $\mathbf{E} = \mathbf{I}$). Der Rauschprozess wird dann als *Systemrauschen* bezeichnet. Oft wird dabei zusätzlich $\mathbf{F} = \mathbf{0}$ angenommen, wodurch das Gesamtrauschen in der Ausgangsgleichung unkorreliert zum Systemrauschen ist. Durch die stochastischen Anteile des Modells stellen die Zustandsgröße und die Ausgangsgröße jeweils einen stochastischen Prozess dar, der die Markov-Eigenschaft (benannt nach Andrej Andreewič Markov⁸) erfüllt.

Speziell das zeitdiskrete Zustandsraummodell mit Mess- und Systemrauschen wird, vor allem in der englischsprachigen Literatur, auch Prozessform genannt [See09, Kat05, Qin06]. Außer dieser Prozessform existieren noch zwei weitere Formen zeitdiskreter Zustandsraummodelle, die Innovationsform und die Prädiktorform, welche aus der Prozessform durch mathematische Umformungen gewonnen werden können. Diese kommen insbesondere dann zum Einsatz, wenn die Zustände des Systems mit einem Kalman-Filter (siehe z. B. [Kre80, Has08, Nie09]) geschätzt werden. Bei der Innovationsform wird der Fehler $\mathbf{e}(k)$ zwischen gemessenem und geschätztem Ausgang, auch Ausgangsfehler, Residuum oder Innovation genannt, betrachtet:

$$\mathbf{e}(k) = \mathbf{y}(k) - \underbrace{\mathbf{C}\hat{\mathbf{x}}(k) - \mathbf{D}\mathbf{u}(k)}_{= -\hat{\mathbf{y}}(k)} \quad (2.17)$$

Diese Innovation geht über die sogenannte Kalman-Matrix \mathbf{K} in die Systemgleichung mit ein, um die Zustandsschätzung zum nächsten Zeitschritt zu verbessern. Bei zeitveränderlichen Kovarianzmatrizen von Mess- und Systemrauschen ist die Kalman-Matrix auch zeitveränderlich. Insgesamt gelten also für die Innovationsform die Gleichungen

$$\hat{\mathbf{x}}(k+1) = \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}}(k) + \mathbf{B}\mathbf{u}(k) + \mathbf{K}\mathbf{e}(k), \quad (2.18a)$$

$$\mathbf{y}(k) = \mathbf{C}\hat{\mathbf{x}}(k) + \mathbf{D}\mathbf{u}(k) + \mathbf{e}(k). \quad (2.18b)$$

Im Idealfall entspricht die Innovation nur dem stochastischen Anteil der gemessenen Ausgangsgrößen.

⁸Andrej Andreewič Markov, * 14. Juni 1856 in Rjasan, Russland, + 20. Juli 1922 in Petrograd (heute wieder St. Petersburg); Mathematiker; Professor an der Universität St. Petersburg; Mitglied der Russischen Akademie der Wissenschaften

Die Prädiktorform entspricht einer Umformulierung der Innovationsform, meist speziell für Systeme ohne Durchgriff, zur Vorhersage der Ausgangsgröße zum nächsten Zeitschritt auf Basis der aktuell bekannten Werte:

$$\hat{\mathbf{x}}(k+1) = \mathbf{A}_K \hat{\mathbf{x}}(k) + \mathbf{B}_K \begin{bmatrix} \mathbf{y}(k) \\ \mathbf{u}(k) \end{bmatrix}, \quad (2.19a)$$

$$\mathbf{y}(k+1) = \mathbf{C} \hat{\mathbf{x}}(k+1) + \mathbf{e}(k+1). \quad (2.19b)$$

Für die Matrizen \mathbf{A}_K und \mathbf{B}_K gilt dabei

$$\mathbf{A}_K = \mathbf{A} - \mathbf{K} \mathbf{C} \quad \text{und} \quad \mathbf{B}_K = \begin{bmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{B} \end{bmatrix}. \quad (2.20)$$

Man findet in der Literatur die Prädiktorform auch mit Durchgriff (z. B. in [Qin06]), wobei dann für die Vorhersage der Ausgangsgröße zum nächsten Zeitschritt die zugehörigen Eingangsgrößen bereits bekannt sein müssen, was beispielsweise bei geregelten Systemen auf Basis des geschätzten Zustandsvektors der Fall ist. Dann ergibt sich die Systembeschreibung zu

$$\hat{\mathbf{x}}(k+1) = \mathbf{A}_K \hat{\mathbf{x}}(k) + \mathbf{B}_K \begin{bmatrix} \mathbf{y}(k) \\ \mathbf{u}(k) \end{bmatrix}, \quad (2.21a)$$

$$\mathbf{y}(k+1) = \mathbf{C} \hat{\mathbf{x}}(k+1) + \mathbf{D} \mathbf{u}(k+1) + \mathbf{e}(k+1). \quad (2.21b)$$

Die Formulierung ohne Durchgriff stellt also den Spezialfall dieser allgemeineren Formulierung für $\mathbf{D} = \mathbf{0}$ dar.

Ein großer Vorteil der Prädiktorform ist die Tatsache, dass das so betrachtete System mit \mathbf{A}_K stets stabil ist, auch wenn bezogen auf \mathbf{A} ein instabiles System zugrunde liegt [Qin06]. Somit eignet sich diese Form besonders zur Identifikation instabiler Prozesse. Bei zeitvarianter Kalman-Matrix, wie sie bei einer endlichen Anzahl an Messdaten stets vorliegt, ist allerdings auch die Matrix \mathbf{A}_K zeitabhängig.

Wie eben bei der Betrachtung der Innovationsform geschildert, kann man aus Sicht der Systemidentifikation (vgl. auch den folgenden Abschnitt 2.2) das Messrauschen als *Ausgangsfehler* bezeichnen, da man mit ihm die Differenz zwischen der Messung und dem Modellausgang erklären kann. Daher werden Modelle, für welche die Bedingung (2.8) gilt, auch Ausgangsfehler-Modelle genannt, wenn sie durch Identifikation gewonnen werden. Im Gegensatz dazu werden in der Literatur auch vielfach Modelle betrachtet, die auf Basis des *Gleichungsfehlers* identifiziert werden. Bei dieser Betrachtung findet die Bedingung (2.8) keine Anwendung und es werden üblicherweise keine unbekanntes Störgrößen betrachtet, sodass $\mathbf{z} \equiv \mathbf{0}$ gilt und der entsprechende Summand aus den Systembeschreibungen (2.6) und (2.7) herausfällt. Der Gleichungsfehler beschreibt den Unterschied zwischen dem Modellteil, der sich aus den

Ausgangsgrößen und deren Ableitungen bzw. Vergangenheitswerten berechnet, und dem Teil der Eingangsgrößen und deren Ableitungen bzw. Vergangenheitswerten.

Für die folgenden Modelldefinitionen wird sich im Rahmen dieser Arbeit auf den zeitdiskreten Fall beschränkt. Macht man zunächst die zusätzliche Annahme, dass nur der als Rauschen ξ beschriebene Gleichungsfehler selbst und keine Vergangenheitswerte davon auftreten, also dass

$$D_0 = I \quad \text{und} \quad D_i = 0 \quad \forall i = 1, \dots, o \quad (2.22)$$

gilt, so lassen sich die folgenden beiden Modellformen definieren:

Definition 2.14 (AR-Modell):

Unter den Voraussetzungen, dass keine Eingangsgrößen \mathbf{u} und keine unbekanntenen Störgrößen \mathbf{z} auf das System einwirken und dass die Bedingung (2.22) erfüllt ist, nennt man ein Modell nach der Definition 2.9 für ein zeitdiskretes lineares System ein AR-Modell. Mithilfe der z -Transformation ergibt sich die Beschreibung

$$\mathbf{y}(k) = \mathbf{H}(k) * \xi(k) \quad (2.23a)$$

$$\begin{array}{c} \circ \\ \downarrow \\ \mathfrak{z} \end{array} \\ \mathbf{y}_3(z) = \mathbf{H}_3(z) \xi_3(z), \quad (2.23b)$$

wobei hier für die Matrix-Übertragungsfunktion des Rauschens $\mathbf{H}_3(z)$ der Zusammenhang

$$\mathbf{H}_3(z) = (\mathbf{A}_3(z))^{-1} D_0 = (\mathbf{A}_3(z))^{-1} \quad (2.24)$$

mit $\mathbf{A}_3(z)$ aus (2.12) gilt. Dabei steht die Abkürzung „AR“ für „AutoRegressive“, womit ein dynamischer Prozess gemeint ist, dessen Ausgang von seiner Vergangenheit abhängt. Die höchste auftretende Verzögerung n nennt man die Ordnung des AR-Modells und man schreibt auch $AR(n)$.

Definition 2.15 (ARX-Modell):

Hat man ein System, auf das Eingangsgrößen \mathbf{u} einwirken und welches ansonsten die Bedingungen aus der Definition 2.14 erfüllt, nennt man das zugehörige Modell ein ARX-Modell. Mithilfe der z -Transformation ergibt sich die Beschreibung

$$\mathbf{y}(k) = \mathbf{G}(k) * \mathbf{u}(k) + \mathbf{H}(k) * \xi(k) \quad (2.25a)$$

$$\begin{array}{c} \circ \\ \downarrow \\ \mathfrak{z} \end{array} \\ \mathbf{y}_3(z) = \mathbf{G}_3(z) \mathbf{u}_3(z) + \mathbf{H}_3(z) \xi_3(z), \quad (2.25b)$$

wobei hier für die Matrix-Übertragungsfunktion $\mathbf{G}_3(z)$ der Zusammenhang (2.14a) und für die Matrix-Übertragungsfunktion des Rauschens $\mathbf{H}_3(z)$ der Zusammenhang

(2.24) aus der Definition 2.14 gelten. Dabei steht die Abkürzung „ARX“ für „Auto-Regressive with eXogenous inputs“, also ein dynamisches System, dessen Ausgang sowohl von seiner Vergangenheit als auch von der Eingangsgröße \mathbf{u} abhängt. Hier schreibt man auch $ARX(n,m)$, um die jeweils höchste auftretende Verzögerung der Ausgangsgröße (n) und der Eingangsgröße (m) mit anzugeben.

Verzichtet man auf die Bedingung (2.22) und erweitert so die Flexibilität bei der Beschreibung des Gleichungsfehlers, so ergeben sich folgende beiden Definitionen:

Definition 2.16 (ARMA-Modell):

Unter den Voraussetzungen, dass keine Eingangsgrößen \mathbf{u} und keine unbekanntenen Störgrößen \mathbf{z} auf das System einwirken, nennt man ein Modell nach der Definition 2.9 für ein zeitdiskretes lineares System ein ARMA-Modell. Mithilfe der z -Transformation ergibt sich die Beschreibung

$$\mathbf{y}(k) = \mathbf{H}(k) * \boldsymbol{\xi}(k) \quad (2.26a)$$

$$\begin{array}{c} \circ \\ \downarrow \\ \mathbf{y}_3(z) = \mathbf{H}_3(z) \boldsymbol{\xi}_3(z), \end{array} \quad (2.26b)$$

wobei hier für die Matrix-Übertragungsfunktion des Rauschens $\mathbf{H}_3(z)$ der Zusammenhang

$$\mathbf{H}_3(z) = (\mathbf{A}_3(z))^{-1} \mathbf{D}_3(z) \quad (2.27)$$

mit

$$\mathbf{D}_3(z) = \mathbf{D}_0 + \mathbf{D}_1 z^{-1} + \dots + \mathbf{D}_o z^{-o} \quad (2.28)$$

gilt. Dabei steht die Abkürzung „ARMA“ für „AutoRegressive Moving Average“, womit ein dynamischer Prozess gemeint ist, dessen Ausgang von seiner Vergangenheit sowie von einem gleitenden gewichteten Mittelwert des Rauschens abhängt. Man schreibt auch $ARMA(n,o)$, um die jeweils höchste auftretende Verzögerung der Ausgangsgröße (n) und des Rauschens (o) mit anzugeben.

Manchmal ist mit dem MA-Anteil auch der in dieser Arbeit mit „X“ bezeichnete Anteil für eine deterministische Eingangsgröße gemeint (vgl. beispielsweise [KJ02, Lun08b]), wodurch dann das hier mit ARX bezeichnete Modell als ARMA-Modell benannt wird.

Definition 2.17 (ARMAX-Modell):

Hat man ein System, auf das Eingangsgrößen \mathbf{u} einwirken und welches ansonsten die Bedingungen aus der Definition 2.16 erfüllt, nennt man das zugehörige Modell

ein ARMAX-Modell. Mithilfe der z -Transformation ergibt sich die Beschreibung

$$\mathbf{y}(k) = \mathbf{G}(k) * \mathbf{u}(k) + \mathbf{H}(k) * \boldsymbol{\xi}(k) \quad (2.29a)$$

$$\begin{array}{c} \circ \\ \downarrow \\ \mathfrak{z} \end{array} \quad \mathbf{y}_3(z) = \mathbf{G}_3(z) \mathbf{u}_3(z) + \mathbf{H}_3(z) \boldsymbol{\xi}_3(z), \quad (2.29b)$$

wobei hier für die Matrix-Übertragungsfunktion $\mathbf{G}_3(z)$ der Zusammenhang (2.14a) und für die Matrix-Übertragungsfunktion des Rauschens $\mathbf{H}_3(z)$ der Zusammenhang (2.27) aus der Definition 2.16 gilt. Dabei steht die Abkürzung „ARMAX“ für „AutoRegressive Moving Average with eXogenous inputs“, also ein dynamisches System, dessen Ausgang von seiner Vergangenheit, von einem gleitenden gewichteten Mittelwert über das Rauschen und von der Eingangsgröße \mathbf{u} abhängt. Wie bei den Modellen zuvor schreibt man auch $\text{ARMAX}(n,m,o)$, um die jeweils höchste auftretende Verzögerung der Ausgangsgrößen (n), der Eingangsgrößen (m) und des Rauschens (o) mit anzugeben.

Vergleicht man die Definitionen 2.17 und 2.13, so stellt man fest, dass es sich bei einem zeitdiskreten linearen Zustandsraummodell um ein ARMAX-Modell handelt, bei dem die Koeffizienten des MA-Anteils die Bedingung (2.8) erfüllen. In Prädiktor- und Innovationsform kann ein Zustandsraummodell auch als ARX-Modell interpretiert werden, wobei dann die Innovationen anstelle des Rauschens treten.

Entsprechend der Definitionen 2.14 bis 2.17 können auch zeitkontinuierliche Modelle mit den jeweiligen Anteilen und Bedingungen definiert werden. Da diese jedoch im Rahmen dieser Arbeit nicht benötigt werden, sei hierzu auf die Literatur (z. B. [KJ02]) verwiesen. Im Folgenden wird mit den Bezeichnungen AR, ARX, ARMA und ARMAX stets ein zeitdiskretes Modell impliziert. Weitere ähnlich aufgebaute Modellstrukturen und die Zusammenhänge mit den hier vorgestellten Varianten können beispielsweise [Lju99, SS89] entnommen werden. Im Gegensatz zu dieser Arbeit werden dort diese Modellformen im Rahmen der Prädiktionsfehler-Methoden betrachtet, also Identifikationsmethoden für Modelle, die auf Basis der aktuell vorliegenden Informationen der Ein- und Ausgangsgrößen die Ausgangsgröße zum nächsten Abtastschritt vorhersagen. Dann kann als die Differenz der vorhergesagten und der gemessenen Ausgangsgröße der sogenannte *Prädiktionsfehler* gebildet werden. Dieser entspricht der zuvor bei den Zustandsraummodellen bereits eingeführten Innovation. Nur in seltenen Fällen wird mehr als einen Schritt in die Zukunft prädiziert, weshalb damit meistens die exaktere Bezeichnung Ein-Schritt-Prädiktionsfehler abgekürzt wird. Im Gegensatz zu diesen Prädiktionsmodellen bezeichnet man die Modelle, denen nur die Eingangsgröße zur Verfügung gestellt wird, um den Verlauf der Ausgangsgröße zu berechnen, als Simulationsmodelle [Nel01]. Im Rahmen dieser Arbeit wird der zu diesen Modellen gehörige Ausgangsfehler auch als *Simulationsfehler* bezeichnet.

2.1.3 Nichtlineare dynamische Systeme

Bisher wurde bei dynamischen Systemen nur der lineare Fall betrachtet, der in der Praxis am häufigsten verwendet wird, auch zur Approximation nichtlinearer Systeme. Nicht immer reicht jedoch die Betrachtung linearer Modelle aus. Analog zu den beiden Definitionen 2.8 und 2.9 für lineare Systeme lassen sich die folgenden Definitionen für nichtlineare Systeme in Ein-/Ausgangsdarstellung treffen:

Definition 2.18 (zeitkontinuierliches nichtlineares dynamisches System):

Ein nichtlineares dynamisches System wird durch ein Differenzialgleichungssystem der Form

$$\mathbf{y}(t) = \mathbf{g} \left(\frac{d}{dt} \mathbf{y}(t), \dots, \frac{d^n}{dt^n} \mathbf{y}(t), \mathbf{u}(t), \dots, \frac{d^m}{dt^m} \mathbf{u}(t), \right. \\ \left. \mathbf{z}(t), \dots, \frac{d^l}{dt^l} \mathbf{z}(t), \boldsymbol{\xi}(t), \dots, \frac{d^o}{dt^o} \boldsymbol{\xi}(t) \right) \quad (2.30)$$

beschrieben. Die vektorielle Funktion $\mathbf{g}(\cdot)$ stellt dabei den nichtlinearen Zusammenhang zwischen der Ausgangsgröße und den Ableitungen der Aus- und Eingangsgröße, der Eingangsgröße sowie der unbekanntten Störung $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^r$ und dem Messrauschen mit deren Ableitungen dar. Die höchste auftretende Ableitung der Ausgangsgröße n wird auch hier als Ordnung des Systems bezeichnet. Bei technischen Systemen gilt dabei ebenso wie bei linearen Systemen $m \leq n$, und auch hier wird $l \leq n$ und $o \leq n$ vorausgesetzt.

Definition 2.19 (zeitdiskretes nichtlineares dynamisches System):

Ein nichtlineares dynamisches System wird zu den äquidistanten Zeitpunkten $t = kT_A$, $k \in \mathbb{Z}$ durch ein Differenzengleichungssystem der Form

$$\mathbf{y}(k) = \mathbf{g}(\mathbf{y}(k-1), \dots, \mathbf{y}(k-n), \mathbf{u}(k), \dots, \mathbf{u}(k-m), \\ \mathbf{z}(k), \dots, \mathbf{z}(k-l), \boldsymbol{\xi}(k), \dots, \boldsymbol{\xi}(k-o)) \quad (2.31)$$

beschrieben. Die vektorielle Funktion $\mathbf{g}(\cdot)$ stellt dabei den nichtlinearen Zusammenhang zwischen der Ausgangsgröße zum aktuellen Abtastzeitpunkt und den Vergangenheitswerten der Aus- und Eingangsgröße, der Störungen $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^r$ und dem Messrauschen sowie der aktuellen Eingangsgröße, der aktuellen Störung und dem aktuellen Messrauschen dar. Hier stellt die höchste auftretende Verzögerung der Ausgangsgröße n die Ordnung des Systems dar und es gilt bei technischen Systemen ebenso $m \leq n$. Außerdem wird $l \leq n$ und $o \leq n$ angenommen.

Diese beiden Systemdefinitionen werden auch mit dem Begriff *externe Dynamik* (engl. „external dynamics“) bezeichnet, da sie sich durch eine statische nichtlineare Funktion und die linearen Differenziations- bzw. Verzögerungsglieder für die Ein-

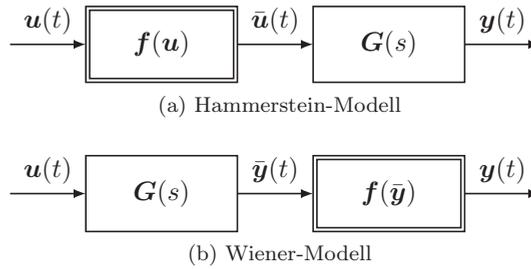


Abbildung 2.3: Blockstrukturen von Hammerstein- und Wiener-Modell

und Ausgangsgrößen und das Rauschen darstellen lassen. Sie stellen die mit Abstand am häufigsten zur nichtlinearen Systemidentifikation eingesetzte Form dar [Nel01]. Wichtige Spezialfälle hierbei sind das *Hammerstein-Modell* und das *Wiener-Modell*:

Definition 2.20 (Hammerstein-Modell):

Ein Hammerstein-Modell besteht aus einem linearen dynamischen System, dessen Eingangsgrößen aus einer nichtlinearen statischen Abbildung der Modelleingangsgrößen gebildet werden. Die Ausgangsgrößen des linearen dynamischen Systems stellen die Modellausgangsgrößen dar (vgl. Abbildung 2.3(a)).

Definition 2.21 (Wiener-Modell):

Ein Wiener-Modell besteht aus einem linearen dynamischen System, dessen Ausgangsgrößen nach einer Abbildung durch eine nichtlineare statische Funktion die Modellausgangsgrößen darstellen. Die Modelleingangsgrößen stellen die Eingangsgrößen des linearen dynamischen Systems dar (vgl. Abbildung 2.3(b)).

In der Literatur findet man weitere, aus diesen beiden Modellen abgeleitete Formen, unter anderem das *Hammerstein-Wiener-Modell*, welches auch *Sandwich-Modell* genannt wird, und das *Uryson-Modell* [DP04, Pea99]:

Definition 2.22 (Hammerstein-Wiener-Modell):

Ein Hammerstein-Wiener-Modell ist eine serielle Verschaltung eines Hammerstein-Modells und eines Wiener-Modells, bei der die beiden linearen Anteile zu einem linearen Block zusammengefasst werden, der zwischen den beiden nichtlinearen statischen Funktionen liegt (vgl. Abbildung 2.4(a)).

Definition 2.23 (Uryson-Modell):

Das Uryson-Modell ist eine Parallelschaltung mehrerer Hammerstein-Modelle (vgl. Abbildung 2.4(b)).

Im Gegensatz zu den Übertragungsfunktionen, bei denen aufgrund der Transformation in den jeweiligen Bildbereich die Linearität des Systems eine Grundvorausset-

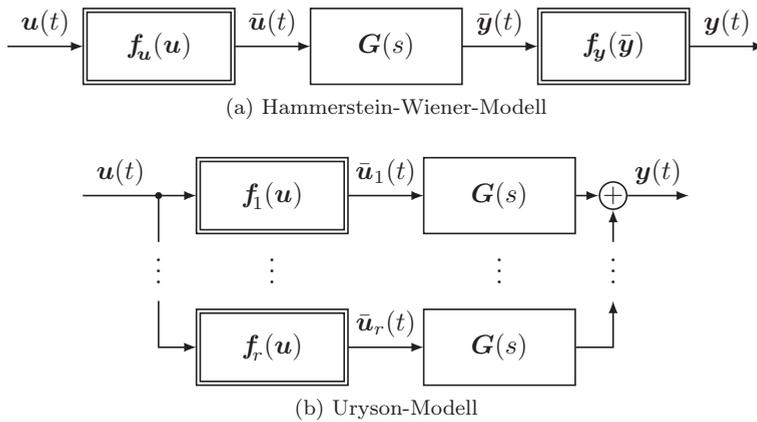


Abbildung 2.4: Blockstrukturen von Hammerstein-Wiener- und Uryson-Modell

zung für die Beschreibungsform ist, lässt sich das Konzept der Zustandsraummodelle auf nichtlineare Systeme erweitern. Auch hier wird analog zum linearen Fall im Abschnitt 2.1.2 davon ausgegangen, dass der Rauschterm ξ reines Messrauschen darstellt und daher nur in die Ausgangsgleichung eingeht. Damit lassen sich die folgenden zwei Definitionen formulieren:

Definition 2.24 (zeitkontinuierliches nichtlineares Zustandsraummodell):

Ein zeitkontinuierliches nichtlineares Zustandsraummodell wird durch die Gleichungen

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{z}(t)), \quad (2.32a)$$

$$\mathbf{y}(t) = \mathbf{g}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{z}(t)) + \xi(t) \quad (2.32b)$$

definiert. Wie im linearen Fall stellen dabei $\mathbf{x}(t) \in \mathbb{R}^n$ den Zustandsvektor, dessen Dimension n der Systemordnung entspricht, und $\mathbf{z}(t) \in \mathbb{R}^r$ die unbekannte Störgröße zur Zeit t dar. Die vektorielle Funktion $\mathbf{f}(\cdot)$ heißt dabei Systemfunktion, die vektorielle Funktion $\mathbf{g}(\cdot)$ wird Ausgangsfunktion genannt.

Definition 2.25 (zeitdiskretes nichtlineares Zustandsraummodell):

Ein zeitdiskretes nichtlineares Zustandsraummodell für die Zeitpunkte kT_A wird durch die Gleichungen

$$\mathbf{x}(k+1) = \mathbf{f}(\mathbf{x}(k), \mathbf{u}(k), \mathbf{z}(k)), \quad (2.33a)$$

$$\mathbf{y}(k) = \mathbf{g}(\mathbf{x}(k), \mathbf{u}(k), \mathbf{z}(k)) + \xi(k) \quad (2.33b)$$

definiert. Wie im linearen Fall stellen dabei $\mathbf{x}(k) \in \mathbb{R}^n$ den Zustandsvektor, dessen

Dimension n der Systemordnung entspricht, und $\mathbf{z}(k) \in \mathbb{R}^r$ die unbekannte Störgröße zum Zeitpunkt kT_A dar. Die vektorielle Funktion $\mathbf{f}(\cdot)$ heißt dabei (diskrete) Systemfunktion, die vektorielle Funktion $\mathbf{g}(\cdot)$ wird (diskrete) Ausgangsfunktion genannt.

Diese nichtlinearen Zustandsraummodelle stellen eine allgemeinere Beschreibungsform als die in den Definitionen 2.18 und 2.19 angegebenen nichtlinearen Systeme in Ein-/Ausgangsdarstellung dar [Nel01]. Mit ihnen können zusätzlich Systeme mit bestimmten nichtlinearen Effekten, wie beispielsweise einer Hysterese oder einer Totzone, die von einer inneren Systemgröße abhängen, beschrieben werden, was in der Ein-/Ausgangsdarstellung nicht möglich ist.

Bei den nichtlinearen Zustandsraummodellen werden diverse Spezialfälle, wie beispielsweise hybride oder stückweise affine Systeme [Hod07, Mün06, MBB03, BM99], lineare Systeme mit variierenden Parametern (LPV-Systeme⁹) [Win08], bilineare Systeme [Sch91, BM99] und viele weitere, unterschieden, die jedoch im Rahmen dieser Arbeit keine Rolle spielen und daher nicht weiter betrachtet werden.

Mithilfe von künstlichen neuronalen Netzen können auch nichtlineare dynamische Systeme approximiert werden. Dazu werden als zusätzliche Eingänge des Netzes zeitverzögerte Eingangsgrößen und/oder Ausgangsgrößen des Systems verwendet. Dies bedeutet jedoch eine Zunahme der Komplexität des Netzes und damit einhergehend auch einen deutlichen Anstieg des Rechenaufwands beim Training. Weitere Informationen können beispielsweise in [Nel01, Wai06] nachgelesen werden.

Wie bei den statischen nichtlinearen Systemen ist auch bei den dynamischen nichtlinearen Systemen keine Identifikation der nichtlinearen Funktion aus Messdaten möglich, sofern nicht zusätzliches Wissen vorliegt oder Annahmen gemacht werden. Dies erschwert die Black-Box-Identifikation nichtlinearer Systeme erheblich, weshalb häufig nur Spezialfälle betrachtet werden oder auf die konkrete Anwendung zugeschnittene Verfahren zum Einsatz kommen, wenn eine Approximation durch lineare Modelle keine ausreichende Güte liefert.

2.2 Identifikationsverfahren für statische und dynamische Systeme

Unter anderem bedingt durch die auftretenden Rauschprozesse können die Parameter der im vorigen Abschnitt vorgestellten Modelle anhand von Messdaten der Ein- und Ausgangsgrößen nicht exakt bestimmt werden. Daher sind geeignete Identifikationsverfahren notwendig, die eine möglichst gute Schätzung der deterministischen

⁹LPV steht für „linear parameter varying“ (engl. für linear mit variierenden Parametern).

Parameter liefern. Da das Rauschen einen stochastischen und keinen deterministischen Anteil des Systems darstellt, können nur deterministische Eigenschaften der Dichtefunktion wie die Momente Mittelwert und Varianz ermittelt werden. Für eine konkrete Messung kann das Rauschen damit jedoch nicht bei der Simulation nachgebildet werden, weshalb häufig bei Modellbeschreibungen auf die explizite Nennung der Rauschprozesse verzichtet wird und nur die deterministischen Anteile betrachtet werden.

Die in diesem Abschnitt vorgestellten Verfahren dienen zunächst der Parameteridentifikation einer vorgegebenen Modellstruktur. Erst durch einen Vergleich verschiedener mit den Verfahren parametrierter Modelle wird daraus eine Systemidentifikation. Dieser Vergleich wird hauptsächlich durch die in der Realität auftretenden Rauschprozesse notwendig, deren Effekte in den Messwerten enthalten sind. Durch diese stochastische Komponente, die dem deterministischen Anteil überlagert ist, werden auch bei Modellen, deren Ordnung höher gewählt wurde als die reale Ordnung des Systems, alle Parameter ungleich null geschätzt. Nur im akademischen Fall von idealen Messdaten würde bei einem solchen Ansatz die Modellordnung korrekt ermittelt werden, in dem die Parameter der Terme zu hoher Ordnung zu null geschätzt würden. Die in diesem Kapitel verwendeten Indizes zur Unterscheidung der mit den verschiedenen Verfahren ermittelten Schätzwerte für die Parameter werden in den weiteren Kapiteln dieser Arbeit aus Gründen der besseren Lesbarkeit weggelassen, da dort stets aus dem Kontext hervorgeht, mit welchem Schätzer die Werte gewonnen wurden.

Die Anwendung der vorgestellten Identifikationsverfahren setzt voraus, dass eine genügend große Anzahl N an geeigneten Messdatenpaaren der Ein- und Ausgangsgrößen zur Verfügung stehen, um alle Parameter des Modells schätzen zu können. Das Minimum stellt dabei die Anzahl der zu schätzenden Parameter dar, wobei die Messdatenpaare linear unabhängig sein müssen. Bei der praktischen Anwendung wird man deutlich mehr Datenpaare als mindestens notwendig verwenden, um den Einfluss des Rauschens auf die Parameterschätzung durch eine geeignete Vorgehensweise verringern zu können.

Bei dynamischen Systemen muss zusätzlich darauf geachtet werden, dass sich auch alle relevanten Frequenzen des Systems in den Daten wiederfinden. Man spricht dabei von *genügender Anregung*, die im Folgenden stets impliziert wird. Hilfestellungen für die hierzu notwendige Wahl der Eingangssignale können ebenso wie weiterführende Informationen zum Thema Identifikation beispielsweise [Lju99, Nel01, SS89] entnommen werden.

Sind diese Voraussetzungen erfüllt, können mit einem oder mehreren Verfahren die Parameter in Frage kommender Modellstrukturen geschätzt werden. Zur Auswahl eines dieser Modelle betrachtet man üblicherweise die als Simulationsfehler bezeich-

nete Differenz $\mathbf{e} = \mathbf{y}_M - \mathbf{y}_S$ zwischen der Messung der Ausgangsgrößen \mathbf{y}_M und den mit dem Modell simulierten Ausgangsgrößen \mathbf{y}_S für einen oder mehrere Datensätze des Systems. Zur Bewertung der verschiedenen Modelle werden üblicherweise ein Gütemaß wie die *Summe der quadratischen Fehler* (SSE^{10}) oder der *mittlere quadratische Fehler* (MSE^{11}) oder Kriterien wie Mittelwert und Varianz bzw. Kovarianzmatrix¹² des Simulationsfehlers herangezogen. Das bezüglich dieser Bewertung beste Modell repräsentiert dann das System in den auf die Modellierung folgenden Arbeitsschritten des Ingenieurs.

2.2.1 Methode der kleinsten Quadrate (LS-Schätzung)

Auf solchen Kriterien, wie sie zur Modellauswahl herangezogen werden, basieren auch Schätzverfahren zur Parameteridentifikation eines Modells. Die *Methode der kleinsten Quadrate* (LS^{13}), zur Abgrenzung von daraus abgeleiteten Erweiterungen auch als *gewöhnliche LS-Methode* (OLS^{14}) bezeichnet, stellt eine der am häufigsten verwendeten Methoden zur Parameterschätzung dar und geht auf Carl Friedrich Gauß¹⁵ zurück, welcher die Methode zur Bahnberechnung von Himmelskörpern entwickelte.

Sie geht von einem Modell nach der Definition 2.7 aus, in dem sich die Ausgangsgröße \mathbf{y} aus der Multiplikation von unbekanntem Parameter \mathbf{P} und einer bekannten nichtlinearen Abbildung $\mathbf{g}(\mathbf{u})$ der Eingangsgrößen ergibt. Außerdem muss eine genügend große Anzahl $N \geq p_g = \dim(\mathbf{g}(\mathbf{u}))$ mit p_g linear unabhängigen Datensätzen $(\mathbf{g}(\mathbf{u}_1), \mathbf{y}_1), \dots, (\mathbf{g}(\mathbf{u}_N), \mathbf{y}_N)$ vorliegen, die in den Matrizen

$$\mathbf{U}_g = \begin{bmatrix} \mathbf{g}(\mathbf{u}_1) & \cdots & \mathbf{g}(\mathbf{u}_N) \end{bmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{Y} = \begin{bmatrix} \mathbf{y}_1 & \cdots & \mathbf{y}_N \end{bmatrix} \quad (2.34)$$

zusammengefasst werden.

Durch das Rauschen liegen in praktischen Anwendungen mehr als p_g linear unabhängige Datensätze vor, was zu einem nicht lösbar überbestimmten Gleichungssystem für die Parameter führt. Daher wird die Bedingung

$$\min_{\mathbf{P}} J_{LS}(\mathbf{P}) \quad (2.35)$$

¹⁰SSE steht für „sum of squared errors“ (engl. für Summe der quadratischen Fehler).

¹¹MSE steht für „mean squared error“ (engl. für mittlerer quadratischer Fehler).

¹²Bei einem mittelwertfreien Fehler sind Varianz und MSE identisch.

¹³LS steht für „least squares“ (engl. für kleinste Quadrate).

¹⁴OLS steht für „ordinary least squares“ (engl. für gewöhnliche kleinste Quadrate).

¹⁵Johann Carl Friedrich Gauß, * 30. April 1777 in Braunschweig, † 23. Februar 1855 in Göttingen; Mathematiker, Astronom, Geodät und Physiker

mit dem quadratischen Gütemaß

$$\begin{aligned} J_{\text{LS}}(\mathbf{P}) &= \sum_{i=1}^N \|\mathbf{y}_i - \mathbf{P}\mathbf{g}(\mathbf{u}_i)\|_2^2 = \sum_{i=1}^N (\mathbf{y}_i - \mathbf{P}\mathbf{g}(\mathbf{u}_i))^T (\mathbf{y}_i - \mathbf{P}\mathbf{g}(\mathbf{u}_i)) \\ &= \|\mathbf{Y} - \mathbf{P}\mathbf{U}_g\|_{\text{F}}^2 = \text{spur} \left\{ (\mathbf{Y} - \mathbf{P}\mathbf{U}_g)^T (\mathbf{Y} - \mathbf{P}\mathbf{U}_g) \right\} \end{aligned} \quad (2.36)$$

eingeführt, von der die Methode ihrem Namen hat, da das Quadrat der Abweichungen zwischen Modell und Messung minimiert wird. Dabei stellen $\|\cdot\|_2$ die euklidische Norm (benannt nach Euklid¹⁶, auch 2-Norm genannt) und $\|\cdot\|_{\text{F}}$ die Frobenius-Norm (benannt nach Ferdinand Georg Frobenius¹⁷) dar. Mit $\text{spur}(\cdot)$ ist die Spur einer Matrix, also die Summe ihrer Hauptdiagonalelemente, gemeint (vgl. z. B. [See09, GL96]).

Der Schätzwert $\hat{\mathbf{P}}_{\text{LS}}$ für die Parameter, der die Bedingung (2.35) erfüllt, kann mithilfe der Pseudoinversen $(\mathbf{U}_g^T)^\dagger = (\mathbf{U}_g\mathbf{U}_g^T)^{-1}\mathbf{U}_g$ bzw. den Stichprobenkovarianzen $\hat{\Sigma}_{\mathbf{U}_g\mathbf{U}_g} = \frac{1}{N}\mathbf{U}_g\mathbf{U}_g^T$ und $\hat{\Sigma}_{\mathbf{U}_g\mathbf{Y}} = \frac{1}{N}\mathbf{U}_g\mathbf{Y}^T$ über die Formel

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{P}}_{\text{LS}} &= \left((\mathbf{U}_g^T)^\dagger \mathbf{Y}^T \right)^T = \left((\mathbf{U}_g\mathbf{U}_g^T)^{-1} \mathbf{U}_g\mathbf{Y}^T \right)^T = \mathbf{Y}\mathbf{U}_g^T (\mathbf{U}_g\mathbf{U}_g^T)^{-1} \\ &= \left(\hat{\Sigma}_{\mathbf{U}_g\mathbf{U}_g}^{-1} \hat{\Sigma}_{\mathbf{U}_g\mathbf{Y}} \right)^T = \hat{\Sigma}_{\mathbf{Y}\mathbf{U}_g} \hat{\Sigma}_{\mathbf{U}_g\mathbf{U}_g}^{-1} \end{aligned} \quad (2.37)$$

berechnet werden.

Der LS-Schätzer ist deshalb so verbreitet, da er bei unkorreliertem mittelwertfreien Rauschen mit konstanter Varianz einen erwartungstreuen Schätzwert mit minimaler Varianz für die Parameter eines Modells, das linear in diesen Parametern ist, liefert (BLUE¹⁸), sofern die Modellannahmen stimmen. Genauere Betrachtungen dieser und weiterer statistischer Eigenschaften sowie Varianten und Erweiterungen können beispielsweise in [AHK⁺09, Lju99, Nel01, SS89, And03] nachgelesen werden.

Ist die Kovarianz des Rauschens nicht konstant ($\Sigma_{\boldsymbol{\xi}} = \sigma_{\boldsymbol{\xi}}\mathbf{I}$), sondern ändert sich über den verwendeten Messdatensatz ($\Sigma_{\boldsymbol{\xi}} = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_N)$), so kann die gewichtete LS-

¹⁶Euklid von Alexandria, * ca. 360 v. Chr., † ca. 280 v. Chr.; griechischer Mathematiker

¹⁷Ferdinand Georg Frobenius, * 26. Oktober 1849 in Berlin, † 3. August 1917 in Charlottenburg (heute Stadtteil von Berlin); Mathematiker; Professor am Eidgenössischen Polytechnikum Zürich (heute Eidgenössische Technische Hochschule Zürich) und an der Universität Berlin; Mitglied der Preußischen Akademie der Wissenschaften

¹⁸BLUE steht für „best linear unbiased estimator“ (engl. für minimalvarianter linearer erwartungstreuer Schätzer).

Methode (WLS¹⁹) zum Einsatz kommen, bei der sich der Schätzwert zu

$$\hat{\mathbf{P}}_{\text{WLS}} = \left(\left(\mathbf{U}_g \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{\xi}}^{-1} \mathbf{U}_g^{\text{T}} \right)^{-1} \mathbf{U}_g \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{\xi}}^{-1} \mathbf{Y}^{\text{T}} \right)^{\text{T}} = \mathbf{Y} \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{\xi}}^{-1} \mathbf{U}_g^{\text{T}} \left(\mathbf{U}_g \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{\xi}}^{-1} \mathbf{U}_g^{\text{T}} \right)^{-1} \quad (2.38)$$

ergibt. Die Diagonalgestalt der Kovarianzmatrix rührt von der angenommenen Unkorreliertheit des Rauschens her. Mit

$$\mathbf{W} = \text{diag}(w_1, \dots, w_n) = \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{\xi}}^{-1} \quad \text{und} \quad w_i = \frac{1}{\sigma_i} \quad (2.39)$$

lautet das durch den WLS-Schätzer minimierte Gütemaß

$$\begin{aligned} J_{\text{WLS}}(\mathbf{P}) &= \sum_{i=1}^N (\mathbf{y}_i - \mathbf{P}g(\mathbf{u}_i))^{\text{T}} \mathbf{W} (\mathbf{y}_i - \mathbf{P}g(\mathbf{u}_i)) \\ &= \text{spur} \left\{ (\mathbf{Y} - \mathbf{P}\mathbf{U}_g)^{\text{T}} \mathbf{W} (\mathbf{Y} - \mathbf{P}\mathbf{U}_g) \right\}. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Ist auch die Unkorreliertheit des Rauschens nicht mehr gegeben, so kann der verallgemeinerte LS-Schätzer (GLS²⁰), auch Aitken-Schätzer (nach Alexander Aitken²¹) genannt, verwendet werden. Für ihn gilt dabei dieselbe Berechnungsvorschrift (2.38) für den Schätzwert wie beim WLS-Schätzer und damit $\hat{\mathbf{P}}_{\text{GLS}} = \hat{\mathbf{P}}_{\text{WLS}}$. Auch das durch den Schätzer minimierte Gütemaß hat dieselbe Form (2.40) und es gilt somit $J_{\text{GLS}}(\mathbf{P}) = J_{\text{WLS}}(\mathbf{P})$. Nur werden die Kovarianzmatrix $\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{\xi}}$ und damit auch die Gewichtungsmatrix \mathbf{W} nicht mehr als Diagonalmatrizen angenommen. In [Ait35] wurde erstmals gezeigt, dass trotz korreliertem Rauschen bei bekannter Kovarianzmatrix $\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{\xi}}$ der Schätzer nach Gleichung (2.38) ebenfalls ein BLUE ist. Allerdings wird in der Realität die Annahme der bekannten Varianz selten erfüllt. Dennoch führt die Methode bei einer genügend großen Anzahl an Messpunkten zu guten Ergebnissen, wenn ein Schätzwert der wahren Kovarianzmatrix verwendet wird [Lju99].

Auch im Fall eines unterbestimmten Gleichungssystems kann mit der LS-Methode eine eindeutige Lösung bestimmt werden, wenn zusätzlich die minimale 2-Norm des gesuchten Vektors gefordert wird („least squares least norm“-Lösung). Da dieser Fall in praktischen Anwendungen der Parameteridentifikation keine Rolle spielt, sei an dieser Stelle auf die Literatur, beispielsweise [See09, VV07], verwiesen.

Nicht für alle der im Abschnitt 2.1.2 angegebenen linearen dynamischen Modelle können mit dem gewöhnlichen LS-Schätzer die Parameter direkt bestimmt werden. So können bei den zeitkontinuierlichen Modellen die Ableitungen häufig nicht ge-

¹⁹WLS steht für „weighted least squares“ (engl. für gewichtete kleinste Quadrate).

²⁰GLS steht für „generalized least squares“ (engl. für verallgemeinerte kleinste Quadrate).

²¹Alexander Craig Aitken, * 1. April 1895 in Dunedin, Neuseeland, † 3. November 1967 in Edinburgh; Mathematiker, Professor in Edinburgh; „Fellow“ der Royal Society, der Royal Society of Edinburgh und der Royal Society of Literature; gilt als einer der besten Kopfrechner aller Zeiten

messen werden, wodurch eine direkte Schätzung unmöglich wird. Die Parameter der Übertragungsfunktionen können nur über den Zeitbereich mit einem linearen LS-Schätzer bestimmt werden, was bei den zeitkontinuierlichen Übertragungsfunktionen zum selben Problem führt.

Bei den Zustandsraummodellen ist zusätzlich zu beachten, dass zur direkten Schätzung der Parametermatrizen auch die Messwerte des Zustandsvektors benötigt werden, die sowohl im zeitkontinuierlichen als auch im zeitdiskreten Fall im Allgemeinen nicht vorliegen. Sind die Zustandsgrößen nicht festgelegt, so ist die Zustandsraumdarstellung nicht eindeutig und die Anzahl der Parameter in den Matrizen ist deutlich größer als die tatsächliche Anzahl an sogenannten invarianten Parametern, die das Ein-/Ausgangsverhalten des Systems festlegen (vgl. Abschnitte 2.1.2 und 3.2.3 sowie [Kru08, CBW79]). Um eine eindeutige Lösung zu bekommen, müssen hier also weitere Bedingungen angesetzt oder die Zustandsgrößen vorgegeben werden.

Bei den linearen zeitdiskreten Modellen ist im Zeitbereich eine LS-Schätzung zur Parameterbestimmung prinzipiell möglich, allerdings wird anstelle der Matrix \mathbf{U}_g ein Regressor \mathbf{M} benötigt, der sowohl Ein- als auch Ausgangsgrößen enthält, um auch die Parameter des autoregressiven Anteils zu bestimmen (vgl. z. B. [Ise92a, Nel01, Lju99]). Bei den auf dem Gleichungsfehler beruhenden Modellen ist zu beachten, dass sich die Annahmen der Unkorreliertheit und Mittelwertfreiheit dort auf den Gleichungsfehler beziehen. Im Hinblick auf Messrauschen, also additivem mittelwertfreien Rauschen am Ausgang des Systems, stellt der Ausgangsfehler jedoch das bessere Abbild der Realität dar. Stimmen die stochastischen Annahmen mit der Realität überein, dann erhält man eine verzerrte, d. h. nicht erwartungstreue, und nicht konsistente Schätzung der Parameter. Dies liegt an der Korrelation zwischen den im Regressor \mathbf{M} enthaltenen Messwerten der Ausgangsgröße und dem Ausgangsfehler durch das darin enthaltene nicht-deterministische Rauschen.

2.2.2 Methode der Hilfsvariablen

Abhilfe können in diesen Fällen zweistufige Verfahren leisten. So kann ein LS-Schätzer in Verbindung mit den Korrelationen der Signale verwendet werden (COR-LS [Ise92b, Nel01]). Diese Methode ähnelt der weit verbreiteten Yule-Walker-Methode (nach Udney Yule²² und Gilbert Walker²³), die auch Autokorrelationsmethode ge-

²²George Udney Yule, * 18. Februar 1871 in Mornham, Schottland, † 26. Juni 1951 in Cambridge, England; Statistiker; Dozent am University College London und an der Cambridge University; Mitglied der Royal Statistical Society

²³Sir Gilbert Walker, * 14. Juni 1868 in Rochdale, England, † 4. November 1958 in Coulsdon, England; Physiker, Statistiker und Meteorologe; Dozent für Angewandte Mathematik an der Cambridge University, Mitarbeiter und später Leiter des meteorologischen Dienstes in Indien, Professor für Meteorologie am Imperial College London; „Fellow“ der Royal Society, „Fellow“ und Präsident der Royal Meteorological Society

nannt wird und eine der am häufigsten verwendeten Methoden zur Schätzung reiner AR-Modelle ist. Sie liefert neben einer Schätzung der Parameter des Modells auch die der Varianz des Rauschens [Kru08, Nel01]. In manchen Szenarien führt die Yule-Walker-Methode jedoch zu instabilen Systemmodellen [HHSD96], weshalb sich als bessere Alternative für reine AR-Modelle die Methode nach Burg (siehe z. B. [HHSD96, Kru08]) anbietet. Diese Verfahren werden im Folgenden nicht weiter betrachtet, da in dieser Arbeit Modelle mit Eingangsgrößen benötigt werden. Für eine weiterführende Beschreibung können die jeweils angegebene Literatur und die Referenzen darin herangezogen werden.

Ein weiteres zweistufiges Verfahren auf Basis der LS-Schätzung, welches auch im Rahmen einiger 4SID-Methoden zum Einsatz kommt und daher in Vorbereitung für Kapitel 3 hier genauer betrachtet werden soll, ist die *Methode der Hilfsvariablen* (*IV-Methode*²⁴). Um die Idee, die hinter dieser Methode steckt, verständlich zu machen, wird nochmals der Ausgangsfehler mit dem vektoriellen Regressor \mathbf{m} und der Parametermatrix \mathbf{P} betrachtet:

$$\mathbf{e}_i = \mathbf{y}_{M,i} - \mathbf{y}_{S,i} = \mathbf{y}_i - \mathbf{P}\mathbf{m}_i \quad \forall i = 1, \dots, N. \quad (2.41)$$

Für alle N Zeitpunkte ergibt sich in Matrixschreibweise mit spaltenweise angeordneten Regressor- und Regressandvektoren analog zum Abschnitt 2.2.1

$$\mathbf{E} = \mathbf{Y}_M - \mathbf{Y}_S = \mathbf{Y} - \mathbf{P}\mathbf{M} \quad (2.42)$$

und nach Transposition

$$\mathbf{E}^T = \mathbf{Y}^T - \mathbf{M}^T \mathbf{P}^T. \quad (2.43)$$

Die Transposition wurde durchgeführt, um auf die in der Literatur bei der Herleitung des LS-Schätzers und seiner Varianten übliche Schreibweise zu kommen, bei der die Parameter von rechts an den Regressor multipliziert werden. Der LS-Schätzwert für die Parameter ergibt sich dann zu

$$\hat{\mathbf{P}}_{LS}^T = \left(\mathbf{M}^T\right)^\dagger \mathbf{Y}^T = \left(\mathbf{M}\mathbf{M}^T\right)^{-1} \mathbf{M}\mathbf{Y}^T. \quad (2.44)$$

Da durch die Korrelation von Regressor und Rauschen keine konsistente und erwartungstreue Schätzung von \mathbf{P} möglich ist, wird bei der IV-Methode die Gleichung (2.43) von links mit einer zu wählenden Matrix \mathbf{Z} multipliziert, deren Zeilen die sogenannten Hilfsvariablen sind und deren Dimension identisch der der Matrix \mathbf{M} ist. Die Hilfsvariablen müssen dabei unkorreliert mit dem Rauschen sein, woraus

²⁴IV steht für „instrumental variables“ (engl. für Hilfsvariablen).

$\mathbf{Z}\mathbf{E}^T = \mathbf{0}$ folgt, falls alle deterministischen Informationen im Modell enthalten sind:

$$\mathbf{0}^T = \mathbf{Z}\mathbf{Y}^T - \mathbf{Z}\mathbf{M}^T\mathbf{P}^T \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{Z}\mathbf{Y}^T = \mathbf{Z}\mathbf{M}^T\mathbf{P}^T. \quad (2.45)$$

Bei genügender Anregung und richtiger Wahl der Hilfsvariablen ist $\mathbf{Z}\mathbf{M}^T$ invertierbar, und für die gesuchten Parameter ergibt sich

$$\hat{\mathbf{P}}_{\text{IV}}^T = \left(\mathbf{Z}\mathbf{M}^T\right)^{-1} \mathbf{Z}\mathbf{Y}^T. \quad (2.46)$$

Diese Lösung entspricht der des LS-Schätzers, wenn $\mathbf{Z} = \mathbf{M}$ gewählt wird. Dann ist jedoch die geforderte Unkorreliertheit zwischen Hilfsvariablen und Rauschen nicht gegeben. Für alle Hilfsvariablen, die diese Bedingung erfüllen, ist die Schätzung konsistent, allerdings hängt die Varianz der Schätzung bei endlichen Stichproben stark von den gewählten Hilfsvariablen ab. Man kann zeigen, dass die Varianz mit steigender Korrelation zwischen der transponierten Hilfsvariablenmatrix \mathbf{Z}^T und dem Regressor \mathbf{M}^T abnimmt [Nel01]. Ziel ist also eine Wahl der Hilfsvariablen \mathbf{z}_i , die unkorreliert mit dem Rauschen, aber maximal korreliert mit den Spalten \mathbf{m}_i^T der Regressormatrix sind. Für den Anteil in \mathbf{M}^T , der von den Eingangsgrößen \mathbf{u} abhängt, können die Eingangsgrößen selbst als entsprechende Hilfsvariablen gewählt werden, da diese Daten nicht durch das Rauschen verfälscht sind. Für die restlichen Hilfsvariablen nimmt man häufig Simulationsdaten des Ausgangs, die mit einem zuvor mit der gewöhnlichen LS-Methode geschätzten Modell erzeugt wurden. Trotz Verzerrung der so geschätzten Parameter des Modells sind diese Simulationen normalerweise hoch korreliert mit den gemessenen Ausgangsgrößen und außerdem unkorreliert mit dem Messrauschen.

Zur Verbesserung der Schätzung kann das Verfahren auch iterativ wiederholt werden, in dem stets die zuletzt geschätzten Modellparameter als Basis zur Erzeugung neuer Hilfsvariablen herangezogen werden. Auch andere Vorgehensweisen sowie eine modellunabhängige Wahl der Hilfsvariablen ist möglich. Hierzu sei auf [Nel01, Lju99, SS89, Ise92a] verwiesen, wo sich auch Untersuchungen weiterer Eigenschaften dieser Methode finden.

2.2.3 Nichtlineare LS-Schätzung

In der Praxis treten häufig auch Fälle auf, in denen die Parameter \mathbf{P} nichtlinear in die Berechnung der Ausgangsgrößen eingehen. Auch bei diesen Modellen kann eine quadratische Gütefunktion aufgestellt werden:

$$J_{\text{NLS}}(\mathbf{P}) = \sum_{i=1}^N (\mathbf{y}_i - \mathbf{g}(\mathbf{u}_i, \mathbf{P}))^T ((\mathbf{y}_i - \mathbf{g}(\mathbf{u}_i, \mathbf{P}))). \quad (2.47)$$

Allerdings ist es hier nicht möglich, eine geschlossene Gleichung für einen Schätzwert anzugeben. Bei der sogenannten *nichtlinearen LS-Schätzung (NLS)* müssen für eine analytische Lösung zunächst alle partiellen ersten und zweiten Ableitungen nach den Parametern — also die Jacobi- und die Hesse-Matrix — der quadratischen Gütefunktion (2.47) berechnet werden, um das globale Minimum $\min_{\mathbf{P}} J_{\text{NLS}}(\mathbf{P})$ bezüglich der Parameter zu finden. Da diese Berechnungen meist analytisch nicht möglich oder zu aufwändig sind, kommen hier üblicherweise numerische Verfahren zum Einsatz, die das Minimierungsproblem lösen sollen.

Durch Nichtlinearität kann es dabei jedoch vorkommen, dass die Funktion mehrere (lokale) Minima aufweist, allerdings ist nur das globale Minimum gesucht. Da viele numerische Verfahren, insbesondere die Gradientenverfahren, iterativ arbeiten, ist für diese ein möglichst guter Startwert in der Nähe des globalen Minimums Voraussetzung für ein gutes Identifikationsergebnis. Liegt kein Vorwissen über die Parameter vor, wird häufig zunächst eine sogenannte Gittersuche im Parameterraum durchgeführt, bei der die quadratische Gütefunktion $J_{\text{NLS}}(\mathbf{P})$ an den Kreuzungspunkten des Gitters im Parameterraum ausgewertet wird. Als Startwert wird dann die Parameterkombination gewählt, für die die Gütefunktion den geringsten Wert angenommen hat.

Die wohl gebräuchlichsten Arten der numerischen Minimumsuche für das quadratische Gütemaß (2.47), in welches die zu optimierenden Parameter nichtlinear eingehen, sind das *Gauß-Newton-Verfahren* (nach Carl Friedrich Gauß und Isaac Newton²⁵) und dessen Weiterentwicklung, der *Levenberg-Marquardt-Algorithmus* (nach Kenneth Levenberg²⁶ und Donald Marquardt²⁷). Das Gauß-Newton-Verfahren ist dabei eine speziell auf das Gütemaß (2.47) angepasste Variante des Newton-Verfahrens, die ohne die zweiten Ableitungen auskommt [Nel01].

Beim Levenberg-Marquardt-Algorithmus wird noch ein zusätzlicher Term bei der iterativen Berechnung des Schätzwerts verwendet, der für eine höhere Stabilität sorgt. Über einen wählbaren Parameter in diesem Term kann das Verhalten des Algorithmus zwischen Gradientenabstieg entlang des stärksten Abfalls und dem Gauß-Newton-Verfahren variiert werden. Somit werden durch eine geeignete Mitführung des Parameters während der iterativen Optimierung die Nachteile des Gauß-

²⁵Sir Isaac Newton, * 4. Januar 1643 in Woolsthorpe-by-Colsterworth, England, † 31. März 1727 in London; Physiker, Mathematiker, Astronom, Alchemist, Philosoph und Verwaltungsbeamter; Inhaber des Lucasischen Lehrstuhls an der Universität Cambridge; „Fellow“ und Präsident der Royal Society, ausländisches Mitglied der Pariser Académie des sciences; gilt als einer der größten Wissenschaftler aller Zeiten

²⁶Kenneth Levenberg veröffentlichte 1944 den Artikel [Lev44] als Mitarbeiter des Americans' Frankford Army Arsenal, der jedoch kaum Beachtung fand [Dav93].

²⁷Dr. Donald W. Marquardt, * 13. März 1929 in New York, † 5. Juli 1997; veröffentlichte den Artikel [Mar63] als Mitarbeiter von DuPont, der aufgrund einer Verbesserung im Detail und der Verfügbarkeit des Algorithmus als Code im Gegensatz zu Levenbergs Artikel große Beachtung fand [Dav93, Hah95].

Newton-Verfahrens bei größerer Entfernung zum Optimum durch den Gradientenabstieg vermieden, während nahe beim Optimum die hohe Güte des Gauß-Newton-Verfahrens genutzt werden kann. Eine detailliertere Beschreibung der Funktionsweisen des Gauß-Newton-Verfahrens und des Levenberg-Marquardt-Algorithmus kann beispielsweise in [Nel01] nachgelesen werden.

Der Levenberg-Marquardt-Algorithmus kommt auch häufig bei der Anpassung der Gewichte und Schwellwerte eines MLPs, dem sogenannten Training, zum Einsatz [Nel01], so auch im Rahmen dieser Arbeit.

2.2.4 Maximum-Likelihood-Schätzung

Die bisher betrachteten Verfahren zur Parameterschätzung haben alle eine spezielle Gütefunktion vorausgesetzt, in die der Fehler zwischen Modell und Messdaten quadratisch eingeht. Einen anderen Ansatz verfolgt die ebenfalls sehr verbreitete *Maximum-Likelihood-Methode (ML)*, welche sich aus statistischen Überlegungen ergibt. Die Methode geht ebenfalls auf Carl Friedrich Gauß zurück, wurde aber erst durch die Arbeiten von Ronald Aylmer Fisher²⁸ populär.

Der ML-Schätzer gehört zur Klasse der Bayes-Schätzer (benannt nach Thomas Bayes²⁹) und kann als Spezialfall des Maximum-a-posteriori-Schätzers interpretiert werden, wenn eine Gleichverteilung der zu schätzenden Parameter (bzw. eine Normalverteilung mit unendlich großer Varianz) angenommen werden kann [KSW08].

Ausgangspunkt ist wiederum der Fehler zwischen Messungen und Modell

$$\mathbf{e}_i = \mathbf{y}_{M,i} - \mathbf{y}_{S,i} = \mathbf{y}_i - \mathbf{f}(\mathbf{m}_i, \mathbf{P}) \quad (2.48)$$

mit dem Datenvektor \mathbf{m} , der bei dynamischen Systemen neben den Eingangsgrößen auch vergangene Ausgangsgrößen enthält, sowie den Modellparametern \mathbf{P} und der Modellfunktion $\mathbf{f}(\cdot)$. Betrachtet wird nun die Dichtefunktion dieses Fehlers, die auch als Dichtefunktion der Ausgangsgrößen unter der Bedingung der Messdaten in Abhängigkeit der Parameter aufgefasst werden kann, da das Modell keine stochastischen Anteile enthält [Lju99]:

$$p_{\mathbf{e}_i}(\mathbf{a}; \mathbf{P}) = p_{\mathbf{y}_i}(\mathbf{a} | \mathbf{m}_i; \mathbf{P}). \quad (2.49)$$

²⁸Sir Ronald Aylmer Fisher, * 17. Februar 1890 in London, † 29. Juli 1962 in Adelaide; theoretischer Biologe, Genetiker, Evolutionstheoretiker und Statistiker; Professor am University College London und in Cambridge; „Fellow“ der Royal Society; einer der bedeutendsten Statistiker, die viele Grundlagen der modernen statistischen Verfahren legte

²⁹Thomas Bayes, * um 1702 in London, † 17. April 1761 in Tunbridge Wells, England; Mathematiker und Pfarrer; „Fellow“ der Royal Society

Wie bisher auch werden die Fehler \mathbf{e}_i für $i = 1, \dots, N$ als unabhängig verteilt angenommen. Damit ergibt sich die sogenannte Likelihood-Funktion als Produkt der einzelnen Verteilungsfunktionen:

$$\mathcal{L}(\mathbf{P}) = p_{\mathbf{Y}}(\mathbf{Y}|\mathbf{M}_f; \mathbf{P}) = \prod_{i=1}^N p_{\mathbf{e}_i}(\mathbf{y}_i - \mathbf{f}(\mathbf{m}_i, \mathbf{P}); \mathbf{P}). \quad (2.50)$$

Die Matrizen \mathbf{Y} und \mathbf{M}_f sind dabei wie \mathbf{Y} und \mathbf{U}_g in der Gleichung (2.34) aufgebaut, wobei sich bei \mathbf{M}_f die Spalten analog zu \mathbf{U}_g in (2.34) als Funktionswerte $\mathbf{f}(\mathbf{m}_i, \mathbf{P})$ ergeben. Ihre Verwendung als Index oder Argument in der Dichtefunktion ist eine abkürzende Schreibweise für die Verteilung aller N Messungen, die sich durch die Unabhängigkeit als Produkt der einzelnen Verteilungen schreiben lässt.

Die Idee des ML-Schätzers ist es, die Parameter \mathbf{P} so zu wählen, dass die Likelihood-Funktion $\mathcal{L}(\mathbf{P})$ maximal wird, also die gemessenen Ausgangsgrößen die höchste Wahrscheinlichkeit haben, mit dem Modell übereinzustimmen:

$$\hat{\mathbf{P}}_{\text{ML}} = \arg \max_{\mathbf{P}} \{\mathcal{L}(\mathbf{P})\}. \quad (2.51)$$

Man findet in der Literatur, beispielsweise in den Herleitungen der statistischen 4SID-Methode (vgl. Kapitel 3.4), auch die Herangehensweise an die ML-Schätzung über $p_{\mathbf{Y}, \mathbf{M}_f}(\mathbf{a}; \mathbf{P})$, also die gemeinsame Verteilung von \mathbf{Y} und \mathbf{M}_f . Mithilfe der Regel für die Berechnung bedingter Dichten ergibt sich derselbe Schätzwert, da die Verteilung der Daten \mathbf{M}_f nicht von den Parametern abhängt:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{P}}_{\text{ML}} &= \arg \max_{\mathbf{P}} \{p_{\mathbf{Y}, \mathbf{M}_f}(\mathbf{Y}, \mathbf{M}_f; \mathbf{P})\} = \arg \max_{\mathbf{P}} \{p_{\mathbf{Y}}(\mathbf{Y}|\mathbf{M}_f; \mathbf{P}) p_{\mathbf{M}_f}(\mathbf{M}_f)\} \\ &= \arg \max_{\mathbf{P}} \{p_{\mathbf{Y}}(\mathbf{Y}|\mathbf{M}_f; \mathbf{P})\} = \arg \max_{\mathbf{P}} \{\mathcal{L}(\mathbf{P})\}. \end{aligned} \quad (2.52)$$

Für die Anwendung des ML-Schätzers sind generell keine weiteren Einschränkungen der Modellfunktion oder der Verteilungsfunktion des Ausgangsfehlers notwendig, allerdings kann auch die Komplexität der notwendigen Berechnungen beträchtlich sein. Häufig wird daher angenommen, dass der Ausgangsfehler ein zentrierter (d. h. mittelwertfreier) normalverteilter ergodischer Prozess ist. Diese Annahme rechtfertigt sich in praktischen Anwendungen durch die Verallgemeinerung des zentralen Grenzwertsatzes der Wahrscheinlichkeitstheorie [JW00, Ré79], nachdem die Überlagerung vieler verschiedener stochastischer Prozesse gegen eine mittelwertfreie Normalverteilung strebt (vgl. auch [Li07, Nel01]). Die Ergodizität wird üblicherweise ohne Nachweis angenommen (Ergodenhypothese, vgl. z. B. [JW00]).

Damit stellt die zu maximierende Likelihood-Funktion eine multivariate Normalverteilung mit $\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{Y}} = \mathbf{0}$ und $\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{e}_i} = \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{e}}$ dar. Um diese zu maximieren, wird üblicher-

weise die logarithmierte Likelihood-Funktion (Log-Likelihood-Funktion) betrachtet, da diese durch die strenge Monotonie des Logarithmus das Maximum an derselben Stelle aufweist wie die eigentlich interessierende Likelihood-Funktion:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{P}}_{\text{ML}} &= \arg \max_{\mathbf{P}} \{ \mathcal{L}(\mathbf{P}) \} \\
&= \arg \max_{\mathbf{P}} \left\{ \frac{1}{\prod_{i=1}^N \sqrt{(2\pi)^q \det(\boldsymbol{\Sigma}_e)}} e^{-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (\mathbf{y}_i - \mathbf{f}(\mathbf{m}_i, \mathbf{P}))^T \boldsymbol{\Sigma}_e^{-1} (\mathbf{y}_i - \mathbf{f}(\mathbf{m}_i, \mathbf{P}))} \right\} \\
&= \arg \max_{\mathbf{P}} \{ \ln \mathcal{L}(\mathbf{P}) \} \\
&= \arg \max_{\mathbf{P}} \left\{ \ln ((2\pi)^q \det(\boldsymbol{\Sigma}_e))^{-\frac{N}{2}} \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (\mathbf{y}_i - \mathbf{f}(\mathbf{m}_i, \mathbf{P}))^T \boldsymbol{\Sigma}_e^{-1} (\mathbf{y}_i - \mathbf{f}(\mathbf{m}_i, \mathbf{P})) \right\}. \quad (2.53)
\end{aligned}$$

Die Summe im Schätzwert (2.53) kann mithilfe der Spurfunktion sowie der Matrizen \mathbf{Y} und \mathbf{M}_f umgeschrieben werden zu

$$\sum_{i=1}^N (\mathbf{y}_i - \mathbf{f}(\mathbf{m}_i, \mathbf{P}))^T \boldsymbol{\Sigma}_e^{-1} (\mathbf{y}_i - \mathbf{f}(\mathbf{m}_i, \mathbf{P})) = \text{spur} \left\{ (\mathbf{Y} - \mathbf{M}_f)^T \boldsymbol{\Sigma}_e^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{M}_f) \right\}, \quad (2.54)$$

womit sich für den Schätzwert unter Aufspaltung des Produkts im Argument des Logarithmus im ersten Term die folgende Gleichung ergibt:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{P}}_{\text{ML}} &= \arg \max_{\mathbf{P}} \left\{ -\frac{Nq}{2} \ln(2\pi) - \frac{N}{2} \ln(\det(\boldsymbol{\Sigma}_e)) \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{2} \text{spur} \left\{ (\mathbf{Y} - \mathbf{M}_f)^T \boldsymbol{\Sigma}_e^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{M}_f) \right\} \right\}. \quad (2.55)
\end{aligned}$$

Häufig wird auch das zugehörige Minimierungsproblem betrachtet, bei welchem die Log-Likelihood-Funktion mit -1 multipliziert wird:

$$\hat{\mathbf{P}}_{\text{ML}} = \arg \max_{\mathbf{P}} \{ \ln \mathcal{L}(\mathbf{P}) \} = \arg \min_{\mathbf{P}} \{ -\ln \mathcal{L}(\mathbf{P}) \}. \quad (2.56)$$

Ist die Annahme der Normalverteilung erfüllt, so stellt der ML-Schätzer einen asymptotisch effizienten Minimum-Varianz-Schätzer dar, d. h. die Varianz der geschätzten Parameter ist die minimal mögliche für den verwendeten Datensatz und die Modellannahmen, und die geschätzten Parameter sind asymptotisch erwartungstreu.

Verwendet man den ML-Schätzer, um den Mittelwert und die Varianz einer normalverteilten Zufallsvariablen aus einer Stichprobe zu schätzen, so erhält man für den

Stichprobenmittelwert die Formel

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_{\xi} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \boldsymbol{\xi}(k) \quad (2.57)$$

und die Berechnungsvorschrift

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\xi} &= \hat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\xi\xi} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (\boldsymbol{\xi}(k) - \hat{\boldsymbol{\mu}}_{\xi})(\boldsymbol{\xi}(k) - \hat{\boldsymbol{\mu}}_{\xi})^T \\ &= \frac{1}{N} (\boldsymbol{\Xi} - [\hat{\boldsymbol{\mu}}_{\xi} \quad \cdots \quad \hat{\boldsymbol{\mu}}_{\xi}]) (\boldsymbol{\Xi} - [\hat{\boldsymbol{\mu}}_{\xi} \quad \cdots \quad \hat{\boldsymbol{\mu}}_{\xi}])^T \end{aligned} \quad (2.58)$$

für die Stichprobenkovarianzmatrix (vgl. z. B. [And03]). Dieser ML-Schätzer für die Kovarianzmatrix ist im Allgemeinen nicht erwartungstreu.

Wird der ML-Schätzer verwendet, um die Parameter eines Modells nach Definition 2.7, das linear in diesen Parametern ist, zu schätzen, so lässt sich zeigen, dass unter der Annahme einer mittelwertfreien Normalverteilung des Ausgangsfehlers mit bekannter Varianz das Schätzergebnis dem des GLS-Schätzers (vgl. Abschnitt 2.2.1) entspricht. In diesem Fall gilt also $\mathbf{f}(\mathbf{m}_i, \mathbf{P}) = \mathbf{P}\mathbf{g}(\mathbf{u}_i)$, und es gehen anstelle der Daten \mathbf{M}_f , die auch vergangene Ausgangsgrößen enthalten, nur die nichtlinear abgebildeten Eingangsgrößen \mathbf{U}_g in die zu maximierende Likelihood-Funktion ein:

$$\hat{\mathbf{P}}_{\text{ML}} = \arg \max_{\mathbf{P}} \left\{ -\frac{N}{2} \ln((2\pi)^n \det(\boldsymbol{\Sigma}_e)) - \frac{1}{2} \text{spur} \left\{ (\mathbf{Y} - \mathbf{P}\mathbf{U}_g)^T \boldsymbol{\Sigma}_e^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{P}\mathbf{U}_g) \right\} \right\}. \quad (2.59)$$

Nutzt man aus, dass bei konstanter Varianz der erste Summand der Likelihood-Funktion konstant ist, so ergibt sich für die Parameterschätzung

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{P}}_{\text{ML}} &= \arg \max_{\mathbf{P}} \left\{ -\text{spur} \left\{ (\mathbf{Y} - \mathbf{P}\mathbf{U}_g)^T \boldsymbol{\Sigma}_e^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{P}\mathbf{U}_g) \right\} \right\} \\ &= \arg \min_{\mathbf{P}} \left\{ \text{spur} \left\{ (\mathbf{Y} - \mathbf{P}\mathbf{U}_g)^T \boldsymbol{\Sigma}_e^{-1} (\mathbf{Y} - \mathbf{P}\mathbf{U}_g) \right\} \right\} \\ &= \arg \min_{\mathbf{P}} \{ J_{\text{GLS}}(\mathbf{P}) \} = \hat{\mathbf{P}}_{\text{GLS}}. \end{aligned} \quad (2.60)$$

Entsprechend sind dann für die zusätzliche Annahme unabhängig verteilter Elemente des Ausgangsfehlervektors der WLS-Schätzer (2.38) sowie für identisch und unabhängig verteilte Ausgangsfehler der gewöhnliche LS-Schätzer (2.37) identisch zum ML-Schätzer (2.59).

Ist die für alle Messungen als gleich angenommene Kovarianzmatrix der Normalverteilung bei der Schätzung der Parameter ebenfalls unbekannt, so können mit der ML-Methode zunächst ein Schätzwert für die Parameter und damit anschließend

der Schätzwert für die Kovarianzmatrix berechnet werden [And03]. Ausgangspunkt für diese Betrachtung ist ebenfalls die Gleichung (2.59), jedoch mit unbekannter konstanter Kovarianzmatrix Σ_e . Der erwartungstreue ML-Schätzwert $\hat{\mathbf{P}}_{\text{ML}}$ der Parameter ergibt sich dann ebenfalls identisch zum LS-Schätzwert $\hat{\mathbf{P}}_{\text{LS}}$ aus der Gleichung (2.37). Der ML-Schätzwert für die Kovarianzmatrix berechnet sich nach der Formel

$$\begin{aligned}\hat{\Sigma}_{e,\text{ML}} &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\mathbf{y}_i - \hat{\mathbf{P}}_{\text{ML}} \mathbf{g}(\mathbf{u}_i) \right) \left(\mathbf{y}_i - \hat{\mathbf{P}}_{\text{ML}} \mathbf{g}(\mathbf{u}_i) \right)^{\text{T}} \\ &= \left(\mathbf{Y} - \hat{\mathbf{P}}_{\text{ML}} \mathbf{U}_g \right) \left(\mathbf{Y} - \hat{\mathbf{P}}_{\text{ML}} \mathbf{U}_g \right)^{\text{T}} .\end{aligned}\quad (2.61)$$

Dies entspricht der normalen Stichprobenkovarianz des Ausgangsfehlers unter Verwendung der ML-Parameterschätzwerte und stellt einen verzerrten Schätzwert dar. Einen erwartungstreuen Schätzer für die Kovarianzmatrix erhält man hier durch Multiplikation des Schätzers (2.61) mit $\frac{N}{N-p_g}$, wobei p_g die Dimension des Vektors $\mathbf{g}(\cdot)$ und damit auch die Zahl der Spalten von \mathbf{P} darstellt.

Kapitel 3

Subspace-based State-Space System Identification

Der Begriff „Subspace-based State-Space System Identification“¹ (4SID) beschreibt eine spezielle Klasse von Black-Box-Identifikationsmethoden, die ein — üblicherweise zeitdiskretes — Zustandsraummodell des zu identifizierenden Systems schätzen. Häufig werden diese Methoden auch kurz mit „Subspace Identification“² bezeichnet, da Verfahren zur Schätzung anderer Modellformen als Zustandsraummodelle nur eine untergeordnete Rolle spielen und vergleichsweise selten in der Literatur zu finden sind.

Die 4SID-Methoden gehen auf die Realisierungstheorie (engl. „realization theory“) zurück, bei der das Ziel die Gewinnung („Realisierung“) eines minimalen deterministischen Zustandsraummodells aus den Impulsantworten eines LTI-Systems ist [See09, Vib95]. Ältere Ansätze, die von der Impulsantwort eines Systems ausgehen, werden in [Vib95] daher auch unter dem Begriff „realization-based 4SID“ zusammengefasst. Im Gegensatz dazu werden dort unter dem Namen „direct 4SID“ die Verfahren geführt, die als Basis Messdaten der Ein- und Ausgangsgrößen aus dem dynamischen Betrieb bei genügender Anregung (vgl. Abschnitt 2.2) verwenden. Nur auf diese moderneren, direkten 4SID-Methoden wird in diesem Kapitel näher eingegangen.

Der Großteil der 4SID-Verfahren wurde für LTI-Systeme entwickelt, auf die sich auch dieses Kapitel beschränkt. Diese stellen nicht-iterative Systemidentifikationsmethoden dar, da sie als Ergebnis aus den Messdaten nicht nur eine Schätzung für die Parameter des linearen Zustandsraummodells, sondern auch für dessen Ordnung liefern und damit auch die Struktur des linearen Systems identifizieren. Sie basieren

¹engl. für Unterraum-basierte Systemidentifikation in Zustandsraumdarstellung. Üblicherweise wird auch in der deutschsprachigen Literatur der englische Begriff verwendet.

²engl. für Unterraum-Identifikation. Auch bei der Kurzform wird in der deutschsprachigen Literatur meist der englische Begriff verwendet.

auf unterschiedlichen Herleitungen, nach denen sie sich in die drei Kategorien der geometrischen, statistischen und Prädiktor-basierten Verfahren einteilen lassen. Die am häufigsten in der Literatur zitierten 4SID-Algorithmen aus diesen Kategorien werden in diesem Kapitel vorgestellt.

Es existiert in der Literatur kein ausführlicher Vergleich der verschiedenen Methoden, der Verfahren aller drei Kategorien umfasst. Die Prädiktor-basierten Algorithmen sind erst in den letzten Jahren entstanden und deshalb in älteren Vergleichen nicht enthalten. Von einem der wenigen statistischen Verfahren, der „Canonical Variate Analysis“ (CVA), existiert auch eine geometrische Interpretation, die häufig ebenfalls unter dem Namen CVA anstelle der originalen statistischen Methode in Vergleichen herangezogen wird. Allerdings wurde bereits in [JSL01] gezeigt, dass sich die geometrische Variante zumindest in der praktischen Anwendung nicht identisch zum statistischen Algorithmus verhält, sondern schlechtere Ergebnisse liefern kann.

In diesem Kapitel ist daher ein ausführlicher Vergleich der Methoden zu finden. Dazu wird, nach der Beschreibung einiger mathematischer Grundlagen und der verwendeten Nomenklatur im Abschnitt 3.1, ein allgemeines Schema vorgestellt, in welchem sich der Ablauf aller betrachteter 4SID-Verfahren wiederfindet. Neben dem Ablaufschema an sich werden im Abschnitt 3.2 auch die einzelnen Schritte mit verschiedenen Realisierungsvarianten erläutert. Auf dieser Basis erfolgt dann, beginnend im Abschnitt 3.3 mit den geometrischen Verfahren, die Betrachtung der verschiedenen 4SID-Verfahren unterteilt in die oben beschriebenen drei Kategorien. Nach den statistischen Verfahren im Abschnitt 3.4 folgt im Abschnitt 3.5 die Betrachtung der Prädiktor-basierten Verfahren als jüngste Vertreter der 4SID-Methoden.

Im Abschnitt 3.6 werden dann ein Vergleich der Verfahren auf Basis ihrer Eigenschaften sowie mögliche Erweiterungen präsentiert. Abgeschlossen wird das Kapitel mit einer kurzen Zusammenfassung im Abschnitt 3.8. Mathematische Beweise und Berechnungen einzelner Teile der Herleitungen, die nicht direkt dem Verständnis der Verfahren dienen, sind aus Gründen der Übersichtlichkeit dieses Kapitels im Anhang A zu finden.

3.1 Mathematische Grundlagen und Nomenklatur

In der Literatur zu den 4SID-Algorithmen findet man unterschiedliche Bezeichnungen oder Formelzeichen für identische Größen. Auch das Gegenteil, gleiche Bezeichnungen oder Formelzeichen für nicht identische Größen, kommt in wenigen Fällen vor. Daher ist es notwendig, eine einheitliche Nomenklatur einzuführen, um das Ziel dieses Kapitels — eine möglichst kompakte und vergleichbare Darstellung der verschiedenen 4SID-Algorithmen und deren Herleitung — erreichen zu können.

Für alle weiteren Betrachtungen in diesem Kapitel wird, sofern nicht explizit andere Voraussetzungen getroffen werden, von einem vollständig steuer- und beobachtbaren LTI-System ausgegangen, das durch ein zeitdiskretes Zustandsraummodell (vgl. Definition 2.13) beschrieben werden soll. In der 4SID-Literatur wird dies auch als minimales System bezeichnet [See09, VV07]. Außerdem wird stets von einer genügenden Anregung ausgegangen (vgl. Abschnitt 2.2 sowie [See09]). Wären diese Voraussetzungen nicht erfüllt, so könnte das System nur teilweise identifiziert werden, was jedoch an den Daten nicht zu erkennen wäre.

3.1.1 Parameter- und Datenmatrizen

Eine Gemeinsamkeit aller in dieser Arbeit betrachteter 4SID-Algorithmen ist die Blockverarbeitung der Daten. Für diesen Zweck werden die Daten in speziellen Datenmatrizen aufbereitet, deren Aufbau sich je nach Verfahren zumindest in den ursprünglichen Herleitungen unterscheidet. Für die vorliegende Arbeit wird versucht, möglichst wenig verschiedene Notationen zu verwenden, um den Vergleich der Algorithmen zu erleichtern. Die Beschreibungen der 4SID-Verfahren sind daher gegenüber den ursprünglichen Beschreibungen an die hier gewählte Notation angepasst.

Die einfachste Art, die Messdaten der Ein- und Ausgangsgrößen eines zu identifizierenden Systems aufzubereiten, ist das spaltenweise Zusammenfügen der Messdatenvektoren zu je einer Matrix der Ein- und Ausgangsgrößen, wie es bereits im Abschnitt 2.2 für die dort betrachteten Identifikationsverfahren praktiziert wurde. Damit ergeben sich für die im Folgenden stets angenommene Messreihe der Länge N der Ein- und Ausgangsgrößen $(\mathbf{u}(1), \mathbf{y}(1)), \dots, (\mathbf{u}(N), \mathbf{y}(N))$ die Matrizen

$$\mathbf{U} = [\mathbf{u}(1) \quad \dots \quad \mathbf{u}(N)] \quad \text{und} \quad \mathbf{Y} = [\mathbf{y}(1) \quad \dots \quad \mathbf{y}(N)] . \quad (3.1)$$

Bei allen 4SID-Algorithmen werden die zur Identifikation verwendeten Messdaten in sogenannte vergangene und zukünftige Daten aufgeteilt. Diese Sichtweise von Vergangenheit und Zukunft bezieht sich auf Zeitpunkte innerhalb des Messdatensatzes und wird mit den Indizes „p“ (für „past“) bzw. „f“ (für „future“) gekennzeichnet. Für den Vergangenheitshorizont ℓ_p und den Zukunftshorizont ℓ_f ergeben sich damit für den betrachteten aktuellen Zeitpunkt k die Matrizen

$$\mathbf{U}_p(k) = [\mathbf{u}(k - \ell_p + 1) \quad \dots \quad \mathbf{u}(k)] , \quad (3.2a)$$

$$\mathbf{U}_f(k) = [\mathbf{u}(k + 1) \quad \dots \quad \mathbf{u}(k + \ell_f)] , \quad (3.2b)$$

$$\mathbf{Y}_p(k) = [\mathbf{y}(k - \ell_p + 1) \quad \dots \quad \mathbf{y}(k)] , \quad (3.2c)$$

$$\mathbf{Y}_f(k) = [\mathbf{y}(k + 1) \quad \dots \quad \mathbf{y}(k + \ell_f)] . \quad (3.2d)$$

Zu diesen Daten gehören die bei der Identifikation unbekanntem Zustandsfolgen

$$\mathbf{X}_p(k) = [\mathbf{x}(k - \ell_p + 1) \quad \cdots \quad \mathbf{x}(k)] , \quad (3.3a)$$

$$\mathbf{X}_f(k) = [\mathbf{x}(k + 1) \quad \cdots \quad \mathbf{x}(k + \ell_f)] . \quad (3.3b)$$

In der 4SID-Literatur finden sich auch andere als die hier verwendeten Definitionen für Vergangenheits- und Zukunftsmatrizen, beispielsweise mit umgekehrter Reihenfolge der Spalten der Vergangenheitsmatrizen. Auch die Betrachtung einer gemeinsamen Matrix für vergangene Ein- und Ausgangsmesswerte ist in der Literatur zu finden.

Die Mehrheit der betrachteten 4SID-Algorithmen kann mit den eben vorgestellten Matrizen nicht übersichtlich formuliert werden, sondern benötigt etwas aufwändiger aufbereitete Messdaten. Dazu werden zunächst zwei miteinander verwandte Matrixstrukturen eingeführt, die *Toeplitz-Matrizen* (benannt nach Otto Toeplitz³) und die *Hankel-Matrizen* (benannt nach Hermann Hankel⁴) [Ioc82]. Beide Strukturen haben gemeinsam, dass die Werte auf bestimmten Diagonalen der rechteckigen Matrix identisch sind, und dass sie durch die Angabe einer Zeile und Spalte definiert werden können.

Bei den Toeplitz-Matrizen haben jeweils die Elemente der Hauptdiagonale sowie die aller Nebendiagonalen von links oben nach rechts unten identische Werte. Anders ausgedrückt hängt der Wert eines Elements t_{ij} einer Toeplitz-Matrix $\mathbf{T} \in \mathbb{R}^{(n \times m)}$ nur von der Differenz $i - j$ ab, es gilt also mit $t_{ij} = t_{i-j}$ für die Toeplitz-Matrix

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} t_0 & t_{-1} & t_{-2} & \cdots & t_{-m+2} & t_{-m+1} \\ t_1 & t_0 & t_{-1} & \ddots & \ddots & t_{-m+2} \\ t_2 & t_1 & t_0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ t_{n-2} & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & t_{n-m-1} \\ t_{n-1} & t_{n-2} & \cdots & \cdots & t_{n-m+1} & t_{n-m} \end{bmatrix} . \quad (3.4)$$

Eine Toeplitz-Matrix lässt sich beispielsweise durch Angabe ihrer ersten (obersten) Zeile und ersten (linken) Spalte eindeutig definieren.

Im Gegensatz dazu haben bei Hankel-Matrizen jeweils die Elemente der Diagonale von rechts oben nach links unten identische Werte. Wie bei der Toeplitz-Matrix kann

³Otto Toeplitz, * 1. August 1881 in Breslau, † 15. Februar 1940 in Jerusalem; Mathematiker; Professor in Kiel

⁴Hermann Hankel, * 14. Februar 1839 in Halle (Saale), † 29. August 1873 in Schramberg; Mathematiker; studierte u. a. bei Möbius, Riemann, Weierstraß und Kronecker; außerordentlicher Professor in Leipzig, Professor in Erlangen und Tübingen

auch bei einer Hankel-Matrix $\mathbf{H} \in \mathbb{R}^{(n \times m)}$ der Wert des Elements h_{ij} über seinen Zeilen- und Spaltenindex berechnet werden, und es gilt mit $h_{ij} = h_{i+j-m-1}$ für die Hankel-Matrix

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} h_{-m+1} & h_{-m+2} & h_{-m+3} & \cdots & h_{-1} & h_0 \\ h_{-m+2} & h_{-m+3} & h_{-m+4} & \ddots & \ddots & h_1 \\ h_{-m+3} & h_{-m+4} & h_{-m+5} & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ h_{-m+n-1} & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & h_{n-2} \\ h_{n-m} & h_{n-m+1} & \cdots & \cdots & h_{n-2} & h_{n-1} \end{bmatrix}. \quad (3.5)$$

Eine Hankel-Matrix lässt sich z. B. durch Angabe ihrer ersten (obersten) Zeile und letzten (rechten) Spalte eindeutig definieren.

Im Folgenden werden diese Strukturen für Blockmatrizen benötigt. Dabei stellen die einzelnen Elemente der Toeplitz- oder Hankel-Matrix keine Skalare, sondern Vektoren oder Matrizen mit festen Dimensionen dar. Die Hankel- bzw. Toeplitz-Struktur bezieht sich dann jeweils nur auf die Blockelemente, im Allgemeinen haben diese Block-Hankel- bzw. Block-Toeplitz-Matrizen auf die skalaren Elemente bezogen keine Hankel- bzw. Toeplitz-Struktur mehr.

Von der Block-Toeplitz-Matrix wird außerdem ein Spezialfall einer unteren Dreiecksmatrix betrachtet, bei dem alle Blockelemente der Matrix mit $i - j < 0$ identisch der Nullmatrix passender Dimension sind. Auch diese Matrix stellt auf die skalaren Elemente bezogen im Allgemeinen weder eine Toeplitz- noch eine untere Dreiecksmatrix dar.

Mit den nun eingeführten, speziell strukturierten Blockmatrixformen können die weiteren benötigten Daten- und Parametermatrizen definiert werden. Die Eingangsdaten werden in einer Block-Hankel-Matrix aufbereitet, wobei sich der Index „ $a|b$ “ auf die erste und letzte verwendete Blockzeile bezieht:

$$\mathbf{U}_{1|2i} := \begin{bmatrix} \mathbf{u}(1) & \mathbf{u}(2) & \cdots & \mathbf{u}(j) \\ \mathbf{u}(2) & \mathbf{u}(3) & \cdots & \mathbf{u}(j+1) \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{u}(2i) & \mathbf{u}(2i+1) & \cdots & \mathbf{u}(2i+j-1) \end{bmatrix}. \quad (3.6)$$

Die Block-Hankel-Matrix $\mathbf{Y}_{1|2i}$ der Ausgangsdaten ist analog zusammengesetzt.

Beim Aufbau dieser Block-Hankel-Matrizen aus den Messdaten stehen die zwei ganzzahligen Parameter i und j zur Verfügung, die die Größe der zu verarbeitenden Datenmatrizen bestimmen. Der Parameter i bestimmt dabei die halbe Blockzei-

lenanzahl, der Parameter j die (Block-)Spaltenanzahl⁵. Bei der Wahl der beiden Parameter muss darauf geachtet werden, dass die halbe Blockzeilenanzahl größer oder gleich der Ordnung n des zu identifizierenden Systems ist. Da diese Ordnung a-priori unbekannt ist, muss der Parameter i also groß genug gewählt werden. Andererseits muss für ein gutes Identifikationsergebnis die Spaltenzahl j so groß wie möglich sein, auf jeden Fall jedoch deutlich größer als i . Im Folgenden wird stets davon ausgegangen, dass $i > n$ und $j \gg i$ gilt.

Die Wahl der Parameter i und j hat somit sowohl auf das Identifikationsergebnis als auch auf den benötigten Speicher- und Rechenaufwand Einfluss, außerdem kann sie natürlich nicht unabhängig von der zur Verfügung stehenden Anzahl N an Messpunkten in der Messreihe erfolgen. Fordert man die Verwendung aller N aufgenommenen Datenpunkte der betrachteten Messreihe und damit die Verwendung aller zur Verfügung stehenden Messinformationen, was dem üblichen Anwendungsfall entspricht, so reduziert sich die Wahl des Benutzers auf den Parameter i . Die zu verwendende größtmögliche Spaltenanzahl j wird dann über die Bedingung $j = N - 2i + 1$ berechnet.

Auch die Block-Hankel-Datenmatrizen (3.6) werden, wie schon die einfachen Datenmatrizen, für die Verwendung in den 4SID-Algorithmen in sogenannte vergangene und zukünftige Daten strukturiert, und zwar für die Zeitpunkte der i -ten Blockzeile. Beispielhaft wird für die Block-Hankel-Matrix $\mathbf{U}_{1|2i}$ diese Aufteilung in eine Vergangenheitsmatrix $\mathbf{U}_{1|i}$ und eine Zukunftsmatrix $\mathbf{U}_{i+1|2i}$ betrachtet:

$$\mathbf{U}_{1|2i} := \begin{bmatrix} \mathbf{U}_{1|i} \\ \mathbf{U}_{i+1|2i} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{u}(1) & \dots & \mathbf{u}(j) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{u}(i) & \dots & \mathbf{u}(i+j-1) \\ \mathbf{u}(i+1) & \dots & \mathbf{u}(i+j) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{u}(2i) & \dots & \mathbf{u}(2i+j-1) \end{bmatrix}. \quad (3.7)$$

Analog wird die Block-Hankel-Matrix $\mathbf{Y}_{1|2i}$ in eine Vergangenheitsmatrix $\mathbf{Y}_{1|i}$ und eine Zukunftsmatrix $\mathbf{Y}_{i+1|2i}$ aufgeteilt. Für die Innovationen und das Rauschen in den verschiedenen Zustandsraumdarstellungen (vgl. Abschnitt 2.1.2) werden entsprechende Matrizen definiert.

Um Verwechslungen mit den zuvor definierten einfachen Vergangenheits- und Zukunftsmatrizen (3.2) zu vermeiden, werden hier nicht die Indizes „p“ bzw. „f“ bei den Block-Hankel-Matrizen verwendet. Außerdem ist zu beachten, dass trotz der Benennung dieselben Datenvektoren in den Vergangenheits- und Zukunftsmatrizen

⁵Da hier Vektoren als Block-Elemente betrachtet werden, entspricht die Block-Spaltenanzahl auch der tatsächlichen Spaltenanzahl dieser Datenmatrizen.

vorkommen, allerdings in unterschiedlichen Spalten und damit für unterschiedliche betrachtete Zeitpunkte.

Damit in den Algorithmen eine Regression für die Parametermatrizen durchgeführt werden kann, werden außerdem die entsprechenden Vergangenheits- und Zukunftsmatrizen für den nächsten Zeitschritt $i + 1$ benötigt. Für die Eingangsdaten ergeben sich diese zu

$$\mathbf{U}_{1|2i} = \left[\begin{array}{c} \mathbf{U}_{1|i+1} \\ \mathbf{U}_{i+2|2i} \end{array} \right]. \quad (3.8)$$

Auch hier gelten wieder die analogen Definitionen für $\mathbf{Y}_{1|i+1}$ und $\mathbf{Y}_{i+2|2i}$ und die stochastischen Signale.

Neben den bekannten Messdaten werden die zu Beginn des Identifikationsvorgangs unbekannt Zustandsvektoren zu den betrachteten Zeitpunkten ebenfalls in einer Matrix \mathbf{X}_i zusammengefasst:

$$\mathbf{X}_i := \left[\mathbf{x}(i) \quad \mathbf{x}(i+1) \quad \cdots \quad \mathbf{x}(i+j-1) \right]. \quad (3.9)$$

Diese Matrix hat, wie auch die Block-Hankel-Datenmatrizen, stets j Spalten. Der Index gibt die Blockzeile der Hankel-Datenmatrizen an, zu welcher die Zustandsfolge \mathbf{X}_i gehört.

Auch die zu ermittelnden Parameter werden in Blockmatrizen zusammengefasst. Die *erweiterte Beobachtbarkeitsmatrix* $\mathbf{Q}_{B,i}$ ist definiert als

$$\mathbf{Q}_{B,i} := \left[\begin{array}{c} \mathbf{C} \\ \mathbf{CA} \\ \vdots \\ \mathbf{CA}^{i-1} \end{array} \right]. \quad (3.10)$$

Sie wird deshalb als erweitert bezeichnet, da von einer Wahl des Parameters $i > n$ ausgegangen wird. Dadurch enthält die Matrix mehr Blockzeilen als in der üblichen Definition der Beobachtbarkeitsmatrix, bei der die Blockzeilenanzahl genau der Systemordnung n entspricht (vgl. z. B. [Lun08b, Föl94]). Durch die vorausgesetzte Beobachtbarkeit hat diese Matrix den vollen Rang n .

Die *umgekehrte, erweiterte Steuerbarkeitsmatrix* $\mathbf{Q}_{S,i}^{\text{determ}}$ hat wegen der vorausgesetzten Steuerbarkeit ebenfalls den Rang n und ist definiert als

$$\mathbf{Q}_{S,i}^{\text{determ}} := \left[\mathbf{A}^{i-1} \mathbf{B} \quad \mathbf{A}^{i-2} \mathbf{B} \quad \cdots \quad \mathbf{B} \right]. \quad (3.11)$$

Zusätzlich zur Erweiterung um $i - n$ Blockspalten analog zur erweiterten Beobacht-

barkeitsmatrix ist bei der umgekehrten Steuerbarkeitsmatrix die Reihenfolge der Blockspalten im Vergleich zur üblichen Definition absteigend statt aufsteigend in den Potenzen der Dynamikmatrix \mathbf{A} . Der Zusatz „determ“ für „deterministisch“ wird zur Differenzierung von der sehr ähnlich aufgebauten Matrix

$$\mathbf{Q}_{S,i}^{\text{stoch}} := [\mathbf{A}^{i-1} \mathbf{K} \quad \mathbf{A}^{i-2} \mathbf{K} \quad \cdots \quad \mathbf{K}] \quad (3.12)$$

verwendet, wobei „stoch“ für „stochastisch“ steht und \mathbf{K} die Kalman-Matrix ist (vgl. Abschnitt 2.1.2). Die Wahl dieser Bezeichnungen wird bei der Verwendung der Matrizen in den Subspace-Gleichungen im Abschnitt 3.2.1 klar.

Als letzte Blockparametermatrizen werden noch die Matrix

$$\mathbf{H}_i^{\text{determ}} := \begin{bmatrix} \mathbf{D} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{CB} & \mathbf{D} & \mathbf{0} & \ddots & \ddots & \mathbf{0} \\ \mathbf{CAB} & \mathbf{CB} & \mathbf{D} & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{CA}^{i-3} \mathbf{B} & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \mathbf{0} \\ \mathbf{CA}^{i-2} \mathbf{B} & \mathbf{CA}^{i-3} \mathbf{B} & \cdots & \cdots & \mathbf{CB} & \mathbf{D} \end{bmatrix} \quad (3.13)$$

und die Matrix

$$\mathbf{H}_i^{\text{stoch}} := \begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{CK} & \mathbf{I} & \mathbf{0} & \ddots & \ddots & \mathbf{0} \\ \mathbf{CAK} & \mathbf{CK} & \mathbf{I} & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{CA}^{i-3} \mathbf{K} & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \mathbf{0} \\ \mathbf{CA}^{i-2} \mathbf{K} & \mathbf{CA}^{i-3} \mathbf{K} & \cdots & \cdots & \mathbf{CK} & \mathbf{I} \end{bmatrix} \quad (3.14)$$

benötigt, welche jeweils eine untere Block-Dreieck-Toeplitz-Matrix darstellen. Beide Matrizen sind durch ihre letzte Zeile eindeutig gegeben. Sie enthalten die Parameter des zum Zustandsraum gehörenden ARX-Modells, was über eine entsprechende Umformung leicht nachgerechnet werden kann (vgl. Abschnitt 3.2.2)).

3.1.2 Matrixzerlegungen

Neben der Blockverarbeitung der Daten in speziell aufbereiteten Datenmatrizen stellt die Nutzung von Matrixzerlegungen zur Extraktion der benötigten Informa-

tionen aus den Datenmatrizen eine weitere Gemeinsamkeit aller 4SID-Algorithmen dar. Dabei spielt insbesondere die *Singulärwertzerlegung* eine herausragende Rolle:

Definition 3.1 (Singulärwertzerlegung):

Die Singulärwertzerlegung (SVD⁶) liefert für eine beliebige Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{(m \times n)}$ die Matrizen des Produkts

$$\mathbf{A} = \mathbf{M}\mathbf{S}\mathbf{N}^T. \quad (3.15)$$

Dabei sind die beiden Matrizen $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{(m \times m)}$ und $\mathbf{N} \in \mathbb{R}^{(n \times n)}$ orthogonal und für die sogenannte Singulärwertmatrix $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{(m \times n)}$ gilt

$$\mathbf{S} = \text{diag}(s_1, \dots, s_r, s_{r+1}, \dots, s_{\min\{m,n\}}) = \begin{bmatrix} s_1 & 0 & \cdots & 0 & \cdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots & \ddots \\ \vdots & \ddots & s_r & 0 & \ddots \\ 0 & \ddots & 0 & s_{r+1} = 0 & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{bmatrix} \quad (3.16)$$

mit $s_1 \geq \dots \geq s_r > s_{r+1} = \dots = s_{\min\{m,n\}} = 0$. Der Wert r stellt den Rang der Matrix \mathbf{A} dar.

Die Anzahl der nicht verschwindenden Singulärwerte, die positiv sind und in absteigender Reihenfolge auf der Hauptdiagonalen der Singulärwertmatrix stehen, entspricht also gerade dem Rang der Matrix \mathbf{A} .

Anmerkungen:

- Die Singulärwerte s_i der Matrix \mathbf{A} sind gleich der Quadratwurzel der Eigenwerte von $\mathbf{A}\mathbf{A}^T$ bzw. $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$.
- Geometrisch interpretiert stellen die Singulärwerte die Längen der Halbachsen eines Hyperellipsoids dar, auf den die Punkte des Zustandsraums mit dem Abstand eins zum Ursprung ($\|\mathbf{x}\|_2 = 1$) durch die Matrix \mathbf{A} mit $\mathbf{A}\mathbf{x}$ abgebildet werden [GL96].
- Die Spalten von \mathbf{M} sind die normierten Eigenvektoren von $\mathbf{A}\mathbf{A}^T$ und heißen *linke Singulärvektoren*, die Spalten von \mathbf{N} sind die normierten Eigenvektoren von $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ und heißen *rechte Singulärvektoren*.

⁶SVD steht für „singular value decomposition“ (engl. für Singulärwertzerlegung).

- Für die Pseudoinverse \mathbf{A}^\dagger gilt:

$$\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{N} \mathbf{S}^\dagger \mathbf{M}^\top \quad \text{mit} \quad \mathbf{S}^\dagger = \text{diag} \left(\frac{1}{s_1}, \dots, \frac{1}{s_r}, 0, \dots, 0 \right). \quad (3.17)$$

- Für quadratische Matrizen ($m = n$) gilt: $|\det(\mathbf{A})| = \prod_{i=1}^r s_i$.
- Die SVD gilt entsprechend auch für komplexe Matrizen; \mathbf{M} und \mathbf{N} sind dann unitäre Matrizen, die Singulärwerte sind stets reell.

Besonders interessant für viele Anwendungen, so auch für die 4SID, ist die im LS-Sinn optimale Rekonstruktionseigenschaft der Singulärwertzerlegung. Die Rekonstruktion \mathbf{A}_i der Matrix \mathbf{A} , die anhand der ersten i Singulärwerte sowie der jeweils ersten i Spalten der Matrizen \mathbf{M} und \mathbf{N} gemäß

$$\mathbf{A}_i = \underbrace{\mathbf{M} \begin{bmatrix} \mathbf{I} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}}_{=: \mathbf{M}_i} \underbrace{\text{diag}(s_1, \dots, s_i)}_{=: \mathbf{S}_i} \underbrace{[\mathbf{I} \quad \mathbf{0}]}_{=: \mathbf{N}_i^\top} \mathbf{N}^\top \quad (3.18)$$

berechnet wird, erfüllt die Bedingungen

$$\|\mathbf{A} - \mathbf{A}_i\|_{\text{F}}^2 = \text{spur} \{ (\mathbf{A} - \mathbf{A}_i)^\top (\mathbf{A} - \mathbf{A}_i) \} = \min_{\mathbf{X}} \|\mathbf{A} - \mathbf{X}\|_{\text{F}}^2 = \sum_{j=i+1}^r s_j^2 \quad (3.19)$$

und

$$\|\mathbf{A} - \mathbf{A}_i\|_2^2 = \min_{\mathbf{X}} \|\mathbf{A} - \mathbf{X}\|_2^2 = s_{i+1}^2 \quad (3.20)$$

für alle Matrizen \mathbf{X} , die den Rang kleiner oder gleich i haben [Abd07, GL96].

Aufgrund dieser Rekonstruktionseigenschaft sowie ihrer numerischen Stabilität und Genauigkeit findet die Singulärwertzerlegung beispielsweise in Modellreduktionsverfahren (z. B. [HAW03, OM96]) oder bei verlustbehafteten Kompressionsmethoden in der Bildverarbeitung (z. B. [Abd07]) Anwendung. Auch die Anwendung im Rahmen der 4SID-Algorithmen kann als Ordnungsreduktion aufgefasst werden (vgl. Abschnitt 3.2.3). Außerdem kann man bei Verwendung der 2-Norm die Singulärwertzerlegung zur numerischen Rangbestimmung verwenden. Der kleinste Singulärwert einer regulären Matrix stellt im Sinne der 2-Norm den Abstand zur Menge der Matrizen ohne Höchststrang dar (vgl. [GL96]). Überdies entspricht die SVD der *Hauptkomponentenanalyse* (PCA⁷) der in der zerlegten Matrix enthaltenen Daten (vgl. z. B. [Abd07, Lar97b]).

⁷PCA steht für „principal component analysis“ (engl. für Hauptkomponentenanalyse).

Eine spezielle Variante der Rangbestimmung wird in [Lar97b] zur geometrischen Interpretation der Singulärwertzerlegung eingeführt. Ausgangspunkt ist eine Matrix \mathbf{D} , die eine statische lineare Abbildung zwischen der Eingangsgröße \mathbf{u} und der Ausgangsgröße \mathbf{y} beschreibt (vgl. auch Definition 2.1):

$$\mathbf{y} = \mathbf{D}\mathbf{u} \quad \text{mit} \quad \mathbf{u} \in \mathbb{R}^p, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^q, \mathbf{D} \in \mathbb{R}^{q \times p}. \quad (3.21)$$

Gesucht wird nun unter Einhaltung der Gleichung (3.21) eine Zwischenvariable („Zustand“) $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^r$ mit unbekannter Dimension r sowie die zugehörigen Matrizen \mathbf{A} und \mathbf{C} mit

$$\mathbf{z} = \mathbf{A}\mathbf{u} \quad \text{und} \quad \mathbf{y} = \mathbf{C}\mathbf{z}. \quad (3.22)$$

Dabei soll der Zustand eine möglichst niedrige Ordnung haben, d. h. $r \rightarrow \min$.

Hieraus lässt sich alternativ zur üblichen Definition über die Zahl der linear unabhängigen Zeilen bzw. Spalten die folgende Definition für den Rang der Matrix \mathbf{D} ableiten:

Definition 3.2 (Rang der Matrix \mathbf{D} über die Zwischenvariable \mathbf{z}):

Der Rang der Matrix \mathbf{D} ist gegeben als die minimale Dimension r der Zwischenvariablen \mathbf{z} mit (3.22), die die Gleichung (3.21) erfüllt, also

$$\text{rg}(\mathbf{D}) := \min_{\mathbf{A}, \mathbf{C}} \{r\} \text{ mit (3.22) u. d. B. (3.21)}. \quad (3.23)$$

Dabei gelten $\mathbf{D} = \mathbf{C}\mathbf{A}$ und $\text{rg}(\mathbf{D}) \leq \min(p, q)$. Eine mögliche Lösung für \mathbf{z} , \mathbf{A} und \mathbf{C} kann mithilfe der SVD von \mathbf{D} bestimmt werden:

$$\mathbf{y} = \mathbf{D}\mathbf{u} = \mathbf{M}\mathbf{S}\mathbf{N}^T\mathbf{u}. \quad (3.24)$$

Wegen der Orthogonalität der Matrix \mathbf{M} kann diese Gleichung durch Multiplikation mit \mathbf{M}^T von links umgeformt werden zu

$$\underbrace{\mathbf{M}^T\mathbf{y}}_{=: \mathbf{h}} = \mathbf{S} \underbrace{\mathbf{N}^T\mathbf{u}}_{=: \mathbf{g}}. \quad (3.25)$$

Da die Multiplikation eines Vektors mit einer orthogonalen Matrix einer Drehung, Spiegelung oder Drehspiegelung des Koordinatensystems entspricht oder anders ausgedrückt eine längen- und winkeltreue Transformation des Koordinatensystems ist, stellen die Vektoren \mathbf{g} und \mathbf{h} die Vektoren \mathbf{u} bzw. \mathbf{y} jeweils bezüglich eines entsprechend transformierten Koordinatensystems dar.

Das Besondere an der Darstellung der beiden Vektoren in diesen beiden Koordinatensystemen ist die Tatsache, dass die durch \mathbf{D} gegebene Abbildungsvorschrift die

ersten r Komponenten von \mathbf{g} auf die entsprechende Komponente von \mathbf{h} abbildet, und zwar genau durch die Multiplikation mit dem entsprechenden Singulärwert. Dabei bezeichnet r die Anzahl der auftretenden Singulärwerte ungleich null. Alle weiteren Elemente von \mathbf{g} werden in den Ursprung des Koordinatensystems von \mathbf{h} abgebildet. Es gilt also

$$h_i = s_i g_i \quad \forall i = 1, \dots, r \quad \text{und} \quad h_j = 0 \quad \forall j = r + 1, \dots, q. \quad (3.26)$$

Diese spezielle Aufteilung der linearen Abbildung \mathbf{D} durch die SVD ist grafisch für ein Beispiel mit $p = q = 3$ und $r = 2$ in der Abbildung 3.1 dargestellt. Durch die absteigende Sortierung der Singulärwerte nimmt der Anteil, den eine Komponente von \mathbf{g} auf das Bild im Koordinatensystem \mathbf{h} hat, mit steigendem Index immer weiter ab.

Für die gesuchte Zwischenvariable \mathbf{z} ergibt sich damit als eine mögliche Lösung⁸

$$\mathbf{z} = [g_1, \dots, g_r]^T. \quad (3.27)$$

Die zu diesem \mathbf{z} gehörigen Matrizen ergeben sich aus (3.22) zu

$$\mathbf{A} = \mathbf{N}_r^T = [\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_r]^T \quad \text{und} \quad \mathbf{C} = \mathbf{M}_r \mathbf{S}_r = [\mathbf{m}_1, \dots, \mathbf{m}_r] \text{diag}(s_1, \dots, s_r),$$

wobei die Vektoren \mathbf{m}_i bzw. \mathbf{n}_i die Spaltenvektoren von \mathbf{M} bzw. \mathbf{N} sind. Dieses Ergebnis lässt sich durch Einsetzen leicht validieren:

$$\begin{aligned} \mathbf{CA} &= \mathbf{M}_r \mathbf{S}_r \mathbf{N}_r^T = [\mathbf{m}_1, \dots, \mathbf{m}_r] \text{diag}(s_1, \dots, s_r) [\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_r]^T \\ &= [\mathbf{m}_1, \dots, \mathbf{m}_r, \mathbf{0}] \mathbf{S} [\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_r, \mathbf{0}]^T \\ &= \mathbf{M} [\mathbf{I}, \mathbf{0}]^T \mathbf{S} [\mathbf{I}, \mathbf{0}] \mathbf{M}^T = \mathbf{M} \mathbf{S} \mathbf{N}^T \quad \text{da } s_i = 0 \text{ für } i > r \\ &= \mathbf{D}. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Somit stellt die Wahl von \mathbf{z} , \mathbf{A} und \mathbf{C} eine gültige Lösung dar. Anhand der Herleitung ist leicht zu sehen, dass die dabei gewählte Ordnung r exakt der sonst üblichen Rangdefinition genügt, da diese ja genau der Anzahl an Singulärwerten entspricht.

Nach dieser anschaulichen Darstellung der Wirkungsweise der gewöhnlichen SVD wird nun der Fall betrachtet, dass anstelle der Orthogonalität beliebige Bedingungen an die Matrizen \mathbf{M} und \mathbf{N} bei der Zerlegung treten. Diese Verallgemeinerung führt zur folgenden Definition:

⁸Die Lösung für die Zwischenvariable ist nicht eindeutig. Jede r -dimensionale Basis, die denselben Raum aufspannt wie die gegebene Lösung, ist ebenfalls eine gültige Lösung für die gesuchte Zwischenvariable.

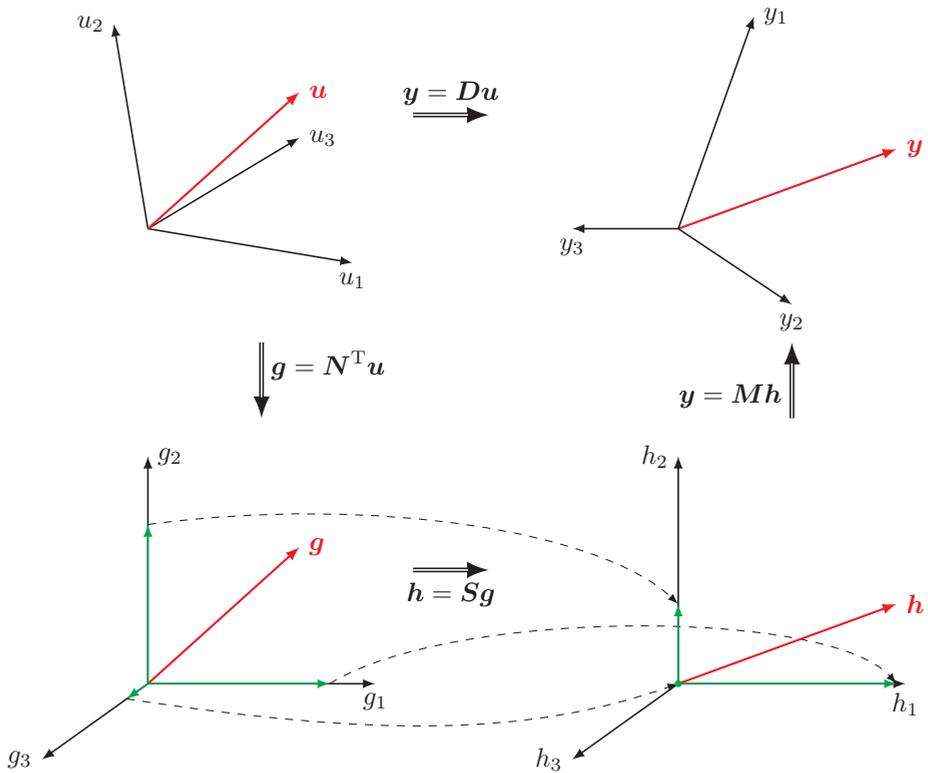


Abbildung 3.1: Grafische Interpretation der SVD für $r = 2$ nach [Lar97b]

Definition 3.3 (Verallgemeinerte Singulärwertzerlegung):

Die verallgemeinerte Singulärwertzerlegung (GSVD⁹) liefert für eine beliebige Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ die Matrizen des Produkts

$$A = MSN^T \quad \text{mit} \quad M^T W_M M = I \quad \text{und} \quad N^T W_N N = I, \quad (3.29)$$

wobei die positiv definiten Matrizen $W_M \in \mathbb{R}^{m \times m}$ bzw. $W_N \in \mathbb{R}^{n \times n}$ die (wählbaren) Bedingungen an die Zeilen bzw. Spalten der Matrix A darstellen.

Auch bei der GSVD existiert analog zur SVD eine Rekonstruktionseigenschaft, allerdings unter Berücksichtigung der Gewichte, und es gilt nach [Abd07] unter Verwendung des Zusammenhangs $\text{spur}(AB) = \text{spur}(BA)$

$$A_k = \arg \min_X (\text{spur} \{ W_N (A - X)^T W_M (A - X) \}) . \quad (3.30)$$

⁹GSVD steht für „generalized singular value decomposition“ (engl. für verallgemeinerte Singulärwertzerlegung).

Fordert man für die Gewichtungsmatrizen nicht die positive Definitheit, sondern lässt auch positiv semi-definite Gewichtungsmatrizen zu, und möchte man gleichzeitig die Singulärwertmatrix isolieren¹⁰, so kann eine reduzierte Variante der GSVD definiert werden (vgl. [Lar99b]):

Definition 3.4 (Reduzierte GSVD):

Die reduzierte GSVD liefert für eine beliebige Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ die Matrizen des Produkts

$$\widetilde{\mathbf{M}}\widetilde{\mathbf{A}}\widetilde{\mathbf{N}}^T = \widetilde{\mathbf{S}} \quad \text{mit} \quad \widetilde{\mathbf{M}}\widetilde{\mathbf{W}}_{\widetilde{\mathbf{M}}}\widetilde{\mathbf{M}}^T = \mathbf{I} \quad \text{und} \quad \widetilde{\mathbf{N}}\widetilde{\mathbf{W}}_{\widetilde{\mathbf{N}}}\widetilde{\mathbf{N}}^T = \mathbf{I}, \quad (3.31)$$

wobei die positiv semi-definiten Matrizen $\widetilde{\mathbf{W}}_{\widetilde{\mathbf{M}}} \in \mathbb{R}^{\widetilde{m} \times \widetilde{m}}$ mit $\widetilde{m} = \text{rg}(\widetilde{\mathbf{W}}_{\widetilde{\mathbf{M}}}) \leq m$ bzw. $\widetilde{\mathbf{W}}_{\widetilde{\mathbf{N}}} \in \mathbb{R}^{\widetilde{n} \times \widetilde{n}}$ mit $\widetilde{n} = \text{rg}(\widetilde{\mathbf{W}}_{\widetilde{\mathbf{N}}}) \leq n$ die (wählbaren) Bedingungen an die Zeilen bzw. Spalten der Matrix \mathbf{A} darstellen. Bei dieser reduzierten Darstellung gilt außerdem $\widetilde{\mathbf{M}} \in \mathbb{R}^{\widetilde{m} \times m}$ und $\widetilde{\mathbf{N}} \in \mathbb{R}^{\widetilde{n} \times n}$.

Die GSVD kann auf die gewöhnliche SVD zurückgeführt bzw. über diese berechnet werden [Abd07, Lar83]. Dazu müssen die Gewichtsmatrizen in ihre Wurzeln zerlegt werden, was beispielsweise über eine Cholesky-Zerlegung geschehen kann. Im Fall von symmetrischen Gewichtsmatrizen kann auch die gewöhnliche SVD selbst verwendet werden, um die Wurzeln der Gewichtsmatrizen zu berechnen, da dann die Matrizen \mathbf{M} und \mathbf{N} der gewöhnlichen Zerlegung der symmetrischen Gewichtsmatrix identisch sind [Lar83]. Damit stellt auch die GSVD eine numerisch stabile Zerlegung dar.

In der Literatur ist neben der hier angegebenen Form eine weitere Verallgemeinerung der SVD unter dem Namen GSVD zu finden, welche eine gemeinsame SVD für zwei Matrizen berechnet. Beide Varianten werden in [Loa76] vorgestellt, weitere Informationen zur hier nicht verwendeten Form finden sich auch in [GL96].

Die letzte Matrizenzerlegung, die in diesem Abschnitt behandelt wird, ist die sogenannte LQ-Zerlegung:

Definition 3.5 (LQ-Zerlegung):

Die LQ-Zerlegung, auch LQ-Faktorisierung genannt, zerlegt eine beliebige Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mit $m \leq n$ in das Produkt

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{Q}^T, \quad (3.32)$$

wobei $\mathbf{L} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ eine untere Dreiecksmatrix darstellt und $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{n \times m}$ eine in den Spalten orthogonale Matrix mit $\mathbf{Q}^T\mathbf{Q} = \mathbf{I}$ ist.

¹⁰Dieser Wunsch dient der später deutlich vereinfachten Notation bei der Anwendung der reduzierten GSVD im Rahmen der kanonischen Korrelationsanalyse.

Der Rang der Matrix \mathbf{L} ist gleich dem Rang der ursprünglichen Matrix \mathbf{A} , die Matrix \mathbf{Q} hat immer Höchststrang.

Die hier vorgestellte Definition wird auch als *reduzierte* oder *dünne LQ-Zerlegung* bezeichnet im Gegensatz zur *vollständigen LQ-Zerlegung*

$$\mathbf{A} = \tilde{\mathbf{L}}\tilde{\mathbf{Q}}^T = \begin{bmatrix} \mathbf{L} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{Q}^T \\ \check{\mathbf{Q}}^T \end{bmatrix} \quad (3.33)$$

mit $\tilde{\mathbf{L}} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ und der orthogonalen Matrix $\tilde{\mathbf{Q}} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, die im Folgenden nicht weiter betrachtet wird.

Die LQ-Zerlegung ist sehr ähnlich zur bekannteren QR-Zerlegung (vgl. z. B. [GL96]) und kann auch über diese berechnet werden. Dazu wird die QR-Zerlegung von \mathbf{A}^T berechnet. Die so gewonnene Matrix \mathbf{Q} ist identisch zur gesuchten Matrix \mathbf{Q} der LQ-Zerlegung von \mathbf{A} , die untere Dreiecksmatrix \mathbf{L} ergibt sich als Transponierte der oberen Dreiecksmatrix \mathbf{R} , also $\mathbf{L} = \mathbf{R}^T$. Man findet die LQ-Zerlegung in der Literatur auch unter dem Namen RQ-Zerlegung oder RQ-Faktorisierung. Diese Bezeichnung birgt jedoch eine Verwechslungsgefahr, da mit \mathbf{R} bei Matrixzerlegungen üblicherweise eine obere Dreiecksmatrix gemeint ist, außerdem existiert auch eine (selten verwendete) RQ-Zerlegung mit oberer Dreiecksmatrix \mathbf{R} [GL96]. Die LQ-Zerlegung eignet sich zur Berechnung eines LS-Schätzers, der genaue Zusammenhang wird bei der Betrachtung der orthogonalen Projektion im folgenden Abschnitt erläutert.

Bei der Anwendung der LQ-Zerlegung im 4SID-Algorithmus fallen die orthogonalen Matrizen \mathbf{Q} aus den Gleichungen heraus, sodass jeweils nur die untere Dreiecksmatrix \mathbf{L} explizit berechnet werden muss. Das senkt sowohl die Rechenkomplexität als auch den Speicheraufwand erheblich. Durch eine geschickte Implementierung der LQ-Zerlegung kann unter Ausnutzung der speziellen Struktur der Block-Hankel-Matrizen (vgl. Abschnitt 3.1.1) bei der 4SID der Rechenaufwand für die Berechnung der Matrix \mathbf{L} nochmals erheblich gegenüber den Standard-Algorithmen gesenkt werden [OM96].

3.1.3 Abbildungen und Projektionen

Bei den 4SID-Methoden spielt die LQ-Zerlegung nur bei der Implementierung der geometrischen Verfahren eine Rolle. Dort werden Projektionen von Matrizen betrachtet, die allgemein sehr geschickt über LQ-Zerlegungen berechnet werden können [OM96, Nic07, See09]. Alternativ können diese Projektionen für stochastische Daten auch über Stichprobenkovarianzen dargestellt werden. Durch die zusätzliche Möglichkeit, die Projektionen zumindest für einfache Beispiele auch grafisch darzustellen,

stellen die geometrischen Algorithmen die anschaulichste Variante der betrachteten Verfahren dar.

Bevor nun die Projektionen und deren verschiedene mathematische Schreibweisen konkret vorgestellt werden können, müssen zunächst einige weitere Begriffe aus der linearen Algebra eingeführt werden, die [See09, Str93, VV07] entnommen wurden. Dabei spielen insbesondere die Unterräume, die bei einer statischen linearen Abbildung nach der Definition 2.1 auftreten, eine Rolle.

Die Matrix $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{q \times p}$ bildet die Elemente des Eingangsraums $\mathcal{U} \subseteq \mathbb{R}^p$ in den Vektorraum \mathbb{R}^q ab. Die Menge der Bildelemente bildet den Ausgangsraum \mathcal{Y} und heißt auch *Bild der Abbildung* $\text{im}(\mathbf{D}) = \mathcal{Y} \subseteq \mathbb{R}^q$. Für die Dimension dieses Unterraums gilt dabei $\dim(\text{im}(\mathbf{D})) = \text{rg}(\mathbf{D})$. Den Teil des Eingangsraums \mathcal{U} , welcher auf den Nullvektor im \mathbb{R}^q abgebildet wird und der daher nicht zum Bild der Abbildung beiträgt, nennt man den *Kern der Abbildung* $\ker(\mathbf{D})$ oder den *Nullraum der Matrix* $\text{null}(\mathbf{D})$. Die Differenz zwischen der Zahl der Spalten von \mathbf{D} , die der Anzahl der Eingangsgrößen p entspricht, und dem Rang r der Matrix \mathbf{D} ist identisch zur Dimension des Kerns der Abbildung und wird *Defekt der Matrix* bzw. *Defekt der Abbildung* $\text{def}(\mathbf{D})$ genannt:

$$\dim(\ker(\mathbf{D})) = \text{def}(\mathbf{D}) = p - \text{rg}(\mathbf{D}) = p - r. \quad (3.34)$$

Das Bild $\text{im}(\mathbf{D})$ wird auch als *Spaltenraum der Matrix \mathbf{D}* bezeichnet, da es sich als Linearkombination

$$\text{im}(\mathbf{D}) = u_1 \mathbf{d}_1 + \dots + u_p \mathbf{d}_p \quad \text{mit} \quad \mathbf{D} = [\mathbf{d}_1 \quad \dots \quad \mathbf{d}_p] \quad (3.35)$$

aus den Spalten der Matrix \mathbf{D} ergibt, solange die Koeffizienten u_i vor den Spaltenvektoren \mathbf{d}_i einen gültigen Vektor $\mathbf{u} = [u_1 \quad \dots \quad u_p]^T \in \mathcal{U}$ des Eingangsraums darstellen. Der Spaltenraum von \mathbf{D}^T , der wegen $\text{rg}(\mathbf{D}) = \text{rg}(\mathbf{D}^T)$ ebenfalls die Dimension $\dim(\text{im}(\mathbf{D}^T)) = r$ hat, wird auch als *Zeilenraum* der Matrix \mathbf{D} bezeichnet. Der zugehörige Nullraum $\text{null}(\mathbf{D}^T) = \ker(\mathbf{D}^T)$ heißt auch *Kokern* von \mathbf{D} .

Wendet man die SVD (vgl. Definition 3.1) auf die Matrix \mathbf{D} an, so stellen die ersten r Spaltenvektoren der Matrix \mathbf{M} eine orthogonale Basis für den Spaltenraum der Matrix \mathbf{D} dar, die verbleibenden $q - r$ Spalten sind eine orthogonale Basis des Nullraums von \mathbf{D}^T . Entsprechend bilden die ersten r Spalten der Matrix \mathbf{N} eine orthogonale Basis des Zeilenraums und die verbleibenden $p - r$ Spalten eine orthogonale Basis für den Nullraum der Matrix \mathbf{D} . Dies deckt sich mit der anschaulichen Betrachtung der SVD im Abschnitt 3.1.2, bei der gezeigt wurde, dass durch die SVD zwei Transformationsmatrizen und eine Abbildungsmatrix in Diagonalgestalt berechnet werden. Dabei sind die ersten r Komponenten des transformierten Ursprungssystems genau die Menge, aus der das Bild im Zielkoordinatensystem entsteht, und die restlichen Komponenten werden in den Ursprung abgebildet und bilden somit

Bezeichnungen	Formelzeichen	Dimension	Basis (SVD)	VR
Spaltenraum, Bild	$\text{im}(\mathbf{D})$	$r = \text{rg}(\mathbf{D})$	$\mathbf{m}_1, \dots, \mathbf{m}_r$	\mathbb{R}^q
Nullraum, Kern	$\text{null}(\mathbf{D}) = \ker(\mathbf{D})$	$\text{def}(\mathbf{D}) = p - r$	$\mathbf{n}_{r+1}, \dots, \mathbf{n}_p$	\mathbb{R}^p
Zeilenraum	$\text{im}(\mathbf{D}^\text{T})$	$r = \text{rg}(\mathbf{D}^\text{T})$	$\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_r$	\mathbb{R}^p
Kokern	$\text{null}(\mathbf{D}^\text{T}) = \ker(\mathbf{D}^\text{T})$	$\text{def}(\mathbf{D}^\text{T}) = q - r$	$\mathbf{m}_{r+1}, \dots, \mathbf{m}_q$	\mathbb{R}^q

Tabelle 3.1: Unterräume bei der linearen Abbildung mit der Abbildungsmatrix \mathbf{D} (VR steht für den Vektorraum, der den jeweiligen Unterraum beinhaltet)

den Nullraum. Zur besseren Übersicht sind die hier eingeführten Bezeichnungen und Notationen nochmals in der Tabelle 3.1 zusammengefasst.

Zusätzlich wird noch das orthogonale Komplement eines Unterraums benötigt, welches mit „ \perp “ gekennzeichnet wird. Es enthält alle Elemente des übergeordneten Vektorraums, die senkrecht zum betrachteten Unterraum sind. Für das orthogonale Komplement des Zeilenraums gilt $(\text{im}(\mathbf{D}^\text{T}))^\perp = \ker(\mathbf{D})$, für das des Spaltenraums $(\text{im}(\mathbf{D}))^\perp = \ker(\mathbf{D}^\text{T})$.

Im Folgenden werden die verschiedenen Arten von Projektionen jeweils mit einem grafischen Beispiel sowie den verschiedenen mathematischen Beschreibungen eingeführt. Dabei werden stets die Zeilenräume der beteiligten Matrizen betrachtet. Zusätzlich wird davon ausgegangen, dass alle Matrizen weniger oder gleichviele Zeilen wie Spalten haben und vollen Rang besitzen, was bei der Anwendung für die 4SID stets erfüllt ist.

Zunächst wird die senkrechte Projektion des Zeilenraums einer Matrix auf den Zeilenraum der Matrix \mathbf{B} betrachtet:

Definition 3.6 (Senkrechte Projektion auf den Zeilenraum von \mathbf{B}):

Der Operator $\mathbf{\Pi}_\mathbf{B}$, der den Zeilenraum einer beliebigen Matrix auf den Zeilenraum der Matrix \mathbf{B} abbildet, ist definiert als

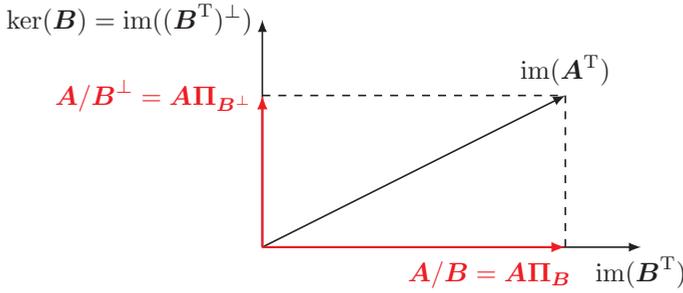
$$\mathbf{\Pi}_\mathbf{B} := \mathbf{B}^\text{T} \left(\mathbf{B}\mathbf{B}^\text{T} \right)^\dagger \mathbf{B}. \quad (3.36)$$

Entsprechend kann auch auf das orthogonale Komplement des Zeilenraums von \mathbf{B} projiziert werden:

Definition 3.7 (Senkrechte Projektion auf den Zeilenraum von \mathbf{B}^\perp):

Der Operator $\mathbf{\Pi}_{\mathbf{B}^\perp}$ projiziert eine Matrix auf das orthogonale Komplement des Zeilenraums von \mathbf{B} :

$$\mathbf{\Pi}_{\mathbf{B}^\perp} := \mathbf{I} - \mathbf{\Pi}_\mathbf{B}. \quad (3.37)$$

Abbildung 3.2: Senkrechte Projektionen von A

Im Folgenden werden für die senkrechte Projektion des Zeilenraums der Matrix A auf den Zeilenraum der Matrix B bzw. auf das orthogonale Komplement des Zeilenraums von B meistens die abkürzenden Schreibweisen

$$A/B := A\Pi_B \quad \text{bzw.} \quad A/B^\perp := A\Pi_{B^\perp} \quad (3.38)$$

verwendet. Die Abbildung 3.2 zeigt ein Beispiel für die senkrechten Projektionen nach den Definitionen 3.6 und 3.7, wobei jeder Unterraum durch einen einzelnen Vektor repräsentiert wird. Die Projektionen Π_B und Π_{B^\perp} zerlegen also eine Matrix in die Summe zweier Matrizen, deren Zeilenräume orthogonal sind:

$$A = A\Pi_B + A\Pi_{B^\perp}. \quad (3.39)$$

Die Ergebnisse dieser Projektionen können auch über die LQ-Zerlegung der Matrix $\begin{bmatrix} B^T & A^T \end{bmatrix}^T$ berechnet werden, wenn die Matrizen $A \in \mathbb{R}^{(a \times j)}$ und $B \in \mathbb{R}^{(b \times j)}$ vollen Rang haben (vgl. z. B. [OM96, Kat05]). Aus der LQ-Zerlegung

$$\begin{bmatrix} B \\ A \end{bmatrix} = LQ^T = \begin{bmatrix} L_{11} & \mathbf{0} \\ L_{21} & L_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_1^T \\ Q_2^T \end{bmatrix} \quad (3.40)$$

mit $L_{11} \in \mathbb{R}^{b \times b}$, $L_{21} \in \mathbb{R}^{a \times b}$, $L_{22} \in \mathbb{R}^{a \times a}$, $Q_1 \in \mathbb{R}^{j \times b}$ und $Q_2 \in \mathbb{R}^{j \times a}$ ergeben sich die Projektionen dann zu

$$A/B = L_{21}Q_1^T \quad \text{und} \quad A/B^\perp = L_{22}Q_2^T. \quad (3.41)$$

Die Korrektheit dieser Berechnungsmöglichkeiten über die LQ-Zerlegung wird im Anhang A.1 gezeigt. Der Ausdruck für die Projektion A/B kann weiter umgeformt werden, indem man die Voraussetzung des vollen Rangs der Matrix B ausnutzt. Nach Gleichung (3.40) gilt $B = L_{11}Q_1^T$, wobei auch die Matrix L_{11} vollen Rang hat, da sonst B singular wäre. Damit lässt sich diese Gleichung durch Multiplikation mit

der Inversen der regulären quadratischen Matrix L_{11} von links nach Q_1^T auflösen. Für die betrachtete Projektion gilt dann

$$A/B = L_{21}Q_1^T = L_{21}L_{11}^{-1}B. \quad (3.42)$$

Die als senkrechte Projektionen definierten Matrixoperationen können auch als Multiplikation von Stichprobenkovarianzen aufgefasst werden. Für die senkrechte Projektion von A auf den Zeilenraum von B ergibt sich

$$A/B = \underbrace{AB^T}_{=j\hat{\Sigma}_{AB}} \underbrace{(BB^T)^\dagger}_{=\frac{1}{j}\hat{\Sigma}_{BB}^{-1}} B = \hat{\Sigma}_{AB}\hat{\Sigma}_{BB}^{-1}B. \quad (3.43)$$

Vergleicht man diesen Zusammenhang mit der zuvor erhaltenen Gleichung (3.42) aus den Betrachtungen mit der LQ-Zerlegung, so kann man direkt ablesen, dass

$$L_{21}L_{11}^{-1} = \hat{\Sigma}_{AB}\hat{\Sigma}_{BB}^{-1} \quad (3.44)$$

gelten muss. Die rechte Seite ist aber gerade identisch zum LS-Schätzer (2.37), woraus folgt, dass einerseits der LS-Schätzwert auch über die LQ-Zerlegung berechnet werden kann, und dass andererseits die senkrechte Projektion genau einer LS-Schätzung entspricht. Man erhält mit ihr die Lösung $\widehat{X}B$, die im Zeilenraum von B bezüglich der Norm $\|A - XB\|_F^2$ den geringsten Abstand zu A hat [AHK⁺09, Str93]:

$$\widehat{X} = \arg \min_X \left\{ \|A - XB\|_F^2 \right\}. \quad (3.45)$$

Der Fehler $A - \widehat{X}B$ liegt im Kokern von B , der genau dem orthogonalen Komplement des Zeilenraums von B entspricht. Das lässt sich auch aus der Formel für die Projektion auf B^\perp herleiten:

$$A/B^\perp = A - AB^T(BB^T)^\dagger B = A - \hat{\Sigma}_{AB}\hat{\Sigma}_{BB}^{-1}B = A - \widehat{X}B. \quad (3.46)$$

Weitere Betrachtungen zum Zusammenhang der LS-Schätzung mit den vier Unterräumen einer Abbildungsmatrix sind in [Str93] anschaulich erläutert.

Anstatt senkrecht auf den Zeilenraum von B zu projizieren, kann die Projektion auch parallel zum Zeilenraum einer weiteren Matrix $C \in \mathbb{R}^{(c \times j)}$ durchgeführt werden:

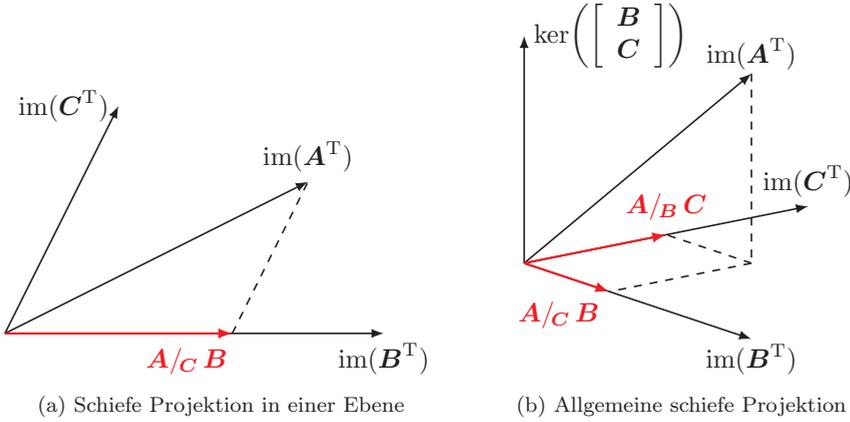


Abbildung 3.3: Schiefe Projektion

Definition 3.8 (Schiefe Projektion auf den Zeilenraum von B):

Die schiefe Projektion von A entlang des Zeilenraums von C auf den Zeilenraum der Matrix B ist definiert als

$$A/C B := (A/C^\perp)(B/C^\perp)^\dagger B. \quad (3.47)$$

Mit Vektoren als Repräsentanten der Unterräume sind in der Abbildung 3.3 beispielhaft zwei schiefe Projektionen gezeigt. Dabei muss A nicht wie in der Abbildung 3.3(a) in dem durch B und C aufgespannten Raum liegen, sondern kann auch wie in der Abbildung 3.3(b) daraus hervorragen. Die schiefe Projektion entspricht dann einer zunächst durchgeführten senkrechten Projektion in den durch B und C aufgespannten Raum. Mit diesem Zwischenresultat wird entsprechend der in der Abbildung 3.3(a) gezeigten Vorgehensweise das Ergebnis der Projektion ermittelt. Äquivalente Definitionen und weitere Interpretationen für die schiefe Projektion finden sich in [OM96, CM03, See09].

Für die schiefe Projektion gelten unter anderem die Eigenschaften

$$A/A B = 0, \quad A/C B = 0 \text{ für } AB^T = 0 \quad \text{und} \quad A/B A = A. \quad (3.48)$$

Dabei bedeutet $AB^T = 0$, dass die beiden Zeilenräume senkrecht zueinander sind. Für den Fall, dass $C = 0$ gilt oder dass die Zeilenräume von B und C senkrecht zueinander sind, wird die schiefe Projektion zu einer senkrechten, es gilt also

$$A/C B = A/B \text{ für } BC^T = 0. \quad (3.49)$$

Anders ausgedrückt bedeutet dies, dass die senkrechten Projektionen jeweils einen Spezialfall der schiefen Projektion darstellen:

$$A/B^\perp B = A/B \quad \text{und} \quad A/B B^\perp = A/B^\perp. \quad (3.50)$$

Auch die schiefe Projektion kann mithilfe der LQ-Zerlegung berechnet werden, wenn A , B und C sowie die Matrix $\begin{bmatrix} C^T & B^T \end{bmatrix}^T$ vollen Rang haben und $j \geq a + b + c$ gilt. Mit der LQ-Zerlegung

$$\begin{bmatrix} C \\ B \\ A \end{bmatrix} = LQ^T = \begin{bmatrix} L_{11} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ L_{21} & L_{22} & \mathbf{0} \\ L_{31} & L_{32} & L_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_1^T \\ Q_2^T \\ Q_3^T \end{bmatrix} \quad (3.51)$$

gilt dann

$$A/C B = L_{32} L_{22}^{-1} \begin{bmatrix} L_{21} & L_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_1^T \\ Q_2^T \end{bmatrix} \quad (3.52)$$

$$= L_{32} L_{22}^{-1} L_{21} Q_1^T + L_{32} Q_2^T. \quad (3.53)$$

Die Gültigkeit dieser Berechnungsvorschrift wird ebenfalls im Anhang A.1 bewiesen.

Anmerkung: Neben der angegebenen Berechnungsvorschrift der schiefen Projektion über eine LQ-Zerlegung existieren weitere Varianten, bei denen die Teilmatrizen anders sortiert in die LQ-Zerlegung eingebracht werden, z. B. in [OM96].

Im Gegensatz zu den beiden senkrechten Projektionen kann für die schiefe Projektion keine einfache Formulierung mit den Stichprobenkovarianzen angegeben werden.

3.2 Allgemeiner Aufbau und Funktionsweise der 4SID-Algorithmen

Auf Basis der im vorigen Abschnitt eingeführten Notationen und mathematischen Grundlagen kann nun ein allgemeines Ablaufschema eingeführt werden, in welchem sich jedes der im Rahmen dieser Arbeit betrachteten 4SID-Verfahren darstellen lässt [See09, Bau98]. Dieser Ablauf wird im Folgenden vorgestellt und die einzelnen Schritte mit möglichen Umsetzungen erläutert. In den nachfolgenden Abschnitten 3.3 bis 3.5 werden dann die in der Literatur beschriebenen Verfahren auf Basis dieses allgemeinen Ablaufschemas erläutert. Außerdem wird dort auf die Unterschiede zwischen der originalen Herleitung des jeweiligen Verfahrens und der Umsetzung im Rahmen des allgemeinen Ablaufschemas eingegangen.

Wie bereits in der Einleitung zu diesem Kapitel erläutert, stellen Messdaten der Ein- und Ausgangsgrößen eines LTI-Systems den Ausgangspunkt für alle in dieser Arbeit betrachteten 4SID-Algorithmen dar. Gemeinsames Ziel aller Algorithmen ist die Gewinnung eines zeitdiskreten Zustandsraummodells des untersuchten Prozesses, wobei die Modellordnung möglichst klein, jedoch nicht kleiner als die reale Systemordnung sein soll. Diese Forderung entspricht dem Wunsch, im Idealfall keine der in den Messdaten enthaltenen Rauschteile durch deterministische Parameter fälschlicherweise nachzubilden, ohne Systemanteile zu vernachlässigen.

Der Ablauf des Identifikationsprozesses bei der Anwendung eines 4SID-Algorithmus lässt sich in vier Schritte gliedern:

1. Datenaufbereitung:

Aufstellen der benötigten Datenmatrizen

2. Datenvorverarbeitung:

Schätzen des schiefen Prädiktors

3. Ordnungsbestimmung:

Reduzieren der Ordnung des Messdatenmodells

4. Parameterschätzung:

Schätzen der Systemmatrizen des Zustandsraummodells und der Rauschkovarianzen

In [Qin06] wird eine ähnliche Gliederung angegeben, die noch die Möglichkeit einer Iteration als zusätzlichen weiteren Schritt am Ende beinhaltet. Allerdings wird diese Iteration im gesamten Artikel nicht weiter beschrieben. Vermutlich ist damit ein mehrmaliges Anwenden des gewählten 4SID-Verfahrens mit veränderten Vorgaben gemeint, um aus den Ergebnissen dann das beste auszuwählen.

Die einzelnen Schritte lassen sich teilweise auf unterschiedliche Arten umsetzen. Die häufigsten Varianten, die auch in den später beschriebenen Verfahren zum Einsatz kommen, werden im Folgenden erläutert.

3.2.1 Datenaufbereitung

Damit die Schätzung der Ordnung und Parameter erfolgen kann, müssen zunächst die Messdatenpaare der Ein- und Ausgänge geeignet aufbereitet werden. Bei den verschiedenen 4SID-Methoden existieren dazu zwei Varianten, zwischen welchen in Abhängigkeit der weiteren Schritte ausgewählt wird. Zum einen können die im Abschnitt 3.1.1 zuerst vorgestellten einfachen Datenmatrizen verwendet werden. Dazu müssen die Daten der Ein- und Ausgangsgrößen nur nach der Form (3.1) in Matrizen abgelegt werden. Die Aufteilung in vergangene und zukünftige Daten erfolgt nach

der Gleichung (3.2). Der Zusammenhang mit den gesuchten Parametermatrizen kann mit ihnen direkt über die gewünschte Zustandsraumdarstellung unter Verwendung der Zustandsfolgematrix aus der Gleichung (3.3) ausgedrückt werden.

Die zweite Variante, die von den meisten 4SID-Methoden verwendet wird, ist die Nutzung der Block-Hankel-Matrizen, die mit den zur Verfügung stehenden Messdatenpaaren zu N Zeitpunkten aufgebaut werden. Zusammen mit den ebenfalls im Abschnitt 3.1.1 eingeführten Parametermatrizen erhält man aus der Zustandsraumdarstellung die sogenannten *Subspace-Gleichungen*, die die Zusammenhänge zwischen den verschiedenen Matrizen beschreiben. Dazu wird üblicherweise die Innovationsform oder die Prädiktorform des Zustandsraummodells (vgl. Abschnitt 2.1.2) verwendet. Für die Prozessform können ähnliche Gleichungen angegeben werden [OM96], die im Rahmen dieser Arbeit jedoch nicht benötigt werden. Ausführlichere Herleitungen für die hier angegebenen Subspace-Gleichungen sind in [HK08, See09] zu finden.

Für die Innovationsform (2.18) erhält man die Subspace-Gleichungen

$$\mathbf{Y}_{i+1|2i} = \mathbf{Q}_{B,i} \widehat{\mathbf{X}}_{i+1} + \mathbf{H}_i^{\text{determ}} \mathbf{U}_{i+1|2i} + \mathbf{H}_i^{\text{stoch}} \mathbf{E}_{i+1|2i}, \quad (3.54a)$$

$$\mathbf{Y}_{1|i} = \mathbf{Q}_{B,i} \widehat{\mathbf{X}}_1 + \mathbf{H}_i^{\text{determ}} \mathbf{U}_{1|i} + \mathbf{H}_i^{\text{stoch}} \mathbf{E}_{1|i}, \quad (3.54b)$$

$$\widehat{\mathbf{X}}_{i+1} = \mathbf{A}^i \widehat{\mathbf{X}}_1 + \mathbf{Q}_{S,i}^{\text{determ}} \mathbf{U}_{1|i} + \mathbf{Q}_{S,i}^{\text{stoch}} \mathbf{E}_{1|i}. \quad (3.54c)$$

Die Matrizen $\mathbf{E}_{i+1|2i}$ und $\mathbf{E}_{1|i}$ sind dabei analog zur Gleichung (3.7) aufgebaut und enthalten die Innovationen (2.17) und damit den stochastischen Anteil des Systems. Aus diesen Gleichungen ist auch die Wahl der Bezeichnungen „deterministisch“ und „stochastisch“ der einzelnen Parametermatrizen direkt ersichtlich.

Anmerkung: Die Zustandsfolgen sind, wie ihre Elemente, hier als Schätzgrößen gekennzeichnet, um mit der Notation aus Kapitel 2 konform zu bleiben. Dort wurden sowohl in der Innovationsform als auch in der Prädiktorform die Zustandsgrößen als Schätzwerte eines Kalman-Filters aufgefasst. Dennoch sind die Größen hier, wie auch die Parameter, unbekannt.

Für die Prädiktorform ergeben sich die Subspace-Gleichungen

$$\mathbf{Y}_{i+1|2i} = \mathbf{Q}_{B,K,i} \widehat{\mathbf{X}}_{i+1} + \mathbf{H}_{K,i}^{\text{determ}} \begin{bmatrix} \mathbf{Y} \\ \mathbf{U} \end{bmatrix}_{i+1|2i} + \mathbf{E}_{i+1|2i}, \quad (3.55a)$$

$$\mathbf{Y}_{1|i} = \mathbf{Q}_{B,K,i} \widehat{\mathbf{X}}_1 + \mathbf{H}_{K,i}^{\text{determ}} \begin{bmatrix} \mathbf{Y} \\ \mathbf{U} \end{bmatrix}_{1|i} + \mathbf{E}_{1|i}, \quad (3.55b)$$

$$\widehat{\mathbf{X}}_{i+1} = \mathbf{A}_K^i \widehat{\mathbf{X}}_1 + \mathbf{Q}_{S,K,i}^{\text{determ}} \begin{bmatrix} \mathbf{Y} \\ \mathbf{U} \end{bmatrix}_{1|i}. \quad (3.55c)$$

An allen Blockparametermatrizen mit dem Index \mathbf{K} sind dabei \mathbf{A} durch $\mathbf{A}_{\mathbf{K}}$, \mathbf{B} durch $\mathbf{B}_{\mathbf{K}}$ (vgl. Gleichung (2.20)) und \mathbf{D} durch $\begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{D} \end{bmatrix}$ zu ersetzen. Mit den Schreibweisen

$$\begin{bmatrix} \mathbf{Y} \\ \mathbf{U} \end{bmatrix}_{1|i} \quad \text{und} \quad \begin{bmatrix} \mathbf{Y} \\ \mathbf{U} \end{bmatrix}_{i+1|2i} \quad (3.56)$$

sind Block-Hankel-Matrizen analog zu (3.7) gemeint, deren Blockelemente aus \mathbf{y}_k und \mathbf{u}_k zusammengesetzte Vektoren $\begin{bmatrix} \mathbf{y}_k^T & \mathbf{u}_k^T \end{bmatrix}^T$ sind.

Wird die Prädiktorform ohne Durchgriff nach (2.19) betrachtet, so sind die Blockelemente der Hauptdiagonalen von $\mathbf{H}_{\mathbf{K},i}^{\text{determ}}$ Nullmatrizen.

3.2.2 Datenvorverarbeitung

Da bei der 4SID weder Vorwissen über die Ordnung des linearen Systems noch über dessen Parameter vorausgesetzt wird, spielen die in den Subspace-Gleichungen auftretenden, unbekanntenen Zustandsfolgen eine wichtige Rolle bei der Schätzung. Mit Ausnahme der statistischen CVA können alle hier betrachteten Algorithmen darauf zurückgeführt werden, dass zunächst der aus der Subspace-Gleichung für die zukünftigen Ausgänge stammende Term $\mathbf{Q}_{\mathbf{B},i} \widehat{\mathbf{X}}_{i+1}$ bei der Innovationsform bzw. $\mathbf{Q}_{\mathbf{B},\mathbf{K},i} \widehat{\mathbf{X}}_{i+1}$ bei der Prädiktorform aus den Messdaten geschätzt wird¹¹. Ausgehend von diesem Term werden dann die weiteren Schritte zur Schätzung aller unbekanntenen Modellgrößen durchgeführt. Im Folgenden wird dieser Term wie in [See09] als *schiefer Prädiktor* bezeichnet in Anlehnung an den englischen Begriff „oblique predictor“ [Chi07a], da sein Zeilenraum den „oblique predictor space“ [CP03] aufspannt. Notiert wird er als

$$\mathbf{O}_i := \mathbf{Q}_{\mathbf{B},i} \widehat{\mathbf{X}}_{i+1} \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{O}_{\mathbf{K},i} := \mathbf{Q}_{\mathbf{B},\mathbf{K},i} \widehat{\mathbf{X}}_{i+1}. \quad (3.57)$$

Die Relevanz des schiefen Prädiktors kann leicht an einem einfachen Beispiel eines rein deterministischen, autonomen Systems gezeigt werden [VV07, See09]. Dort vereinfacht sich die Subspace-Gleichung für zukünftige Ausgänge zu

$$\mathbf{Y}_{i+1|2i} = \mathbf{Q}_{\mathbf{B},i} \mathbf{X}_{i+1} = \mathbf{O}_i. \quad (3.58)$$

Man kann nun mit der Ungleichung von Sylvester (benannt nach James Joseph Sylvester¹²) [ZF92] leicht zeigen, dass aufgrund der vorausgesetzten Steuerbarkeit, d. h.

¹¹Bei der statistischen CVA wird ein sehr ähnlicher Term geschätzt, der jedoch noch zusätzlich die Einflüsse des Rauschens enthält, die in den Subspace-Gleichungen durch den Summanden mit den Innovationen repräsentiert werden.

¹²James Joseph Sylvester, * 3. September 1814 in London, † 15. März 1897 in London; Mathematiker; Professor am University College London, an der Universität von Virginia, an der Royal

$\mathbf{Q}_{B,i}$ hat vollen Rang n , und genügenden Anregung des Systems, d. h. die Zustandsfolge \mathbf{X}_{i+1} des minimalen Systems n -ter Ordnung hat ebenfalls den Rang n , die Hankel-Matrix der zukünftigen Ausgänge $\mathbf{Y}_{i+1|2i}$ den Rang n haben muss:

$$n = \text{rg}(\mathbf{Q}_{B,i}) + \text{rg}(\mathbf{X}_{i+1}) - n \leq \text{rg}(\mathbf{Y}_{i+1|2i}) \leq \min \{ \text{rg}(\mathbf{Q}_{B,i}), \text{rg}(\mathbf{X}_{i+1}) \} = n. \quad (3.59)$$

Damit bleibt beim Produkt der erweiterten Beobachtbarkeitsmatrix und der Zustandsfolge der Rang erhalten, woraus folgt, dass der Spaltenraum von $\mathbf{Y}_{i+1|2i}$ mit dem Spaltenraum der erweiterten Beobachtbarkeitsmatrix $\mathbf{Q}_{B,i}$ sowie der Zeilenraum von $\mathbf{Y}_{i+1|2i}$ mit dem Zeilenraum der Zustandsfolge \mathbf{X}_{i+1} übereinstimmt. Durch Anwenden der SVD aus Definition 3.1 erhält man

$$\mathbf{Y}_{i+1|2i} = \mathbf{M} \mathbf{S} \mathbf{N}^T. \quad (3.60)$$

Damit können jeweils geeignete Basisvektoren für diese beiden Unterräume gewonnen werden (vgl. Tabelle 3.1). Insgesamt gilt mit den Bezeichnungen für die reduzierten Matrizen der SVD aus der Gleichung (3.18)

$$\text{im}(\mathbf{Y}_{i+1|2i}) = \text{im}(\mathbf{Q}_{B,i}) = \text{im}(\mathbf{M}_n) \quad \text{und} \quad \text{im}(\mathbf{Y}_{i+1|2i}^T) = \text{im}(\mathbf{X}_{i+1}^T) = \text{im}(\mathbf{N}_n). \quad (3.61)$$

Eine in der Literatur als balancierte Realisierung („balanced realization“)[OM96, Qin06] bezeichnete Schätzung erhält man durch die Wahl von

$$\widehat{\mathbf{Q}}_{B,\widehat{n}} = \mathbf{M}_n \mathbf{S}_n^{\frac{1}{2}} \quad \text{und} \quad \widehat{\mathbf{X}}_{i+1} = \mathbf{S}_n^{\frac{1}{2}} \mathbf{N}_n^T. \quad (3.62)$$

Auf die Gewichtung mit $\mathbf{S}_n^{\frac{1}{2}}$ kann aufgrund des Isomorphismus der Zustandsraumdarstellung (vgl. Abschnitt 2.1.2) auch verzichtet werden.

Im allgemeinen Fall mit Eingängen und Rauschen müssen diese Einflüsse, die ebenfalls in der Matrix $\mathbf{Y}_{i+1|2i}$ enthalten sind, zunächst bestmöglich entfernt und die Ordnung anschließend geschätzt werden. Für die Schätzung des schiefen Prädiktors \mathbf{O}_i bzw. $\mathbf{O}_{K,i}$ existieren in der Literatur verschiedene Ansätze, die alle auf Basis unterschiedlicher Überlegungen dieses Ziel zu erreichen versuchen. Im Folgenden werden der Ansatz mit einem ARX-Modell hoher Ordnung (HOARX-Ansatz¹³), ein Projektionsansatz, ein Regressionsansatz (LS-Ansatz) und ein Hilfsvariablenansatz (IV-Ansatz) genauer vorgestellt.

Military Academy in Woolwich (England), an der Johns-Hopkins-University in Baltimore und an der University of Oxford; Mitglied und Präsident der London Mathematical Society, „Fellow“ der Royal Society of London und der Royal Society of Edinburgh, Mitglied der Académie des Sciences Paris; führte u. a. den Begriff „Matrix“ ein

¹³HOARX steht für „high order ARX“ (engl. für ARX-Modell hoher Ordnung).

HOARX-Ansatz

Beim HOARX-Ansatz wird für die Messdaten ein ARX-Modell geschätzt, dessen Ordnung höher ist als die des untersuchten Systems. Dieses Modell wird dann dazu verwendet, die Einflüsse der zukünftigen Eingänge aus den zukünftigen Daten der Ausgänge zu entfernen oder direkt einen Schätzwert für den schiefen Prädiktor zu finden. Dazu wird die Struktur der Matrizen in der Subspace-Ausgangsgleichung ausgenutzt, die sich aus den Parametern eines ARX-Modells zusammensetzen lassen. Dies ermöglicht unter anderem auch die Identifikation im geschlossenen Regelkreis, bei der Ein- und Ausgangsdaten korreliert sind. In der Literatur, u. a. [LM96, PSD96, Jan03, Lar04, Jan05, Chi07a, Chi07b, See09], existieren verschiedene Ansätze zur Nutzung von HOARX-Modellen in 4SID-Verfahren, die sich teilweise sehr stark ähneln. Zwei Varianten werden im Folgenden als Vertreter dieser Ansätze vorgestellt.

In [Chi07a, Chi07b] wird ein HOARX-Modell zur Schätzung des schiefen Prädiktors beschrieben, dessen Ausgangspunkt die Subspace-Ausgangsgleichung für die zukünftigen Daten in Prädiktorform (3.55a) ist. Die darin vorkommenden Matrizen können durch die Parameter des zugehörigen ARX-Modells beschrieben werden (vgl. auch [Qin06, See09]). Dabei werden die Hankel-Matrizen der Daten nicht wie sonst hälftig in Vergangenheit und Zukunft aufgeteilt, sondern der Vergangenheitshorizont ℓ_p und der Zukunftshorizont ℓ_f können unabhängig voneinander gewählt werden. Die Gesamtzahl an Blockzeilen beträgt dann $\ell_p + \ell_f$.

Mit diesen Varianten der Hankel-Datenmatrizen wird zunächst aus der Subspace-Gleichung für die Zustandsfolgen der Prädiktorform (3.55c) ein Schätzwert für die Kalman-Filter-Zustandsfolge $\widehat{\mathbf{X}}_{\ell_p+1}$ gewonnen, der auf den verfügbaren Messdaten basiert. Ausgangspunkt ist die Tatsache, dass aufgrund der stets stabilen Eigenwerte der Matrix \mathbf{A}_K die ℓ_p -te Potenz dieser Matrix für große Werte von ℓ_p näherungsweise verschwindet, da $\mathbf{A}_K^{\ell_p} \rightarrow \mathbf{0}$ für $\ell_p \rightarrow \infty$ gilt (vgl. [OM96, Knu01, Lar04]). Somit gilt bei einem ausreichend großen Datensatz mit entsprechender Wahl von ℓ_p

$$\widehat{\widehat{\mathbf{X}}}_{\ell_p+1} = \mathbf{Q}_{S,K,\ell_p}^{\text{determ}} \begin{bmatrix} \mathbf{Y} \\ \mathbf{U} \end{bmatrix}_{1|\ell_p} . \quad (3.63)$$

Setzt man diesen Schätzwert in die Subspace-Gleichungen für die zukünftigen Ausgangsgrößen der Prädiktorform (3.55a) ein, so erhält man die Gleichung

$$\mathbf{Y}_{\ell_p+1|2i} = \mathbf{Q}_{B,K,\ell_p} \mathbf{Q}_{S,K,\ell_p}^{\text{determ}} \begin{bmatrix} \mathbf{Y} \\ \mathbf{U} \end{bmatrix}_{1|\ell_p} + \mathbf{H}_{K,\ell_p}^{\text{determ}} \begin{bmatrix} \mathbf{Y} \\ \mathbf{U} \end{bmatrix}_{\ell_p+1|2i} + \mathbf{E}_{\ell_p+1|2i} . \quad (3.64)$$

Die beiden in dieser Gleichung vorkommenden Parametermatrizen sind wie folgt

aufgebaut (vgl. Abschnitte 3.1.1 und 3.2.1):

$$H_{\mathbf{K}, \ell_p}^{\text{determ}} = \begin{bmatrix} [\mathbf{0} \ D] & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ CB_{\mathbf{K}} & [\mathbf{0} \ D] & \ddots & \ddots & \mathbf{0} \\ CA_{\mathbf{K}} B_{\mathbf{K}} & CB_{\mathbf{K}} & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ CA_{\mathbf{K}}^{\ell_p-3} B_{\mathbf{K}} & \ddots & \ddots & \ddots & \mathbf{0} \\ CA_{\mathbf{K}}^{\ell_p-2} B_{\mathbf{K}} & CA_{\mathbf{K}}^{\ell_p-3} B_{\mathbf{K}} & \cdots & CB_{\mathbf{K}} & [\mathbf{0} \ D] \end{bmatrix}, \quad (3.65a)$$

$$Q_{\mathbf{B}, \mathbf{K}, \ell_p} Q_{\mathbf{S}, \mathbf{K}, \ell_p}^{\text{determ}} = \begin{bmatrix} CA_{\mathbf{K}}^{\ell_p-1} B_{\mathbf{K}} & \cdots & CA_{\mathbf{K}} B_{\mathbf{K}} & CB_{\mathbf{K}} \\ CA_{\mathbf{K}}^{\ell_p} B_{\mathbf{K}} & \cdots & CA_{\mathbf{K}}^2 B_{\mathbf{K}} & CA_{\mathbf{K}} B_{\mathbf{K}} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ CA_{\mathbf{K}}^{2i-2} B_{\mathbf{K}} & \cdots & CA_{\mathbf{K}}^{\ell_p} B_{\mathbf{K}} & CA_{\mathbf{K}}^{\ell_p-1} B_{\mathbf{K}} \end{bmatrix}. \quad (3.65b)$$

Der Zusammenhang mit dem zugehörigen ARX-Modell kann über die \mathfrak{z} -Transformation hergeleitet werden [See09]. Als ARX-Modellbeschreibung erhält man für die Prädiktorform mit gemeinsamem Vektor für die Ein- und Ausgangsgrößen

$$\mathbf{y}(k) = \sum_{l=1}^{\ell_p} CA_{\mathbf{K}}^{l-2} B_{\mathbf{K}} \begin{bmatrix} \mathbf{y}(k-l) \\ \mathbf{u}(k-l) \end{bmatrix} + [\mathbf{0} \ D] \begin{bmatrix} \mathbf{y}(k) \\ \mathbf{u}(k) \end{bmatrix}, \quad (3.66)$$

wobei ℓ_p hier die Ordnung des HOARX-Modells darstellt. Die übliche Form des ARX-Modells nach der Definition 2.15 kann man durch Einsetzen der Berechnungsvorschriften für $A_{\mathbf{K}}$ und $B_{\mathbf{K}}$ erhalten [See09], die jedoch hier nicht benötigt wird.

Die Koeffizienten dieses ARX-Modells können aus den Messdaten geschätzt werden und stellen die Elemente der beiden Parametermatrizen dar. In der Parametermatrix $Q_{\mathbf{B}, \mathbf{K}, \ell_p} Q_{\mathbf{S}, \mathbf{K}, \ell_p}^{\text{determ}}$ auftretende Terme, die im ARX-Modell i -ter Ordnung nicht vorkommen, werden in der Matrix durch Nullmatrizen ersetzt, wodurch sich für die geschätzte Matrix $\widehat{Q}_{\mathbf{B}, \mathbf{K}, \ell_p} Q_{\mathbf{S}, \mathbf{K}, \ell_p}^{\text{determ}}$ eine obere Dreiecksform ergibt.

Der Schätzwert für den schiefen Prädiktor wird bei dieser Methode dann mithilfe der geschätzten Parameter und den Vergangenheitsdaten berechnet:

$$\widehat{O}_{\mathbf{K}, \ell_p}^{\text{HOARX}} = \widehat{Q}_{\mathbf{B}, \mathbf{K}, \ell_p} Q_{\mathbf{S}, \mathbf{K}, \ell_p}^{\text{determ}} \begin{bmatrix} \mathbf{Y} \\ \mathbf{U} \end{bmatrix}_{1|\ell_p}. \quad (3.67)$$

Eine von der Vorgehensweise sehr ähnliche Variante wird in [Lar04] beschrieben, sie unterscheidet sich jedoch in der Anwendung des HOARX-Modells und basiert auf

den einfachen Datenmatrizen. Wie in [Lar04] wird die Herleitung hier auf Basis der Prozessform gezeigt, deren deterministische Parameter sich jedoch nicht von denen der Innovationsform unterscheiden und das Vorgehen für beide Fälle somit identisch ist. Zunächst werden ebenfalls die Parameter eines ARX-Modells¹⁴ der Ordnung ℓ_p

$$\mathbf{y}(k) = - \sum_{l=1}^{\ell_p} \mathbf{A}_{\text{ARX},l} \mathbf{y}(k-l) + \sum_{l=0}^{\ell_p} \mathbf{B}_{\text{ARX},l} \mathbf{u}(k-l) + \boldsymbol{\xi}(k) \quad (3.68)$$

aus den Messdaten geschätzt, wofür zunächst die Gleichungen für alle Messdaten zusammengefasst werden:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{y}^T(\ell_p + 1) \\ \vdots \\ \mathbf{y}^T(N) \end{bmatrix}}_{=: \mathbf{Y}_{N-\ell_p}(\ell_p+1)} = \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{A}_{\text{ARX},\ell_p}^T \\ \vdots \\ \mathbf{A}_{\text{ARX},1}^T \\ \mathbf{B}_{\text{ARX},\ell_p}^T \\ \vdots \\ \mathbf{B}_{\text{ARX},0}^T \end{bmatrix}}_{=: \mathbf{P}} \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{y}(1) & \cdots & \mathbf{y}(N-\ell_p) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{y}(\ell_p) & \cdots & \mathbf{y}(N-1) \\ \mathbf{u}(1) & \cdots & \mathbf{u}(N-\ell_p) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{u}(\ell_p+1) & \cdots & \mathbf{u}(N) \end{bmatrix}}_{=: \mathbf{Z}_{\ell_p}} + \begin{bmatrix} \boldsymbol{\xi}^T(\ell_p + 1) \\ \vdots \\ \boldsymbol{\xi}^T(N) \end{bmatrix}. \quad (3.69)$$

Mit dem LS-Schätzer ergibt sich damit

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{P}} &= \left[\hat{\mathbf{A}}_{\text{ARX},\ell_p} \quad \cdots \quad \hat{\mathbf{A}}_{\text{ARX},1} \quad \hat{\mathbf{B}}_{\text{ARX},\ell_p} \quad \cdots \quad \hat{\mathbf{B}}_{\text{ARX},0} \right] \\ &= \mathbf{Y}_{N-\ell_p}(\ell_p+1) \mathbf{Z}_{\ell_p}^T \left(\mathbf{Z}_{\ell_p} \mathbf{Z}_{\ell_p}^T \right)^{-1}. \end{aligned} \quad (3.70)$$

Verwendet man das ARX-Modell (3.68), um ausgehend von den Messdaten bis zum Zeitpunkt k schrittweise die zukünftigen Ausgangsgrößen zu den Zeitpunkten $k+1, \dots, k+\ell_f$ zu berechnen¹⁵, und setzt dabei stets die zuvor berechneten Ausgangsgrößen ein, so erhält man mit den Datenmatrizen aus (3.2) die Gleichung

$$\text{vec}(\mathbf{Y}_f(k)) = \tilde{\mathbf{Q}}(\hat{\mathbf{P}}) \text{vec} \left(\begin{bmatrix} \mathbf{Y}_p(k) \\ \mathbf{U}_p(k) \end{bmatrix} \right) + \tilde{\mathbf{H}}(\hat{\mathbf{P}}) \text{vec}(\mathbf{U}_f(k)). \quad (3.71)$$

Dabei bildet die Funktion $\text{vec}(\cdot)$ aus einer Matrix einen Vektor, in dem sie die Spalten der Matrix von links nach rechts untereinander zu einem Vektor zusammen-

¹⁴Um Verwechslungen mit den Parametern des Zustandsraummodells zu vermeiden, werden die Parameter des ARX-Modells zusätzlich mit dem Index „ARX“ versehen.

¹⁵Im Gegensatz zu der hier angegebenen allgemeinen Formulierung werden in [Lar04] die Ordnung des ARX-Modells und der Zukunftshorizont identisch gewählt.

setzt. Die beiden Matrizen $\tilde{\mathbf{Q}}(\hat{\mathbf{P}})$ und $\tilde{\mathbf{H}}(\hat{\mathbf{P}})$ hängen nur von den Parametern des ARX-Modells ab.

Für die Elemente der Matrix $\tilde{\mathbf{H}}(\hat{\mathbf{P}})$, einer unteren Dreiecks-Toeplitz-Matrix, gilt der Zusammenhang

$$\tilde{h}_{i,j} = \begin{cases} \mathbf{0} & i < j, \\ \hat{\mathbf{B}}_{\text{ARX},i-j} = \hat{\mathbf{B}}_{\text{ARX},0} & i = j, \\ \hat{\mathbf{A}}_{\text{ARX},1} \tilde{h}_{i-1,j} + \dots + \hat{\mathbf{A}}_{\text{ARX},i-j} \tilde{h}_{j,j} + \hat{\mathbf{B}}_{\text{ARX},i-j} & i > j. \end{cases} \quad (3.72)$$

Die Matrix $\tilde{\mathbf{Q}}(\hat{\mathbf{P}})$ ist komplexer aufgebaut. Ihre ersten ℓ_p Spalten stellen den Zusammenhang zwischen den prädizierten und den vergangenen Ausgangsdaten her. Für die Elemente dieser Spalten gilt

$$\tilde{q}_{i,j} = \begin{cases} \hat{\mathbf{A}}_{\text{ARX},\ell-j} & i = 1, j \leq \ell_p, \\ \hat{\mathbf{A}}_{\text{ARX},1} \tilde{q}_{i-1,j} + \dots + \hat{\mathbf{A}}_{\text{ARX},i-1} \tilde{q}_{1,j} + \hat{\mathbf{A}}_{\text{ARX},i} & 0 < i \leq \ell_p, j \leq \ell_p, \\ \hat{\mathbf{A}}_{\text{ARX},1} \tilde{q}_{i-1,j} + \dots + \hat{\mathbf{A}}_{\text{ARX},i-1} \tilde{q}_{1,j} & i > \ell_p, j \leq \ell_p. \end{cases} \quad (3.73)$$

Die Elemente der weiteren ℓ_p Spalten sind ähnlich aufgebaut und beschreiben den Zusammenhang zwischen den prädizierten Ausgangsdaten und den vergangenen Eingangsdaten:

$$\tilde{q}_{i,j} = \begin{cases} \hat{\mathbf{B}}_{\text{ARX},\ell-j} & i = 1, \ell_p < j \leq 2\ell_p, \\ \hat{\mathbf{A}}_{\text{ARX},1} \tilde{q}_{i-1,j} + \dots + \hat{\mathbf{A}}_{\text{ARX},i-1} \tilde{q}_{1,j} + \hat{\mathbf{B}}_{\text{ARX},i} & 0 < i \leq \ell_p, \ell_p < j \leq 2\ell_p, \\ \hat{\mathbf{A}}_{\text{ARX},1} \tilde{q}_{i-1,j} + \dots + \hat{\mathbf{A}}_{\text{ARX},i-1} \tilde{q}_{1,j} & i > \ell_p, \ell_p < j \leq 2\ell_p. \end{cases} \quad (3.74)$$

Berechnet man zunächst aus dem ARX-Modell eine zugehörige Zustandsraumdarstellung mit den Vergangenheitsdaten als Zustand, können $\tilde{\mathbf{Q}}(\hat{\mathbf{P}})$ und $\tilde{\mathbf{H}}(\hat{\mathbf{P}})$ auch durch die Parameter der Zustandsraumdarstellung ausgedrückt werden [Lar04]. Es ergeben sich dabei sehr ähnliche Zusammenhänge wie beim vorherigen Ansatz für die Elemente der Matrizen $\mathbf{Q}_{\mathbf{B},\mathbf{K},i}$, $\mathbf{Q}_{\mathbf{S},\mathbf{K},i}^{\text{determ}}$ und $\mathbf{H}_{\mathbf{K},i}^{\text{determ}}$.

Ein Unterschied der beiden Ansätze liegt in der Prädiktion. Beim vorigen Ansatz nach [Chi07a] wird jeweils nur ein Zeitschritt mit dem ARX-Modell prädiziert, beim diesem Ansatz nach [Lar04] ist der Zukunftshorizont ℓ_t Schritte lang. Ein weiterer Unterschied zwischen den beiden hier beschriebenen HOARX-Ansätzen besteht in der Nutzung der über das HOARX-Modell berechneten Matrizen. Während im ersten hier beschriebenen Ansatz damit direkt der schiefe Prädiktor geschätzt wird, wird in [Lar04] die Matrix $\tilde{\mathbf{H}}(\hat{\mathbf{P}})$ verwendet, um den Einfluss der zukünftigen Ein-

gangswerte aus den Messdaten der zukünftigen Ausgangswerte zu entfernen:

$$\text{vec}(\mathbf{Y}_f(k)) - \tilde{\mathbf{H}}(\hat{\mathbf{P}}) \text{vec}(\mathbf{U}_f^T(k)) . \quad (3.75)$$

Damit bleiben bei dieser Methode die stochastischen Anteile des Rauschens bzw. der Innovationen in den zur Weiterverarbeitung genutzten Daten, beim vorigen Ansatz wurden diese aus den Messdaten entfernt. Daher ist das Ergebnis nach Verwendung des HOARX-Modells in diesem zweiten Ansatz nicht eine Schätzung des schiefen Prädiktors, sondern nur ein Zwischenergebnis, das dem schiefen Prädiktor in den anderen Verfahren jedoch sehr nahe kommt und im Ordnungsreduktionsschritt mit der kanonischen Korrelationsanalyse weiterverarbeitet wird.

Projektionsansatz

Der Projektionsansatz stammt aus geometrischen Überlegungen, wie sie bereits bei der Einführung der Projektionen im Abschnitt 3.1.3 erläutert wurden. Ausgehend von der Annahme, dass die gesamte deterministische Information aus den Vergangenheitsdaten mit Einfluss auf die zukünftigen Ausgänge in den Zuständen der Zustandsfolge $\widehat{\mathbf{X}}_{i+1}$ enthalten ist, führen die folgenden geometrischen Überlegungen auf einen Schätzwert für den schiefen Prädiktor (vgl. u. a. [OM96, Qin06, HK08, See09]). Dazu wird die Subspace-Gleichung für die zukünftigen Ausgänge der Innovationsform (3.54a)

$$\mathbf{Y}_{i+1|2i} = \mathbf{Q}_{B,i} \widehat{\mathbf{X}}_{i+1} + \mathbf{H}_i^{\text{determ}} \mathbf{U}_{i+1|2i} + \mathbf{H}_i^{\text{stoch}} \mathbf{E}_{i+1|2i} \quad (3.76)$$

betrachtet, die hier zur besseren Verständlichkeit der Überlegungen nochmals aufgeführt wurde. Um den schiefen Prädiktor zu erhalten, müssen die Einflüsse der zukünftigen Eingangsgrößen und die durch die zukünftigen Innovationen repräsentierten Einflüsse des Rauschens aus den Messdaten der zukünftigen Ausgangsgrößen entfernt werden.

Der Zeilenraum der zukünftigen Innovationen $\mathbf{E}_{i+1|2i}$ ist senkrecht zum gemeinsamen Zeilenraum der vergangenen Ein- und Ausgangsdaten, da die gesamte deterministische Information aus den Daten in der Zustandsfolge enthalten ist, es gilt also $\mathbf{E}_{i+1|2i} \perp [\mathbf{Y}^T \quad \mathbf{U}^T]_{1|i}^T$. Damit würde eine Projektion von $\mathbf{Y}_{i+1|2i}$ auf die Vergangenheitsdaten $[\mathbf{Y}^T \quad \mathbf{U}^T]_{1|i}^T$ den Einfluss der Innovationen entfernen, da dieser Anteil der Subspace-Gleichung für zukünftige Ausgänge dann eine Nullmatrix wird. Mit derselben Begründung könnte auch eine Projektion auf die zukünftigen Eingänge durchgeführt werden.

Der von den zukünftigen Eingängen abhängige Term soll jedoch ebenfalls entfernt werden. Da diese Daten bekannt sind, kann dies durch eine Projektion entlang die-

ser Daten geschehen. Zusammenfassend kann also das Entfernen der beiden unerwünschten Terme der Subspace-Ausgangsgleichung aus den zukünftigen Ausgangsdaten durch eine schiefe Projektion entlang der zukünftigen Eingangsdaten auf die vergangenen Ein- und Ausgangsdaten erreicht werden:

$$\widehat{\mathbf{O}}_i^{\text{Pro}} = \mathbf{Y}_{i+1|2i} / \mathbf{U}_{i+1|2i} \begin{bmatrix} \mathbf{Y} \\ \mathbf{U} \end{bmatrix}_{1|i}. \quad (3.77)$$

Wie bereits im Abschnitt 3.1.3 beschrieben, kann diese Projektion effizient durch eine LQ-Zerlegung berechnet werden. Die Matrix \mathbf{Q} muss dabei nicht explizit berechnet werden, da diese als Ähnlichkeitstransformation des Zustandsraums aufgefasst werden kann. Da nur eine mögliche Basis für den Zustandsraum von Interesse ist und über die physikalische Interpretierbarkeit dieser Basis in keinem der Fälle eine Aussage gemacht werden kann, muss die Matrix \mathbf{Q} nicht berücksichtigt werden.

Für die Prädiktorform kann mit dem Projektionsansatz ebenfalls ein Schätzwert für den schiefen Prädiktor gewonnen werden. Allerdings kann mit den Hankel-Matrizen hier keine geschlossene Lösung angegeben werden, sondern der schiefe Prädiktor muss zeilenweise berechnet werden (vgl. [Qin06, Chi07a]). Dies rührt von der Tatsache her, dass bei der Prädiktorform entlang zukünftiger Ein- und Ausgänge projiziert werden muss, allerdings für jede Ausgangsgröße in $\mathbf{Y}_{i+1|2i}$ nur bis zum Zeitpunkt davor. Würde entlang der kompletten zukünftigen Daten projiziert, wäre das Ergebnis dieser Projektion ein Nullraum, da die zukünftigen Daten selbst darin enthalten sind. Bei zeilenweiser Betrachtung wird für die h -te Blockzeile von $\mathbf{Y}_{i+1|2i}$ mit $1 \leq h \leq i$ entlang der reduzierten zukünftigen Ein- und Ausgangsdaten $\begin{bmatrix} \mathbf{Y}^T & \mathbf{U}^T \end{bmatrix}_{i+1|i+h}^T$ auf die Vergangenheitsdaten $\begin{bmatrix} \mathbf{Y}^T & \mathbf{U}^T \end{bmatrix}_{1|i}^T$ projiziert [Chi07a]. In [QL03, QLL05] wurde diese Vorgehensweise als PARSIM-Ansatz¹⁶ eingeführt.

Regressionsansatz

Beim Regressionsansatz nach [Knu01, HK08] wird, wie oben für den HOARX-Ansatz bereits beschrieben, zunächst aus der Subspace-Gleichung für die Zustandsfolgen der Prädiktorform (3.55c) ein Schätzwert für die Zustandsfolge $\widehat{\mathbf{X}}_{i+1}$ gewonnen, der auf den verfügbaren Messdaten basiert:

$$\widehat{\mathbf{X}}_{i+1} = \mathbf{Q}_{\text{S,K},i}^{\text{determ}} \begin{bmatrix} \mathbf{Y} \\ \mathbf{U} \end{bmatrix}_{1|i}. \quad (3.78)$$

¹⁶PARSIM steht für „parallel subspace identification method“ (engl. für parallele 4SID-Methode).

Setzt man diesen Schätzwert in die Subspace-Gleichungen für die zukünftigen Ausgangsgrößen der Innovationsform (3.54a) ein, so erhält man die Gleichung

$$\begin{aligned} \mathbf{Y}_{i+1|2i} &= \mathbf{Q}_{B,i} \mathbf{Q}_{S,K,i}^{\text{determ}} \begin{bmatrix} \mathbf{Y} \\ \mathbf{U} \end{bmatrix}_{1|i} + \mathbf{H}_i^{\text{determ}} \mathbf{U}_{i+1|2i} + \mathbf{H}_i^{\text{stoch}} \mathbf{E}_{i+1|2i} \\ &= \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{Q}_{B,i} \mathbf{Q}_{S,K,i}^{\text{determ}} & \mathbf{H}_i^{\text{determ}} \end{bmatrix}}_{=: \mathbf{P}} \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{Y} \\ \mathbf{U} \end{bmatrix}_{1|i} \\ \mathbf{U}_{i+1|2i} \end{bmatrix} + \mathbf{H}_i^{\text{stoch}} \mathbf{E}_{i+1|2i}. \end{aligned} \quad (3.79)$$

Fasst man den Summanden mit den Innovationen als Gleichungsfehler auf, so können die Parameter \mathbf{P} mit der LS-Methode (vgl. Abschnitt 2.2.1) geschätzt werden. Damit ergibt sich dann

$$\begin{bmatrix} \widehat{\mathbf{Q}}_{B,i} \widehat{\mathbf{Q}}_{S,K,i}^{\text{determ}} & \widehat{\mathbf{H}}_i^{\text{determ}} \end{bmatrix} = \widehat{\mathbf{P}} = \arg \min_{\mathbf{P}} \left\| \mathbf{Y}_{i+1|2i} - \mathbf{P} \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{Y} \\ \mathbf{U} \end{bmatrix}_{1|i} \\ \mathbf{U}_{i+1|2i} \end{bmatrix} \right\|_{\mathbb{F}}^2. \quad (3.80)$$

Den schiefen Prädiktor erhält man durch Multiplikation des vorderen Teils der geschätzten Parametermatrix mit $\begin{bmatrix} \mathbf{Y}^T & \mathbf{U}^T \end{bmatrix}_{1|i}^T$:

$$\widehat{\mathbf{O}}_i^{\text{LS}} = \widehat{\mathbf{Q}}_{B,i} \widehat{\mathbf{Q}}_{S,K,i}^{\text{determ}} \begin{bmatrix} \mathbf{Y} \\ \mathbf{U} \end{bmatrix}_{1|i} = \widehat{\mathbf{P}} \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{Y} \\ \mathbf{U} \end{bmatrix}_{1|i} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}. \quad (3.81)$$

Man kann zeigen, dass dieser Schätzwert für den schiefen Prädiktor genau mit dem Schätzwert aus dem Projektionsansatz übereinstimmt [HK08, See09], es gilt also

$$\widehat{\mathbf{O}}_i^{\text{Pro}} = \widehat{\mathbf{O}}_i^{\text{LS}}. \quad (3.82)$$

Somit kann auch dieser Ansatz über eine LQ-Zerlegung effizient implementiert werden.

Auch für die Prädiktorform kann ein solcher Regressionsansatz hergeleitet werden, wobei in der zu minimierenden Funktion dann die unbekannt Parameter mit \mathbf{P}_K bezeichnet werden und anstelle der zukünftigen Eingangsdaten im Regressor die zukünftigen Ein- und Ausgangsdaten stehen. Damit treten auch beim Regressionsansatz dieselben Schwierigkeiten bei der Prädiktorform im Zusammenhang mit den Hankel-Matrizen wie beim Projektionsansatz auf. Wählt man jedoch vorab die entsprechenden Elemente der Parametermatrix \mathbf{P}_K zu null, die zu ungewollten oder akausalen Schätzwerten führen würden, so kann der Regressionsansatz auch für die Prädiktorform verwendet werden. Allerdings lässt sich dann der Schätzwert für \mathbf{P}_K

nicht einfach über eine Pseudoinverse berechnen. Alternativ ist in [Win08] eine Möglichkeit angegeben, wie das entsprechende Regressionsproblem auf Basis der einfachen Datenmatrizen wie beim Projektionsansatz schrittweise gelöst werden kann.

Hilfsvariablenansatz

Der Hilfsvariablenansatz nach [VV07] geht von der Innovationsform der Subspace-Gleichung für die zukünftigen Ausgangsgrößen (3.54a) aus. Dabei wird zunächst der Anteil der zukünftigen Eingangsgrößen durch eine senkrechte Projektion auf das orthogonale Komplement ihres Zeilenraums entfernt:

$$\begin{aligned} \mathbf{Y}_{i+1|2i} / \mathbf{U}_{i+1|2i}^\perp &= \mathbf{Q}_{B,i} \widehat{\mathbf{X}}_{i+1} / \mathbf{U}_{i+1|2i}^\perp + \mathbf{H}_i^{\text{determ}} \underbrace{\mathbf{U}_{i+1|2i} / \mathbf{U}_{i+1|2i}^\perp}_{=0} \\ &+ \mathbf{H}_i^{\text{stoch}} \mathbf{E}_{i+1|2i} / \mathbf{U}_{i+1|2i}^\perp. \end{aligned} \quad (3.83)$$

Der Einfluss der Innovationen wird durch geeignete Hilfsvariablen \mathbf{Z} (vgl. auch Abschnitt 2.2.2) entfernt, indem die Gleichung mit diesen von rechts multipliziert wird. Bei der Wahl muss sowohl auf die Unkorreliertheit der Hilfsvariablen mit den Innovationen $\mathbf{E}_{i+1|2i}$ als auch auf die Tatsache geachtet werden, dass der verbleibende Anteil immer noch denselben Zeilenraum aufspannt wie der schiefe Prädiktor und kein Rangabfall auftritt. Diese beiden Bedingungen lassen sich nach [VV07] wie folgt definieren:

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \frac{1}{j} \left(\mathbf{E}_{i+1|2i} / \mathbf{U}_{i+1|2i}^\perp \right) \mathbf{Z}^\text{T} = \mathbf{0}, \quad (3.84a)$$

$$\text{rg} \left(\lim_{j \rightarrow \infty} \frac{1}{j} \left(\mathbf{E}_{i+1|2i} / \mathbf{U}_{i+1|2i}^\perp \right) \mathbf{Z}^\text{T} \right) = n. \quad (3.84b)$$

Aufgrund der ersten Bedingung (3.84a) fällt bei Multiplikation der von den Innovationen abhängige Term asymptotisch für $j \rightarrow \infty$ aus der Gleichung heraus, weshalb

$$\widehat{\mathbf{O}}_i^{\text{IV}} = \left(\mathbf{Y}_{i+1|2i} / \mathbf{U}_{i+1|2i}^\perp \right) \mathbf{Z}^\text{T} \quad (3.85)$$

eine asymptotisch erwartungstreue Schätzung des schiefen Prädiktors darstellt.

Gültige Hilfsvariablen \mathbf{Z} , die die Bedingungen (3.84) erfüllen, sind nach [VV07] beispielsweise die vergangenen Eingangsdaten $\mathbf{U}_{1|i}$ oder die gemeinsame Matrix der vergangenen Ein- und Ausgangsdaten $\left[\mathbf{Y}^\text{T} \quad \mathbf{U}^\text{T} \right]_{1|i}^\text{T}$.

Die IV-Schätzung des schiefen Prädiktors $\widehat{\mathbf{O}}_i^{\text{IV}}$ kann, ähnlich wie für die Projektionen im Abschnitt 3.1.3 vorgestellt, über eine LQ-Zerlegung nach der Definition 3.5

berechnet werden. Mit der LQ-Zerlegung der verwendeten Matrizen

$$\begin{bmatrix} \mathbf{U}_{i+1|2i} \\ \mathbf{Z} \\ \mathbf{Y}_{i+1|2i} \end{bmatrix} = \mathbf{L}\mathbf{Q}^T = \begin{bmatrix} \mathbf{L}_{11} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{L}_{21} & \mathbf{L}_{22} & \mathbf{0} \\ \mathbf{L}_{31} & \mathbf{L}_{32} & \mathbf{L}_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_1^T \\ \mathbf{Q}_2^T \\ \mathbf{Q}_3^T \end{bmatrix} \quad (3.86)$$

gilt für den schiefen Prädiktor

$$\hat{\mathbf{O}}_i^{\text{IV}} = \mathbf{L}_{32}\mathbf{L}_{22}^T. \quad (3.87)$$

Der Beweis für die Korrektheit dieser Berechnungsvorschrift ist im Anhang A.2 zu finden. Für eine numerisch effiziente Implementierung kann hier ebenfalls ausgenützt werden, dass die Matrix \mathbf{Q} zur Berechnung nicht benötigt wird.

Weitere Ansätze

Neben diesen vier verbreiteten Ansätzen und deren Varianten existieren einige weitere Ansätze zur Schätzung des schiefen Prädiktors. Ausgangspunkt für diese Ansätze stellt die Berücksichtigung der speziellen Strukturen der Parametermatrizen in den Subspace-Gleichungen dar. Mit Ausnahme der HOARX-Ansätze und der zeilenweisen Projektion wird bei allen hier vorgestellten Ansätzen diese Struktur nicht berücksichtigt. Damit wird die Kausalitätsbedingung zwischen den Daten implizit verletzt [Qin06, SM01], woraus eine ungenauere Schätzung des schiefen Prädiktors resultiert. Sowohl die zeilenweise Projektion als auch die HOARX-Ansätze berücksichtigen die Kausalitätsbedingung. Nur bei den HOARX-Ansätzen wird zusätzlich auch die Block-Toeplitz-Struktur berücksichtigt, da dort die Elemente der Matrizen aus den Parametern des HOARX-Modells aufgebaut und nicht direkt aus den Daten geschätzt werden.

In [PSD96] werden unter anderem eine LS-Lösung unter Berücksichtigung der strukturellen Bedingungen sowie ein zweistufiges Verfahren vorgeschlagen, bei dem auf Basis einer ersten Schätzung für die Systemmatrizen die Parametermatrizen mit diesen aufgebaut und dann die Systemmatrizen erneut bestimmt werden. Dabei wird jedoch nicht genauer darauf eingegangen, auf welche Weise die erste Schätzung der Systemmatrizen berechnet wird. Möglich wären ein Ansatz entsprechend der HOARX-Ansätze oder eine Schätzung mit einer 4SID-Methode zunächst ohne Berücksichtigung der Parametermatrixstrukturen.

3.2.3 Ordnungsbestimmung

Die in den vorigen Schritten verwendeten Beschreibungen auf Basis der Messdaten können als Modelle hoher Ordnung aufgefasst werden, mit denen das Verhalten des Systems nachgebildet wird. Die in diesem Schritt durchgeführte Schätzung der Ordnung für das gesuchte Zustandsraummodell kann daher auch als Ordnungsreduktion betrachtet werden.

Ordnungsreduktion beim schiefen Prädiktor

Der geschätzte schiefe Prädiktor wird im Folgenden stets mit $\widehat{\mathbf{O}}_i$ bezeichnet, da die Ergebnisse für alle im vorherigen Abschnitt hergeleiteten Schätzwerte des schiefen Prädiktors unabhängig von der gewählten Form des Zustandsraummodells gelten.

Die Ordnungsreduktion wird beim schiefen Prädiktor mithilfe der gewöhnlichen SVD nach der Definition 3.1 durchgeführt:

$$\widehat{\mathbf{O}}_i = \mathbf{M}\mathbf{S}\mathbf{N}^T. \quad (3.88)$$

Zusätzlich können in diesem Schritt noch Gewichtungsmatrizen zur Anwendung kommen. Dazu wird der Schätzwert des schiefen Prädiktors vor der Singulärwertzerlegung von rechts und links noch mit je einer quadratischen Gewichtungsmatrix multipliziert:

$$\mathbf{W}_1 \widehat{\mathbf{O}}_i \mathbf{W}_2 = \mathbf{M}\mathbf{S}\mathbf{N}^T. \quad (3.89)$$

Die Gewichtungsmatrix \mathbf{W}_1 muss dabei vollen Rang haben und das Produkt der Vergangenheitsdaten mit der Gewichtungsmatrix \mathbf{W}_2 muss den Rang der Vergangenheitsdaten behalten [OM96]. In [VV07] wird die Gewichtsmatrix \mathbf{W}_2 ebenfalls mit vollem Rang angenommen.

Für die nachfolgende Schätzung der Systemparameter muss der Einfluss der Gewichtungsmatrizen zumindest teilweise wieder aus den Faktoren der SVD entfernt werden, um gültige Schätzwerte zu erhalten (vgl. Abschnitt 3.2.4). Die Gewichtungsmatrix \mathbf{W}_1 kann als Filter interpretiert werden, das einen Einfluss auf den Frequenzbereich hat, in dem das Modell die Messdaten nachbildet [OM95].

Beide Gewichte haben einen Einfluss auf die Basis des Zustandsraums und auf die Singulärwerte der Zerlegung (vgl. auch Abschnitt 3.3.3). Die konkrete Wahl der Gewichte für eine bestimmte 4SID-Methode hängt auch von der Art und Weise ab, wie der schiefe Prädiktor berechnet und damit das Verfahren formuliert wird. Je nach Formulierung kann eine unterschiedliche Wahl der Gewichte notwendig sein, um das Verhalten eines bestimmten 4SID-Algorithmus zu beschreiben.

Kanonische Korrelationsanalyse

Eine alternative Formulierung zu dieser Vorgehensweise ist für spezielle Gewichtsmatrizen (vgl. beispielsweise [PSD96, Chi09a]) die kanonische Korrelationsanalyse (CCA¹⁷), die in einigen 4SID-Methoden, u. a. der statistischen CVA, angewendet wird¹⁸. Sie geht zurück auf [Hot36, Tso81] und wurde in [Aka74, Aka75, Aka76] auf Zeitreihen erweitert.

Die Idee der CCA ist die Suche nach zwei Transformationsmatrizen, sodass die untersuchten Daten in den mit diesen Matrizen transformierten Koordinatensystemen maximal korreliert sind (vgl. auch [Kat05, See09]). Der Vorteil bei der Anwendung der CCA für die 4SID liegt darin, dass nicht durch eine ungeschickte Wahl der Koordinatensysteme eine Korrelation verdeckt werden kann. Eine Lösung für die Transformationsmatrizen kann mit einer GSVD bzw. einer SVD berechnet werden, da sich die GSVD auf die SVD mit geeigneter Gewichtung zurückführen lässt. Die anschauliche Interpretation der Korrelation zwischen den transformierten Daten, die als kanonische Variablen bezeichnet werden, entspricht genau der geometrischen Interpretation der SVD, die im Abschnitt 3.1.2 zu finden ist.

Bei der 4SID wird die CCA dazu verwendet, die Korrelation zwischen den um den Einfluss der zukünftigen Eingangsgrößen bereinigten zukünftigen Ausgangsdaten bzw. den Daten des schiefen Prädiktors und den Vergangenheitsdaten zu berechnen [Lar83, Lar99b, PSD96, Chi09a]. Sie eignet sich also insbesondere auch für den zweiten HOARX-Ansatz, bei dem der stochastische Anteil der Daten nicht entfernt und damit kein echter Schätzwert für den schiefen Prädiktor berechnet wurde, da diese stochastischen Anteile unkorreliert mit den Vergangenheitsdaten sind und bei diesem Schritt somit herausfallen. Im Folgenden wird an diesem Beispiel die Vorgehensweise mit der CCA nach [Lar04, Lar99b] gezeigt, wobei die einfachen Datenmatrizen zum Einsatz kommen.

Für die um die zukünftigen Eingangsgrößen bereinigten Ausgangsdaten aus dem zweiten HOARX-Ansatz wird im Folgenden die abkürzende Schreibweise

$$\mathbf{f}_{\ell_f}(k) = \text{vec}\left(\mathbf{Y}_f^T(k)\right) - \tilde{\mathbf{H}} \text{vec}\left(\mathbf{U}_f^T(k)\right) \quad (3.90)$$

verwendet. Für die Matrix \mathbf{F}_{ℓ_f} gilt

$$\mathbf{F}_{\ell_f} = \left[\mathbf{f}_{\ell_f}(\ell_p + 1) \quad \cdots \quad \mathbf{f}_{\ell_f}(N - \ell_f + 1) \right]. \quad (3.91)$$

Der Vektor $\mathbf{p}_{\ell_p}(k)$ enthält alle Vergangenheitsdaten für den Zeitpunkt k bis zur

¹⁷CCA steht für „canonical correlation analysis“ (engl. für kanonische Korrelationsanalyse).

¹⁸In den Veröffentlichungen zur statistischen CVA wird die CCA selbst auch als CVA bezeichnet. Im Rahmen dieser Arbeit ist mit CVA stets die komplette 4SID-Methode gemeint, mit CCA wird der Teilschritt der kanonischen Korrelationsanalyse bezeichnet.

Ordnung ℓ_p des ARX-Modells zurück, es gilt also

$$\mathbf{p}_{\ell_p}(k) = \begin{bmatrix} \mathbf{y}^T(k-1) & \mathbf{u}^T(k-1) & \cdots & \mathbf{y}^T(k-\ell_p) & \mathbf{u}^T(k-\ell_p) \end{bmatrix}^T. \quad (3.92)$$

Die Matrix \mathbf{P}_{ℓ_p} ist analog zur Matrix \mathbf{F}_{ℓ_f} definiert:

$$\mathbf{P}_{\ell_p} = \begin{bmatrix} \mathbf{p}_{\ell_p}(\ell_p + 1) & \cdots & \mathbf{p}_{\ell_p}(N - \ell_f + 1) \end{bmatrix}. \quad (3.93)$$

Damit können die der CCA zugrunde liegenden Stichprobenkovarianzen

$$\widehat{\Sigma}_{\mathbf{P}\mathbf{F}} = \frac{1}{N - \ell_p} \mathbf{P}_{\ell_p} \mathbf{F}_{\ell_f}^T, \quad (3.94a)$$

$$\widehat{\Sigma}_{\mathbf{P}\mathbf{P}} = \frac{1}{N - \ell_p} \mathbf{P}_{\ell_p} \mathbf{P}_{\ell_p}^T \quad \text{und} \quad (3.94b)$$

$$\widehat{\Sigma}_{\mathbf{F}\mathbf{F}} = \frac{1}{N - \ell_p} \mathbf{F}_{\ell_f} \mathbf{F}_{\ell_f}^T \quad (3.94c)$$

berechnet werden.

Die CCA zwischen \mathbf{F}_{ℓ_f} und \mathbf{P}_{ℓ_p} kann nun mit der reduzierten GSVD von $\widehat{\Sigma}_{\mathbf{P}\mathbf{F}}$ nach der Definition 3.4 berechnet werden, wobei die beiden anderen Stichprobenkovarianzen als Gewichtungsmatrizen verwendet werden [Lar99b, Gič09]:

$$\widetilde{\mathbf{M}} \widehat{\Sigma}_{\mathbf{P}\mathbf{F}} \widetilde{\mathbf{N}}^T = \widetilde{\mathbf{S}} \quad \text{mit} \quad \widetilde{\mathbf{M}} \widehat{\Sigma}_{\mathbf{P}\mathbf{P}} \widetilde{\mathbf{M}}^T = \mathbf{I} \quad \text{und} \quad \widetilde{\mathbf{N}} \widehat{\Sigma}_{\mathbf{F}\mathbf{F}} \widetilde{\mathbf{N}}^T = \mathbf{I}. \quad (3.95)$$

Daraus ergeben sich die kanonischen Variablen $\widetilde{\mathbf{M}} \mathbf{p}_{\ell_p}(k)$ und $\widetilde{\mathbf{N}} \mathbf{f}_{\ell_f}(k)$. Die kanonischen Variablen haben durch die Wahl der Gewichtungsmatrizen jeweils eine Einheitsmatrix als Stichprobenkovarianzmatrix und sind somit unabhängig von der Korrelation innerhalb der Vergangenheits- bzw. Zukunftsdaten jeweils paarweise unkorreliert. Die Korrelation zwischen den kanonischen Variablen ist durch die Singulärwertmatrix gegeben. Sie sind also nur komponentenweise korreliert und ihre Komponenten in absteigender Reihenfolge der Korrelation angeordnet. Die kanonische Variable $\widetilde{\mathbf{M}} \mathbf{p}_{\ell_p}(k)$ kann als Schätzwert des Zustand eines Zustandsraummodells interpretiert werden, ähnlich der Zwischenvariablen bei der geometrischen Interpretation der SVD im Abschnitt 3.1.2 (vgl. auch [Lar83, Lar99b, Gič09]).

Schätzung der Ordnung

Wären die Messdaten ideal und damit rauschfrei, würde die Zahl der Singulärwerte bei der SVD des schiefen Prädiktors und bei der CCA genau der gesuchten Ordnung des Systems entsprechen. Durch das Rauschen sind jedoch alle Singulärwerte ungleich null. In einer Vielzahl an Veröffentlichungen wird die manuelle Analyse

der Singulärwerte vorgeschlagen, wobei meist nach einer großen Differenz $s_i - s_{i+1}$ gesucht werden soll, oder es wird gar von der Kenntnis der korrekten Ordnung ausgegangen. Ist die Ordnung nicht bekannt, so wird es mit sinkendem Signal-zu-Rausch-Verhältnis immer schwieriger die korrekte Ordnung zu ermitteln [VV07].

Es existieren auch Ansätze zur automatisierten Wahl der Ordnung über sogenannte Informationskriterien. Informationskriterien stellen ein Maß für die Güte eines Modells dar (vgl. auch [Kru08]). In [Bau98, Bau01] werden verschiedene Kriterien für die Ordnungswahl in 4SID-Algorithmen vorgeschlagen und untersucht. Diese basieren auf der Auswertung der Singulärwerte und einem Term zur Bestrafung zu hoher Ordnungen, damit ein möglichst guter Kompromiss zwischen niedriger Ordnung und gutem Nachbilden der Messdaten als Minimum eines solchen Kriteriums gefunden wird. Die Ergebnisse in der angegebenen Literatur sowie die Analyse in [Kru08] haben jedoch gezeigt, dass die Wahl eines allgemein gültigen geeigneten Bestrafungsterms eine bisher ungelöste Problemstellung darstellt.

Ein spezielles, sehr häufig genutztes Informationskriterium ist das Akaike-Informationskriterium (AIC¹⁹), welches von Hirotugu Akaike²⁰ ursprünglich für die Bewertung von AR-Modellen in [Aka73] vorgeschlagen und später erweitert wurde. Es basiert auf der bedingten Wahrscheinlichkeit, mit der die Parameter eines Modells den Datensatz beschreiben, und einem Bestrafungsterm für die Anzahl der Parameter in Abhängigkeit der Ordnung n . Verallgemeinert für die Ein- und Ausgangsdaten \mathbf{U} bzw. \mathbf{Y} und den von der Ordnung n abhängigen Parametern $\mathbf{P}(n)$ kann das AIC geschrieben werden als

$$\text{AIC}(n) = -2 \max_{\mathbf{P}(n)} \left\{ \ln \left(p(\mathbf{Y}|\mathbf{U}, \mathbf{P}(n)) \right) \right\} + 2N_{\mathbf{P}}(n) = -2\mathcal{L}(\hat{\mathbf{P}}(n)) + 2N_{\mathbf{P}}(n), \quad (3.96)$$

wobei $N_{\mathbf{P}}(n)$ die Anzahl der invarianten Parameter des Modells in Abhängigkeit der Ordnung darstellt. Mit invarianten Parametern sind dabei die Parameter gemeint, die tatsächlich auf das Ein-/Ausgangsverhalten Einfluss haben (vgl. auch [Kru08]). Bei Zustandsraummodellen ist beispielsweise die Anzahl der Elemente in den Parametermatrizen deutlich höher als die Zahl der invarianten Parameter, welche nach [CBW79]

$$N_{\mathbf{P},\text{ZRM}}(n) = n(2q + p) + pq + \frac{1}{2}q(q + 1) \quad (3.97)$$

beträgt.

¹⁹AIC steht für „Akaike information criterion“ (engl. für Akaike-Informationskriterium).

²⁰Hirotugu Akaike, * 5. November 1927 in Fujinomiya, Japan, † 4. August 2009; Statistiker; Direktor des japanischen Instituts für statistische Mathematik, Professor für Statistik, Prädiktion und Regelung; Träger des Kyoto-Preises 2006

Das AIC wurde für sehr große Stichproben mit $N \rightarrow \infty$ entworfen. Damit die Ordnungswahl bei kleinen Stichproben ebenfalls wie gewünscht funktioniert, wurde in [Sug78, HT89] eine Erweiterung des AIC mit einer Korrektur für kleine Stichproben entwickelt, welche sich für große Stichproben der ursprünglichen Version annähert. Dazu wird der Term $N_{\mathcal{P},\text{ZRM}}(n)$ im AIC mit einem Korrekturterm multipliziert. Nach [Lar99b, Kru08] gilt für Zustandsraummodelle damit insgesamt

$$\text{AICc}(n) = -2\mathcal{L}(\widehat{\mathbf{P}}(n)) + 2 \frac{N_{\mathcal{P},\text{ZRM}}(n)}{N - \left(\frac{N_{\mathcal{P},\text{ZRM}}(n)}{n} + \frac{n+1}{2} \right)}. \quad (3.98)$$

Weitere Informationen können den ausführlichen Darstellungen in [Kru08] entnommen werden, wo auch auf die Anwendung der Informationskriterien in 4SID-Methoden eingegangen wird.

Das Ergebnis aller Vorgehensweisen ist die geschätzte Ordnung \hat{n} . Mit dieser werden beim Ansatz der SVD des schiefen Prädiktors die reduzierten Matrizen $\mathbf{M}_{\hat{n}}$, $\mathbf{N}_{\hat{n}}$ und $\mathbf{S}_{\hat{n}}$ wie im Abschnitt 3.1.2 beschrieben gebildet:

$$\widehat{\mathbf{O}}_{i,\hat{n}} = \mathbf{M}_{\hat{n}} \mathbf{S}_{\hat{n}} \mathbf{N}_{\hat{n}}^T \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{W}_1 \widehat{\mathbf{O}}_{i,\hat{n}} \mathbf{W}_2 = \mathbf{M}_{\hat{n}} \mathbf{S}_{\hat{n}} \mathbf{N}_{\hat{n}}^T. \quad (3.99)$$

Bei der CCA werden nur die ersten \hat{n} Spalten der Matrix $\widetilde{\mathbf{M}}$ verwendet, um den geschätzten Zustandsvektor zu bestimmen, die weiteren Spalten werden zu null gewählt. Damit ergibt sich für jeden Zeitpunkt $k > \ell_p$ mit

$$\widehat{\mathbf{x}}(k) = \widetilde{\mathbf{M}}_{\hat{n}} \mathbf{p}_{\ell_p}(k) = \begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \widetilde{\mathbf{M}} \mathbf{p}_{\ell_p}(k) \quad (3.100)$$

ein Schätzwert für den Zustandsvektor.

3.2.4 Parameterschätzung

Mit der im vorigen Schritt bestimmten Ordnung \hat{n} des Zustandsraummodells können nun die Parametermatrizen bestimmt werden. Dafür existieren in der Literatur bei Verwendung des schiefen Prädiktors zwei Ansätze, der *Zeitinvarianz-Ansatz* und der *Zustandsfolgen-Ansatz*. Der Hauptunterschied liegt in der Nutzung des ordnungsreduzierten Schätzwerts des schiefen Prädiktors aus der Gleichung (3.99). Beim Zeitinvarianz-Ansatz wird die Struktur der Beobachtbarkeitsmatrix $\mathbf{Q}_{\text{B},\hat{n}}$ ausgenutzt, beim Zustandsfolgen-Ansatz wird zunächst eine Schätzung der Zustandsfolge durchgeführt. Die Anwendung der CCA im vorherigen Schritt führt direkt auf den Zustandsfolgen-Ansatz, da ihr Ergebnis eine Schätzung der Zustandsfolge ist.

Zeitinvarianz-Ansatz

Das Prinzip dieses Ansatzes wurde im Rahmen der Realisierungstheorie entwickelt [HK66], er wird in der 4SID-Literatur daher teilweise auch unter dem Namen „realization approach“²¹ beschrieben. In der Literatur ist er meist im Zusammenhang mit der Prozessform zu finden, teilweise wird auch das zu untersuchende System in Prozess- oder Innovationsform in je ein deterministisches und ein stochastisches Teilsystem aufgeteilt, u. a. in [OM96, Kat05]. Da der Zeitinvarianz-Ansatz im Rahmen dieser Arbeit keine Rolle spielt, wird hier nur kurz die Vorgehensweise skizziert.

Beim Zeitinvarianz-Ansatz wird zuerst die Beobachtbarkeitsmatrix $\hat{Q}_{B,\hat{n}} = M_{\hat{n}} S_{\hat{n}}^{\frac{1}{2}}$ bzw. $\hat{Q}_{B,K,\hat{n}} = M_{K,\hat{n}} S_{K,\hat{n}}^{\frac{1}{2}}$ geschätzt (vgl. Gleichung (3.62)). Wurden bei der SVD Gewichtungsmatrizen verwendet, so muss die rechte Seite der Gleichungen außerdem durch Multiplikation mit der Inversen der Gewichtungsmatrix W_1 von links korrigiert werden.

Nun wird sich der speziellen Struktur der Beobachtbarkeitsmatrix bedient, deren erste \hat{n} Zeilen der Beobachtbarkeitsmatrix genau der Ausgangsmatrix \hat{C} entsprechen. Zur Schätzung von A bzw. A_K wird die Zeitinvarianz des Systems ausgenutzt, wobei zwei Untermatrizen der Beobachtbarkeitsmatrix zur Anwendung kommen, die man durch Streichen der ersten bzw. letzten Blockzeile erhält. Der Zusammenhang zwischen diesen beiden Matrizen entspricht genau der gesuchten Systemmatrix A bzw. A_K . Am Beispiel der Innovationsform soll dies nochmals mit Gleichungen dargestellt werden:

$$\underline{Q}_{B,\hat{n}} := \begin{bmatrix} I & 0 \end{bmatrix} Q_{B,\hat{n}} = \begin{bmatrix} C \\ \vdots \\ CA^{\hat{n}-2} \end{bmatrix} = Q_{B,\hat{n}-1}, \quad (3.101a)$$

$$\overline{Q}_{B,\hat{n}} := \begin{bmatrix} 0 & I \end{bmatrix} Q_{B,\hat{n}} = \begin{bmatrix} CA \\ \vdots \\ CA^{\hat{n}-1} \end{bmatrix}. \quad (3.101b)$$

Damit erhält man den Schätzwert der Systemmatrix A durch Anwenden der LS-Schätzung auf die Gleichung

$$\underline{Q}_{B,\hat{n}} A = \overline{Q}_{B,\hat{n}}, \quad (3.102)$$

es gilt also

$$\hat{A} = \underline{Q}_{B,\hat{n}}^{\dagger} \overline{Q}_{B,\hat{n}}. \quad (3.103)$$

²¹engl. für Realisierungsansatz

Entsprechend könnte diese Vorgehensweise auch bei der Prädiktorform angewendet werden.

Für die Bestimmung der noch fehlenden Parametermatrizen existieren verschiedene Möglichkeiten. Sie basieren im Prinzip auf der Tatsache, dass nach der Schätzung der System- und Ausgangsmatrix Gleichungen gefunden werden können, die linear in den noch unbekanntenen Parametern sind. Diese können dann durch eine LS-Schätzung gewonnen werden. Da die Gleichungen hierfür sehr umfangreich sind, sei hierzu auf die Literatur, z. B. [Kat05, Qin06, VV07], verwiesen.

Zustandsfolgen-Ansatz

Im Gegensatz zum Zeitinvarianz-Ansatz wird bei diesem Ansatz zunächst die Zustandsfolge geschätzt. Mit deren Hilfe können dann die Systemparameter per Regression berechnet werden. Der Zustandsfolgen-Ansatz ist der in der neueren Literatur häufiger verwendete Ansatz zur Parameterschätzung. Neben der eleganteren und kompakteren mathematischen Formulierung und damit auch Implementierung im Vergleich zum Zeitinvarianz-Ansatz kann er auch auf andere Systemklassen wie LPV-Systeme (z. B. [Win08]) erweitert werden.

Auch beim Zustandsfolgen-Ansatz existieren verschiedene Varianten der Umsetzung, die sich in der bereits zitierten 4SID-Literatur finden. Unter anderem hängen diese auch von den zuvor gewählten Schritten ab. Wurde bei der Ordnungsreduktion keine Gewichtung des schiefen Prädiktors gewählt, so kann nach (3.62) direkt ein Teil der SVD als Schätzwert der Zustandsfolge verwendet werden:

$$\widehat{\mathbf{X}}_{i+1} = \mathbf{S}_{\hat{n}}^{\frac{1}{2}} \mathbf{N}_{\hat{n}}^{\text{T}}. \quad (3.104)$$

Bei Verwendung der Gewichtungsmatrizen muss bei einer regulären Gewichtungsmatrix \mathbf{W}_2 mit der Inversen korrigiert werden:

$$\widehat{\mathbf{X}}_{i+1} = \mathbf{S}_{\hat{n}}^{\frac{1}{2}} \mathbf{N}_{\hat{n}}^{\text{T}} \mathbf{W}_2^{-1}. \quad (3.105)$$

Ist die Matrix \mathbf{W}_2 nicht regulär, so muss ein Umweg über die Schätzung der Beobachtbarkeitsmatrix $\widehat{\mathbf{Q}}_{\text{B},\hat{n}} = \mathbf{W}_1^{-1} \mathbf{M}_{\hat{n}} \mathbf{S}_{\hat{n}}^{\frac{1}{2}}$ bzw. $\widehat{\mathbf{Q}}_{\text{B},\mathbf{K},\hat{n}} = \mathbf{W}_1^{-1} \mathbf{M}_{\mathbf{K},\hat{n}} \mathbf{S}_{\mathbf{K},\hat{n}}^{\frac{1}{2}}$ gemacht werden, mit welcher dann die Zustandsfolge geschätzt werden kann:

$$\widehat{\mathbf{X}}_{i+1} = \widehat{\mathbf{Q}}_{\text{B},\hat{n}}^{\dagger} \widehat{\mathbf{O}}_{i,\hat{n}} \quad \text{bzw.} \quad \widehat{\mathbf{X}}_{i+1} = \widehat{\mathbf{Q}}_{\text{B},\mathbf{K},\hat{n}}^{\dagger} \widehat{\mathbf{O}}_{\mathbf{K},i,\hat{n}}. \quad (3.106)$$

Die Vorgehensweise zur Schätzung der Parametermatrizen basierend auf [OM96] wird hier am Beispiel der Innovationsform dargestellt. Zunächst werden die vier Parametermatrizen \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{C} und \mathbf{D} durch eine LS-Schätzung bestimmt. Dazu werden

aus der wie oben beschrieben geschätzten Zustandsfolge zwei um einen Zeitschritt versetzte Zustandsfolgen $\widehat{\mathbf{X}}(k)$ und $\widehat{\mathbf{X}}(k+1)$ gebildet, welche entsprechend der Gleichung (3.3) mit der Länge $j-1$ aufgebaut sind. Zusammen mit den zugehörigen einfachen Datenmatrizen der Länge $j-1$ (vgl. Gleichung (3.2)) ergibt sich die folgende Gleichung [HK08]:

$$\begin{bmatrix} \widehat{\mathbf{X}}(k+1) \\ \mathbf{Y}(k) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \widehat{\mathbf{X}}(k) \\ \mathbf{U}(k) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{K} \\ \mathbf{I} \end{bmatrix} \mathbf{E}(k). \quad (3.107)$$

Zunächst wird auf der rechten Seite nur der linke Summand betrachtet [VV07]. Für die vier darin linear vorkommenden Parametermatrizen ergibt sich mit dem LS-Schätzer

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \widehat{\mathbf{A}} & \widehat{\mathbf{B}} \\ \widehat{\mathbf{C}} & \widehat{\mathbf{D}} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \widehat{\mathbf{A}} & \widehat{\mathbf{B}} \\ \widehat{\mathbf{C}} & \widehat{\mathbf{D}} \end{bmatrix} \\ &= \arg \min_{\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}, \mathbf{D}} \left\| \begin{bmatrix} \widehat{\mathbf{X}}(k+1) \\ \mathbf{Y}(k) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \widehat{\mathbf{X}}(k) \\ \mathbf{U}(k) \end{bmatrix} \right\|_{\mathbf{F}}^2 \\ &= \begin{bmatrix} \widehat{\mathbf{X}}(k+1) \\ \mathbf{Y}(k) \end{bmatrix} \left(\begin{bmatrix} \widehat{\mathbf{X}}^{\mathbf{T}}(k) & \mathbf{U}^{\mathbf{T}}(k) \end{bmatrix}^{\dagger} \right)^{\mathbf{T}}. \end{aligned} \quad (3.108)$$

Die Residuen dieser LS-Lösung

$$\begin{bmatrix} \widehat{\boldsymbol{\Psi}}(k+1) \\ \widehat{\boldsymbol{\Xi}}(k) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \widehat{\mathbf{X}}(k+1) \\ \mathbf{Y}(k) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \widehat{\mathbf{A}} & \widehat{\mathbf{B}} \\ \widehat{\mathbf{C}} & \widehat{\mathbf{D}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \widehat{\mathbf{X}}(k) \\ \mathbf{U}(k) \end{bmatrix} \quad (3.109)$$

entsprechen im Idealfall den Folgen der System- und Messrauschprozesse in der Prozessform des Zustandsraummodells (siehe Abschnitt 2.1.2). Mit den zugehörigen Stichprobenkovarianzen der Rauschprozesse und der Zustandsgrößen kann die Kalman-Matrix berechnet werden [VV07]:

$$\widehat{\mathbf{K}} = \left(\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\widehat{\boldsymbol{\Psi}}\widehat{\boldsymbol{\Xi}}} + \widehat{\mathbf{A}}\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\widehat{\mathbf{X}}\widehat{\mathbf{X}}}\widehat{\mathbf{C}}^{\mathbf{T}} \right) \left(\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\widehat{\boldsymbol{\Xi}}\widehat{\boldsymbol{\Xi}}} + \widehat{\mathbf{C}}\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}_{\widehat{\mathbf{X}}\widehat{\mathbf{X}}}\widehat{\mathbf{C}}^{\mathbf{T}} \right)^{-1}. \quad (3.110)$$

Die Schätzung der Systemparameter bei Verwendung des Zustandsfolgenschätzwerts der CCA aus der Gleichung (3.100) läuft genauso ab. Unter Verwendung dieser Schätzwerte werden die Parametermatrizen mittels Regression wie eben berechnet (vgl. auch [Lar83, Lar99b]).

Mit der Berechnung der deterministischen Systemparameter und den Kovarianzmatrizen des Rauschens sowie ggf. der Kalman-Matrix ist der Identifikationsprozess mit den 4SID-Verfahren abgeschlossen. An dem in diesem Abschnitt erläuterten

Ablauf ist deutlich der generelle Unterschied der 4SID-Methoden zum klassischen Systemidentifikationsprozess aus dem Abschnitt 2.2 erkennbar. Es findet, wenn die wenigen Parameter der Algorithmen, wie beispielsweise die Zeilenzahl der Block-Hankel-Matrizen, korrekt gewählt wurden, keinerlei Iteration statt, und es werden zunächst die Ordnung und dann die Parameter des LTI-Systems direkt aus den Messdaten gewonnen. Der Ablauf mit den vier beschriebenen Schritten und ihren verschiedenen Realisierungsmöglichkeiten ist in der Abbildung 3.4 in einem Flussdiagramm nochmals zusammengefasst.

3.3 Geometrische Algorithmen

Die geometrischen Verfahren sind die in der Literatur am häufigsten verwendeten 4SID-Varianten. Dies lässt sich unter anderem durch die im Vergleich zu den statistischen Verfahren anschaulichere Herangehensweise sowie der Tatsache erklären, dass es die meisten Varianten an 4SID-Verfahren in dieser Kategorie gibt. Besonderen Auftrieb gab ihnen die Veröffentlichung eines generischen geometrischen Algorithmus in [OM95] und die ausführlichere Darstellung in [OM96]. Durch diese Darstellung in einem einheitlichen Rahmen sowie der ausführlichen Beschreibung der Verfahren, der die beschriebenen Algorithmen auch als Quellcode für MATLAB beilagen, wurde die 4SID einem breiteren Publikum bekannt. Zusätzlich erschien eine ähnliche Implementierung eines generischen Algorithmus in der SYSTEM IDENTIFICATION TOOLBOX von MATLAB [Mat09] unter dem Funktionsnamen `n4sid` (vgl. auch [Lju99]), wodurch die geometrischen Verfahren zusätzliche Verbreitung fanden. Jüngere Publikationen zur 4SID wie beispielsweise [CM03, PMLHB05] enthalten ebenfalls sehr ähnliche Formulierungen eines generischen Algorithmus.

Neben der bereits erwähnten geometrischen Interpretation der eigentlich statistisch hergeleiteten CVA sind die „Numerical Algorithms for Subspace State Space System Identification“²² (N4SID) und die „Multivariable Output Error State Space Identification“²³ (MOESP) die beiden wichtigsten Vertreter in der Literatur, welche im Rahmen des generischen Algorithmus in [OM95] betrachtet wurden. Dort wurde gezeigt, dass sich diese drei Verfahren, auf die sich auch dieser Abschnitt beschränkt, im Rahmen der generischen Formulierung nur durch unterschiedliche Gewichtungsmatrizen im Ordnungsreduktionsschritt unterscheiden. Dies vereinfacht auch den Vergleich der Verfahren. Bevor hier der Ansatz des generischen Algorithmus vorgestellt wird, werden zunächst die originalen Verfahren N4SID und MOESP auf Basis des allgemeinen Ablaufs aus dem vorigen Abschnitt erläutert.

²²engl. für numerische Algorithmen zur Unterraum-basierten Systemidentifikation im Zustandsraum

²³engl. für Ausgangsfehler-basierte Mehrgrößen-Systemidentifikation im Zustandsraum

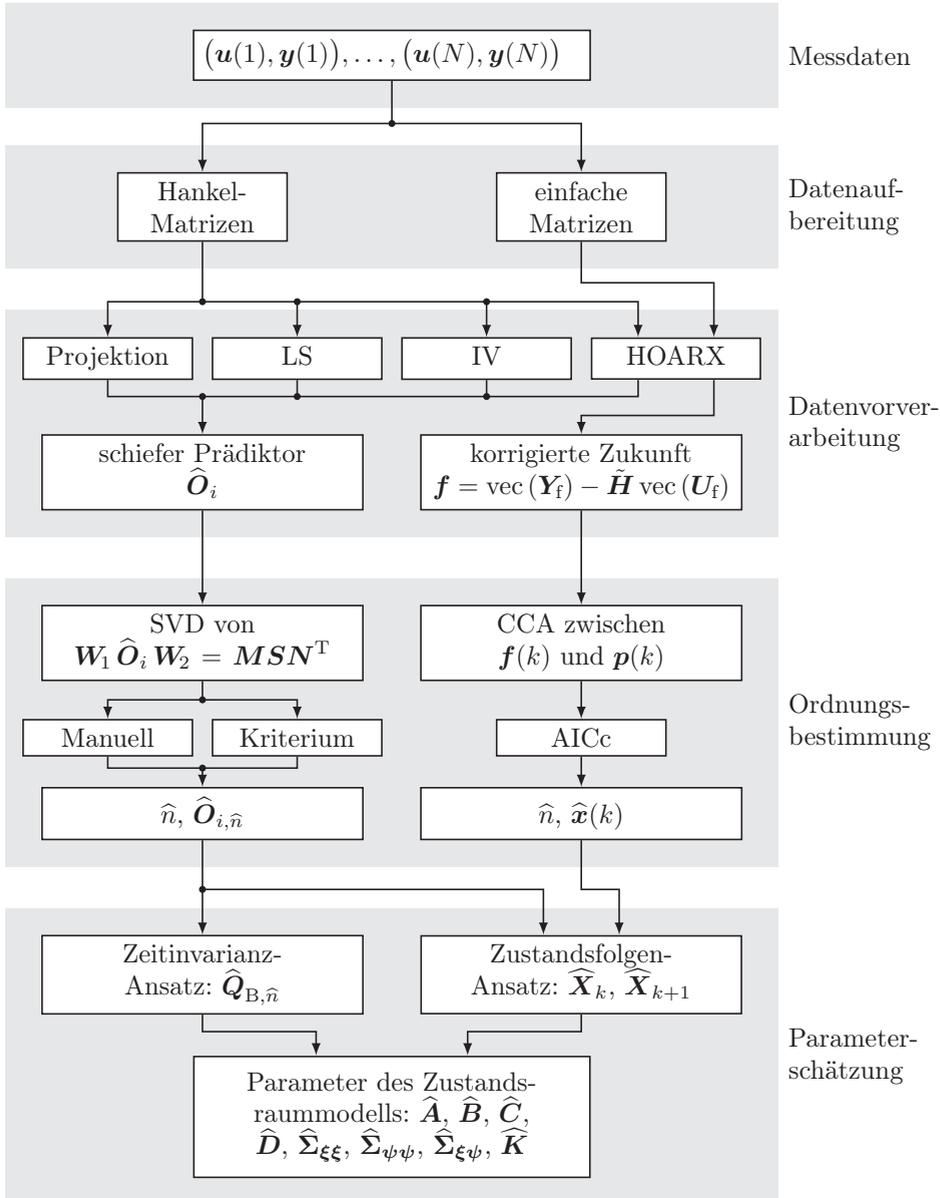


Abbildung 3.4: Ablaufschema zur einheitlichen Darstellung der untersuchten 4SID-Algorithmen

3.3.1 N4SID

Die N4SID wurden in [OM93, OM94] vorgestellt und in nachfolgenden Publikationen weiterentwickelt. Trotz der Namensgebung handelt es sich primär um einen Algorithmus, dessen Umsetzung in einigen Punkten leicht variieren kann, und der im generischen Algorithmus aufgegangen ist. Hier wird eine gebräuchliche Variante vorgestellt (vgl. auch [Nic07, See09]), wie sie üblicherweise unter dem Namen N4SID²⁴ in der Literatur zu finden ist, Alternativen sind in [OM96] zu finden.

Der ursprüngliche N4SID geht von einer Zustandsraumbeschreibung in Prozessform aus, für welche die Hankel-Matrizen aufgestellt werden. Für die Schätzung des schiefen Prädiktors kommt der Projektionsansatz zum Einsatz, bei dem die zukünftigen Eingänge entlang der zukünftigen Ausgänge auf die Vergangenheitsdaten projiziert werden. Dieser Schätzwert des schiefen Prädiktors wird direkt mittels der SVD zerlegt. Die Ordnung wird mittels Analyse der Singulärwerte durch den Anwender geschätzt, in dem beispielsweise nach einer großen Differenz zweier aufeinander folgender Singulärwerte gesucht wird. Die Singulärwerte bis zu diesem großen Abfall werden dann als Teil des Signalunterraums gesehen, die restlichen werden dem Rauschunterraum zugeschlagen. Aus den Anteilen des Signalunterraums werden dann die Parametermatrizen über eine Variante des Zustandsfolgen-Ansatzes berechnet.

Bei dieser Vorgehensweise zur Parameterschätzung wird aus der SVD die erweiterte Beobachtbarkeitsmatrix bestimmt. Die Zustandsfolge eines zum Modell gehörenden Kalman-Filters kann über die Pseudoinverse dieser erweiterten Beobachtbarkeitsmatrix und einer weiteren, senkrechten Projektion bestimmt werden:

$$\widehat{\mathbf{X}}_{i+1} = \widehat{\mathbf{Q}}_{\mathbf{B},\widehat{\mathbf{n}}}^\dagger \left(\mathbf{Y}_{i+1|2i} \ / \ \left[\begin{array}{c} [\mathbf{Y}] \\ [\mathbf{U}]_{1|i} \\ \mathbf{U}_{i+1|2i} \end{array} \right] \right). \quad (3.111)$$

Dieselbe Vorgehensweise wird auch für die Matrizen $[\mathbf{Y}^T \ \mathbf{U}^T]_{1|i+1}^T$, $\mathbf{U}_{i+2|2i}$ und $\mathbf{Y}_{i+2|2i}$ zur Schätzung von $\widehat{\mathbf{X}}_{i+2}$ verwendet, wobei die Pseudoinverse der um die letzte Blockzeile verkleinerten Beobachtbarkeitsmatrix $\widehat{\mathbf{Q}}_{\mathbf{B},\mathbf{K},i} = \widehat{\mathbf{Q}}_{\mathbf{B},\mathbf{K},i-1}$ benötigt wird.

Mit diesen beiden, um einen Zeitschritt versetzten Zustandsfolgen des Kalman-Filters können dann die Parametermatrizen bestimmt werden. Aufgrund der unterschiedlichen Anfangswerte von Systemzuständen und denen des Kalman-Filters führt die direkte Regression wie beim Zustandsfolgen-Ansatz im Allgemeinen zu einer verzerrten Schätzung der Systemmatrizen. Als Alternative wird in [OM96]

²⁴Im Folgenden ist mit N4SID die hier vorgestellte Variante gemeint, weshalb die Abkürzung wie auch in der Literatur üblich im Singular verwendet wird.

ein Weg vorgeschlagen, der zu erwartungstreuen Schätzwerten führt. Dabei werden \mathbf{A} und \mathbf{C} direkt, und die Matrizen \mathbf{B} und \mathbf{D} über Hilfsmatrizen geschätzt (vgl. [OM94, OM96, Nic07, Qin06]). Aus den Residuen werden dann die Kovarianzmatrizen der beiden Rauschprozesse geschätzt, die Berechnung der Kalman-Matrix entfällt bei der Prozessform. Für eine robustere Schätzung kann zusätzlich nach der Schätzung der System- und Ausgangsmatrix die Beobachtbarkeitsmatrix aus den Schätzwerten der beiden Matrizen und damit die Gleichung für die weiteren Matrizen neu berechnet werden, was nach [OM96] zu „kompatibleren“ Schätzungen der weiteren Matrizen führt.

Wird eine Verzerrung der Schätzwerte in Kauf genommen, kann eine einfachere Vorgehensweise gewählt werden. Zur Schätzung der Zustandsfolgen werden dann anstelle der zusätzlichen senkrechten Projektionen die Schätzwerte der schiefen Prädiktoren $\hat{\mathbf{O}}_i^{Pro}$ bzw. $\hat{\mathbf{O}}_{i+1}^{Pro}$ verwendet. Die Parametermatrizen werden, wie im Abschnitt 3.2.4 für den Zustandsfolgen-Ansatz beschrieben, direkt über eine Regression bestimmt. Die Verzerrung dieser Schätzwerte wird mit größer werdendem Messdatenumfang geringer, da für $N \rightarrow \infty$ die Zustände des Kalman-Filters auf die wahren Systemzustände konvergieren.

3.3.2 MOESP

Auch die Abkürzung MOESP steht für eine ganze Familie von 4SID-Algorithmen, die aus der Weiterentwicklung der ursprünglichen MOESP-Methode [VD92a, VD92b, VV07] entstanden ist. Diese dient wie auch der N4SID zur Identifikation eines Zustandsraummodells in Prozessform, allerdings ohne Systemrauschen. Die einzige stochastische Komponente stellt also das Messrauschen dar. Die Weiterentwicklung für farbiges Messrauschen [Ver93, VV07] als weiterhin einzige stochastische Komponente im Zustandsraummodell stellt die sogenannte PI-MOESP²⁵ dar. Sie basiert auf dem IV-Ansatz im Datenvorbereitungsschritt und verwendet die vergangenen Eingänge als Hilfsvariablen, womit sich auch die Namensgebung erklärt.

Die darauf basierende Weiterentwicklung, die PO-MOESP²⁶ [Ver94, VV07], verwendet zusätzlich zu den vergangenen Eingängen auch die vergangenen Ausgänge und nicht ausschließlich die vergangenen Ausgänge, wie aus der Namensgebung geschlossen werden könnte. Die PO-MOESP basiert auf einer Systembeschreibung in Innovationsform und verwendet, wie seine Vorgänger auch, die Block-Hankel-Matrizen für die Daten. Die Bestimmung der Systemordnung basiert wie beim N4SID ebenfalls auf der manuellen Analyse der Singulärwerte des schiefen Prädiktors auf eine große Lücke zwischen zwei aufeinander folgenden Singulärwerten. Alternativ wird

²⁵PI steht für „past inputs“ (engl. für vergangene Eingänge).

²⁶PO steht für „past outputs“ (engl. für vergangene Ausgänge).

	W_1	W_2
N4SID	I	I
CVA	$\left(\left(\mathbf{Y}_{i+1 2i} / \mathbf{U}_{i+1 2i}^\perp \right) \left(\mathbf{Y}_{i+1 2i} / \mathbf{U}_{i+1 2i}^\perp \right)^\top \right)^{-\frac{1}{2}}$	$\mathbf{\Pi}_{\mathbf{U}_{i+1 2i}^\perp}$
PO-MOESP	I	$\mathbf{\Pi}_{\mathbf{U}_{i+1 2i}^\perp}$

Tabelle 3.2: Wahl der Gewichtungsmatrizen im generischen Algorithmus nach [OM96]

in [VV07] noch ein Kriterium auf Basis der Varianz des Simulationsfehlers vorgeschlagen, welche auf die Varianz der Messwerte normiert wird. Damit geht aber der Vorteil der nicht-iterativen Schätzung verloren, weil dafür für jede Ordnung jeweils ein Modell geschätzt und der Simulationsfehler berechnet werden muss. Die Parametermatrizen des Zustandsraummodells werden mit dem Zeitinvarianz-Ansatz bestimmt.

In der aktuelleren Literatur ist meist die PO-MOESP als modernster Vertreter seiner Familie gemeint, wenn auf MOESP Bezug genommen wird. Im Folgenden wird daher von den drei Varianten nur die PO-MOESP betrachtet werden, da nur sie aufgrund der weniger restriktiven Rausch- bzw. Modellannahmen mit den anderen 4SID-Methoden vergleichbar ist. In [CP04] wurde gezeigt, dass bis zur Berechnung der Matrizen \mathbf{A} und \mathbf{C} PO-MOESP und N4SID äquivalent sind.

3.3.3 Generischer Algorithmus

Der generische Algorithmus nach [OM95, OM96] ist vom Ablauf genau wie der N4SID aufgebaut und geht in der ursprünglichen Formulierung ebenfalls von der Prozessform aus, wobei auch Varianten für die Innovationsform existieren, z. B. in [See09]. Einziger Unterschied zum N4SID-Algorithmus ist die Gewichtung des geschätzten schiefen Prädiktors vor der SVD, wie sie bereits im Abschnitt 3.2.3 erläutert wurde. Beim Schätzen der Systemparameter und der Zustandsfolgen nach der SVD muss der Einfluss der Gewichtungsmatrizen daher wieder entfernt werden, damit man gültige Schätzwerte enthält (vgl. Abschnitt 3.2.4).

In der Tabelle 3.2 sind die Gewichte zusammengestellt, wie sie für die beiden geometrischen Algorithmen und eine geometrische Deutung der CVA zu wählen sind. Nach [OM95, OM96] ist der generische Algorithmus dann identisch mit dem jeweiligen ursprünglichen Algorithmus.

Bei der N4SID ist die Beschreibung im Rahmen des generischen Algorithmus sofort einleuchtend, da dort die Gewichte Einheitsmatrizen sind und die Vorgehensweise

identisch ist. Zumindest für die geometrische Deutung der CVA kann die exakte Übereinstimmung mit dem Originalalgorithmus, der auf einer statistischen Herleitung beruht und im folgenden Abschnitt erläutert wird, jedoch ausgeschlossen werden. So werden beim generischen Algorithmus bei der Datenvorverarbeitung keine strukturellen Beschränkungen hinsichtlich der Kausalität berücksichtigt, während die statistische CVA auf einem HOARX-Ansatz basiert. Außerdem fehlt ein geeignetes Kriterium zur Ordnungswahl entsprechend dem AIC bei der statistischen CVA (vgl. Abschnitt 3.4) und die geometrische Formulierung ist numerisch anfälliger (vgl. Abschnitt 3.6). In [JSL01] wurde an einem Anwendungsbeispiel gezeigt, dass der generische Algorithmus mit CVA-Gewichtung nicht die identischen Ergebnisse liefert wie die statistische CVA.

Dennoch stellt die CVA-Gewichtung bezüglich einiger Kriterien die beste Wahl der Gewichtungsmatrizen dar. Beispielsweise können die Singulärwerte, die mit dem generischen Algorithmus mit CVA-Gewichtung berechnet werden, als Kosinuswerte der Winkel zwischen dem Unterraum der zukünftigen Ausgänge und dem Unterraum der Vergangenheitsdaten aufgefasst werden [OM95, Nic07]. Ist dieser null, so ist der zugehörige Winkel $\frac{\pi}{2}$, womit dieser Anteil der zukünftigen Ausgänge senkrecht auf den Vergangenheitsdaten steht und somit nicht von ihnen abhängt. Bei einem System ohne Rauschen stellt die Anzahl der Winkel ungleich $\frac{\pi}{2}$ die Ordnung des Systems dar [OM95]. Diese Winkel sind außerdem unabhängig von der Skalierung der Daten, womit die geometrische Deutung der CVA die einzige der drei Methoden darstellt, deren Ergebnis von der Skalierung der Daten unabhängig ist [OM96]. Auch wurde gezeigt, dass die Wahl der CVA-Gewichte hinsichtlich der asymptotischen Varianz optimal ist [BL02], zumindest für mittelwertfreie Gauß-Prozesse als Eingangsgrößen.

Der Dokumentation [Mat09] zufolge ist eine dem hier beschriebenen generischen Algorithmus sehr ähnliche Form als Funktion `n4sid` in der `SYSTEM IDENTIFICATION TOOLBOX` in `MATLAB` implementiert. Dort wird standardmäßig die CVA-Gewichtung gewählt, alternativ kann auf die `PO-MOESP`-Gewichtung umgeschaltet werden. Außerdem ist laut der Dokumentation [Mat09] auch das `AIC` implementiert. Allerdings wird dieses, dem Programmcode nach zu urteilen, nur zur Wahl der Parameter der Hankel-Matrizen verwendet, nicht zur Ordnungsreduktion mit der `SVD`, für die entweder alle Singulärwerte ausgewählt werden, die größer als der Mittelwert zwischen größtem und kleinstem Singulärwert sind, oder eine Benutzerinteraktion notwendig ist. Der Funktionsbeschreibung nach zu urteilen, muss der Algorithmus entgegen der in [Mat09] als Quelle genannten Beschreibung [Lju99] einige der im Abschnitt 3.6.2 beschriebenen Erweiterungen enthalten. Außerdem lässt er eine unterschiedliche Wahl von Zeilen in den Block-Hankel-Matrizen für Zukunft und Vergangenheit zu. Auch können die Vergangenheitshorizonte für Eingangs- und Ausgangsdaten getrennt vorgegeben werden, ohne Vorgabe wird das `AIC` zur Ermittlung dieser Parameter eingesetzt. Mangels genauer Beschreibung kann daher nicht

beurteilt werden, was sich exakt hinter dieser Funktion verbirgt. Auch die Ergebnisse bei der Anwendung für die Brennstoffzelle im Abschnitt 5.2.3 im Vergleich zu einem selbst implementierten generischen Algorithmus können nur mit zahlreichen Modifikationen und Erweiterungen des generischen Algorithmus aus [Lju99] erklärt werden.

3.4 Statistische Algorithmen

Im Gegensatz zu den geometrischen Algorithmen, von denen eine Vielzahl an Varianten in der Literatur existiert, basieren die statistischen Verfahren alle auf der CCA. Die CVA nach [Lar83, Lar99b] ist das einzige Verfahren, das diese explizit im Rahmen der ML-Methode verwendet. Durch den im vorigen Abschnitt beschriebenen generischen Algorithmus und die darin enthaltene geometrische Interpretation wird in einigen Veröffentlichungen unter dem Namen CVA ein geometrisches Verfahren mit CVA-Gewichtung gemeint, was eine besondere Vorsicht bei der Interpretation und Analyse von Quellen erfordert.

3.4.1 CVA

Die CVA beruht ursprünglich auf einem Modell in Prozessform, bei dem zusätzlich das Systemrauschen über eine konstante Parametermatrix auch auf die Ausgangsgleichung wirkt, womit das Gesamtrauschen in der Ausgangsgleichung nicht mehr als weiß und unkorreliert mit dem Systemrauschen angenommen werden muss. Sie nutzt die einfachen Datenmatrizen und aus den Daten berechneten Stichprobenkovarianzen.

Um die Einflüsse der zukünftigen Eingangsdaten aus den zukünftigen Ausgangsdaten zu entfernen, wird der zweite der im Abschnitt 3.2.2 beschriebenen HOARX-Ansätze verwendet, der die stochastischen Anteile in den Daten belässt. Die Ordnung des HOARX-Modells wird dabei mit dem AIC ermittelt und stellt auch die Länge des Zukunftshorizonts dar, es gilt also $\ell_p = \ell_f$. Im Anschluss daran wird die CCA mit diesen Daten durchgeführt und die Ordnung des Zustandsraummodells über das AICc oder eine Approximation geschätzt. Für die exakte AICc-Auswertung müssen die Fehlerkovarianzmatrizen der Ein-Schritt-Prädiktionen mit den Zustandsraummodellen der in Frage kommenden Ordnungen berechnet werden [Lar99b], wodurch jedoch die nicht-iterative Vorgehensweise verloren geht. Die Berechnung der Parametermatrizen geschieht bei der CVA über den Zustandsfolgen-Ansatz mittels Regression.

3.4.2 Statistische Herleitung der CVA

Die CVA geht auf die CCA für Zeitreihen (vgl. Abschnitt 3.2.3) zurück und wurde erstmals in [Lar83] in der Form des hier vorgestellten 4SID-Algorithmus beschrieben, allerdings ohne vollständige Herleitung. In den darauf folgenden Veröffentlichungen [Lar89, Lar90a, Lar96, Lar97b, Lar97a, Lar99b] desselben Autors, der auch die kommerzielle Implementierung ADAPT_x [Ada09] vertreibt, wurden immer weitere Details, aber auch statistische Eigenschaften veröffentlicht, wobei der zuletzt genannte Artikel sehr ausführlich in die Thematik einführt. Die Vorgehensweise bei der Nutzung des HOARX-Modells wurde erst in [Lar04] dargestellt. In [Gič09] wurde auf Basis dieser Veröffentlichungen die Herleitung ergänzt und ausführlich dargestellt. Sie beruht auf der ML-Methode, die im Abschnitt 2.2.4 vorgestellt wurde, und nutzt die im Abschnitt 3.2.3 beschriebene CCA. In den oben zitierten Quellen wird die Herleitung stets vom Fall einer statischen Abbildung aus verallgemeinert.

Bei der ML-Maximierung der CVA wird nicht direkt ein Zustandsraummodell gesucht, sondern nur die Parameter eines Ein-Ausgangsmodells für die Prädiktion von ℓ_f Schritten. Dazu müssen zunächst die Anteile der zukünftigen Eingänge aus den zukünftigen Ausgängen entfernt werden, wozu das HOARX-Modell herangezogen wird. Durch diese Vorgehensweise werden auch Korrelationen der Eingangssignale mit den Ausgangssignalen, wie sie beispielsweise bei der Identifikation im geschlossenen Regelkreis auftreten, aus den Daten entfernt. Für diese korrigierten Daten $\mathbf{f}(k)$ und die Vergangenheitsdaten $\mathbf{p}(k)$ wird die zu maximierende Likelihood-Funktion aufgestellt, die für alle Zeitpunkte $\ell_p < k \leq N - \ell_f$ gemeinsam maximiert werden muss. Betrachtet man die logarithmierte gesamte Likelihood-Funktion, so ergibt sich diese als Summe aus den einzelnen logarithmierten Likelihood-Funktionen:

$$\ln \mathcal{L}(\mathbf{P}) = \frac{1}{\ell_f} \sum_{k=\ell_p+1}^{N-\ell_f} \ln p(\mathbf{f}(k)|\mathbf{p}(k), \mathbf{P}) . \quad (3.112)$$

Durch die Mehrschrittprädiktion kommt jede Ausgangsgröße $\mathbf{y}(k)$ mit Ausnahme der Werte zu Beginn und am Ende des Datensatzes ℓ_f -fach in dieser Funktion vor, weshalb durch den Vorfaktor $\frac{1}{\ell_f}$ der Mittelwert gebildet wird. Die Randeffekte nehmen mit steigender Anzahl N an Datenpaaren ab, nach [Lar97b] kann bereits für kleine Werte eine gute Näherung erreicht werden.

Das Maximum dieser Likelihood-Funktion kann, wie in [Lar97b, Lar99b, Gič09] gezeigt, mittels CCA gewonnen werden. Durch sie kann die maximierte Likelihood-Funktion als Funktion der bei der CCA berechneten Singulärwerte \tilde{s}_i ausgedrückt

werden:

$$\max(\ln \mathcal{L}(\mathbf{P})) = -\frac{N}{2\ell_f} \left(\mathcal{L}_{\text{const}} + \sum_{i=1}^{\hat{n}} \ln \left(\det(\widehat{\Sigma}_{ff}) (1 - \tilde{s}_i^2) \right) \right). \quad (3.113)$$

Dabei fasst $\mathcal{L}_{\text{const}}$ die konstanten Terme der Likelihood-Funktion zusammen, die unabhängig von der Systemordnung sind.

Mit der CCA wird auch die Darstellung als Zustandsraummodell erreicht, da in der ursprünglichen Likelihood-Funktion die Parameter eines Ein-/Ausgangsmodells (ARX-Modells) enthalten sind. Durch die Wahl einer bei der CCA berechneten Zwischengröße, der zur Vergangenheit gehörenden kanonischen Variablen $\widetilde{\mathbf{M}} \mathbf{p}_{\ell_p}(k)$, als Zustandsvektor können dann die Parametermatrizen des Zustandsraums bestimmt werden. Die Ordnung kann dabei mit dem AICc bestimmt werden, was die Berechnung von Zustandsraumparametrierungen aller untersuchter Ordnungen voraussetzt. Durch diese statistisch fundierte Ordnungswahl wird jedoch der Vorteil aufgegeben, nur eine einzige Parametrierung des Zustandsraums berechnen zu müssen. Abhilfe könnte durch eine Approximation des AICc für das Zustandsraummodell in Abhängigkeit der maximierten Likelihood-Funktion (3.113) geschaffen werden. Vermutlich ist in ADAPT_x eine solche Approximation implementiert, da das Software-Modul zur Auswertung des AICc ohne die Daten auskommt, die zur Berechnung des exakten AICc benötigt werden [Lar99a]. Die durchgeführten, in [Kru08] dokumentierten Versuche, bei denen die Ordnungsschätzung durch die korrekte AICc-Berechnung auf Basis aller Parametrierungen erfolgte, haben jedoch eine gute Übereinstimmung beider Varianten gezeigt.

Die dargestellte Vorgehensweise beinhaltet die hintereinander durchgeführten Schätzungen mehrerer Modelle mit abnehmender Komplexität vom HOARX-Modell zum Zustandsraummodell. Da jeder Schritt asymptotisch eine ML-Schätzung darstellt, gilt dies auch für die gesamte Vorgehensweise [Lar05].

3.4.3 Weitere Verfahren

Neben diesem hier beschriebenen Ablauf und dem generischen geometrischen Algorithmus mit CVA-Gewichtung, der wie bereits in Abschnitt 3.3.3 erläutert nicht exakt der CVA entspricht, gibt es noch weitere Möglichkeiten, die CVA zu realisieren, auch für andere Zustandsraumformen. So sind beispielsweise in [See09, Chi09a, PSD96] im Ergebnis mit der Original-CVA übereinstimmende Formulierungen zu finden, die von der Innovationsform ausgehen und Block-Hankel-Matrizen nutzen.

Die weiteren in der Literatur zu findenden 4SID-Methoden (u. a. [PSD96, Jan03, Jan05]), die explizit die CCA anwenden, verwenden eine gewöhnliche SVD und ge-

wichten zuvor die zu zerlegende Matrix geeignet, sodass das Ergebnis der CCA entspricht. Im Gegensatz zur geometrischen Variante der CVA im Rahmen des generischen Algorithmus beinhalten diese Ansätze auch die Datenvorverarbeitung mit einem HOARX-Modell.

In [PSD96] werden verschiedene 4SID-Varianten mit der CCA vorgestellt, wobei hauptsächlich der Datenvorverarbeitungsschritt variiert wird. Eine der Varianten entspricht im Prinzip der CVA, eine zweite Variante nutzt ein zweistufiges Verfahren, in dem anstelle des HOARX-Modells ein in einem ersten Durchgang geschätztes Zustandsraummodell verwendet wird. Teilweise werden hier auch Formulierungen mit Projektionen aus den geometrischen Varianten genutzt.

Der in [Jan03] vorgeschlagene, SSARX genannte 4SID-Algorithmus entspricht von der Vorgehensweise prinzipiell der CVA. Es wird ebenfalls ein HOARX-Ansatz verwendet, um eine bereinigte Version der zukünftigen Ausgänge für die CCA zu bekommen. Die CCA selbst wird mittels der gewöhnlichen SVD realisiert, in dem die Matrix

$$\widehat{\Sigma}_{FF}^{-\frac{1}{2}} \widehat{\Sigma}_{PF}^T \widehat{\Sigma}_{PP}^{-\frac{1}{2}} = M S N^T \quad (3.114)$$

zerlegt wird. Die Stichprobenkovarianzmatrizen entsprechen denen aus (3.94). Zusammen mit der Wahl

$$\widehat{\mathbf{x}}(k) = N_{\widehat{n}}^T \widehat{\Sigma}_{PP}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{p}(k) \quad (3.115)$$

für den Zustand erhält man so dasselbe Ergebnis wie mit der im Abschnitt 3.2.3 beschriebenen Vorgehensweise bei der CCA. Über die Wahl der geschätzten Ordnung \widehat{n} wird keine nähere Angabe gemacht. Die SSARX-Methode wird in [Jan05] auf ein mehrstufiges Verfahren erweitert, welches bessere Ergebnisse liefern soll, unabhängig davon, ob die Daten im offenen oder geschlossenen Kreis aufgenommen wurden.

3.5 Prädiktor-basierte Algorithmen

Die Prädiktor-basierten Algorithmen gehören neben dem SSARX und seiner Weiterentwicklung zu den jüngsten 4SID-Verfahren. Eine erste Variante wurde in [CP05] eingeführt, allerdings erst in einer folgenden Veröffentlichung [Chi06] als „Predictor-based Subspace Identification“²⁷ (PBSID) bezeichnet. In den nachfolgenden Publikationen [Chi07a, Chi07b, Chi09a] wurde eine optimierte Variante (PBSIDopt) entwickelt sowie die Eigenschaften der Verfahren mit existierenden 4SID-Methoden

²⁷engl. für Prädiktor-basierte Unterraum-Identifikation

verglichen. Namensgebend für die Verfahren sind die Blockzeilen des schiefen Prädiktors, die von den Autoren als Prädiktoren bezeichnet werden. Eine kommerzielle Implementierung der Prädiktor-basierten Verfahren ist bisher nicht verfügbar, unter [Chi09b] kann jedoch eine Version für MATLAB bezogen werden.

3.5.1 PBSID

Die PBSID beruht auf einer Erweiterung der Realisierungstheorie auf stochastische Systeme („stochastic realization theory“), die beispielsweise in [CP03, Kat05] nachgelesen werden kann. Die hier gewählte Darstellung findet sich ähnlich auch in [Chi07a, See09]. Als Form des Zustandsraummodells liegt der PBSID die Prädiktorform zugrunde und sie basiert auf den Hankel-Matrizen. Wie bei einigen geometrischen Verfahren kommen bei der PBSID die Projektionen zum Einsatz. Um die untere Block-Dreiecksstruktur der Parametermatrizen in der Subspace-Ausgangsgleichung und damit die Kausalität zu berücksichtigen, werden die Prädiktoren, also die Blockzeilen des schiefen Prädiktors, einzeln durch Projektionen ermittelt, wie es bereits im Abschnitt 3.2.2 beschrieben wurde. Vor der SVD erfolgt eine Gewichtung des schiefen Prädiktors von links mit einer nicht genauer definierten Gewichtsmatrix \mathbf{W}_1 , für die zweite Gewichtsmatrix gilt $\mathbf{W}_2 = \mathbf{I}$. Auch über die Ordnungsschätzung wird keine nähere Angabe gemacht, außer dass „weniger signifikante“ Singulärwerte weggelassen bzw. zu null gesetzt werden. Die Schätzung der Parametermatrizen erfolgt mit dem Zustandsfolgen-Ansatz.

3.5.2 PBSIDopt

Der optimierte PBSID-Algorithmus wurde in [Chi07a] vorgestellt, da dort eine der CVA ähnliche Formulierung der PBSID benötigt wurde, um die beiden Verfahren besser vergleichen zu können. Dazu wurde der Schritt der Datenvorverarbeitung gegenüber der PBSID verändert. Anstelle der zeilenweisen Projektionen kommt hier der im Abschnitt 3.2.2 als erstes beschriebene HOARX-Ansatz zum Einsatz, welcher direkt einen Schätzwert des schiefen Prädiktors ermittelt. Dadurch wird zusätzlich noch die Block-Toeplitz-Struktur der Parametermatrizen berücksichtigt. Die weiteren Schritte sind dann identisch zum eben beschriebenen PBSID-Algorithmus. In [CMM09] wird die Gewichtsmatrix \mathbf{W}_1 so gewählt, dass die Zerlegung der CCA entspricht (vgl. auch [See09]). In der verfügbaren Implementierung [Chi09b] wird als Ordnung die Anzahl der Singulärwerte gewählt, die größer sind als der Mittelwert des größten und des kleinsten Singulärwerts.

3.6 Vergleich der Algorithmen und mögliche Erweiterungen

Nach der Vorstellung der einzelnen 4SID-Verfahren in den vorigen Abschnitten wird in diesem Abschnitt auf die gemeinsamen und unterschiedlichen Eigenschaften eingegangen, um einen Vergleich zu ermöglichen. Dabei werden theoretische und praktische Aspekte berücksichtigt. Als Überblick sind die Abläufe der betrachteten Verfahren in der Tabelle 3.3 nochmals zusammengefasst.

3.6.1 Eigenschaften und Vergleich

Die Zusammenstellung der Eigenschaften basiert hauptsächlich auf den in der Literatur dokumentierten theoretischen Untersuchungen, aber auch auf der Erfahrung an Versuchen mit einfachen Systemen. Dabei sind insbesondere die statistischen Eigenschaften asymptotisch zu verstehen, d. h. für unendliche Datensätze mit $N \rightarrow \infty$. Ein ausführlicher praktischer Vergleich verschiedener 4SID-Algorithmen mit den Daten eines PEMFC-Stacks wird im Abschnitt 5.2.3 beschrieben.

Zu den geometrischen Verfahren finden sich in [OM96] bereits einige statistische Untersuchungen der Schätzwerte. So sind durch die endliche Anzahl an Messdaten die Schätzwerte der Kovarianzmatrizen des Rauschens verzerrt. Je nach gewählter Methode zur Gewinnung der Systemparameter liegt auch für diese keine erwartungstreue Schätzung vor. Asymptotisch für $N \rightarrow \infty$ sind die Schätzwerte jedoch erwartungstreu, sofern die Ordnung des Systems korrekt bestimmt wird. Unter den verschiedenen geometrischen Algorithmen ist die geometrische CVA vorzuziehen (vgl. auch Abschnitt 3.3.3). So ist bei weißem Rauschen als Eingangssignal bei ihr die asymptotische Varianz der Schätzwerte am geringsten. Werden im generischen Algorithmus nicht die CVA-Gewichte gewählt, so können die Ergebnisse aus [BL02] dazu verwendet werden, die Wahl der Parameter beim Aufbau der Hankel-Matrizen zu optimieren. Bei farbigem Rauschen als Eingangsgröße wurde, im Gegensatz zu weißem Rauschen, in [BJ00] ein Beispiel gezeigt, in denen der PO-MOESP bessere Ergebnisse liefert als die CVA. Allerdings geht nicht klar hervor, ob die statistische oder eine geometrische Implementierung der CVA zugrunde gelegt wurde.

Bei allen untersuchten Verfahren ist es möglich, einen Durchgriff im System von vornherein auszuschließen. Dabei wird im Zustandsfolgen-Ansatz die Regression für die Ausgangsgleichung nur zwischen den Ausgangsgrößen und der Zustandsfolge durchgeführt. Bei den geometrischen Verfahren wird in den Schritten davor diese Vorgabe nicht weiter berücksichtigt, ebensowenig die Kausalitätsbedingung, die zu den Block-Toeplitz-Parametermatrizen in unterer Dreiecksform führt. Bei den statistischen und Pädiktor-basierten Verfahren kann das Wissen über den fehlenden Durchgriff hin-

Verfahren	Datenformat	Vorverarbeitung	Ordnungsreduktion/-wahl	Parameterschätzung
N4SID	Block-Hankel	Projektion	SVD / manuell	Zustandsfolgen-Ansatz
PO-MOESP	Block-Hankel	Hilfsvariablen	SVD / manuell	Zeitinvarianz-Ansatz
Generisch	Block-Hankel	Projektion	SVD / manuell	Zustandsfolgen-Ansatz
CVA	Kovarianzen	HOARX	CCA (GSVD) / AICc	Zustandsfolgen-Ansatz
SSARX	Kovarianzen	HOARX	CCA (SVD) / k. A.	Zustandsfolgen-Ansatz
PBSID	Block-Hankel	Projektion (kausal)	CCA (SVD) / k. A.	Zustandsfolgen-Ansatz
PBSIDopt	Block-Hankel	HOARX	CCA (SVD) / k. A.	Zustandsfolgen-Ansatz

Tabelle 3.3: Zusammenfassung der Abläufe der wichtigsten 4SID-Verfahren entsprechend der Originalbeschreibungen in der Literatur

gegen bereits in den vorigen Schritten bei der zeilenweisen Schätzung des schiefen Prädiktors bzw. der Parametermatrizen des HOARX-Modells berücksichtigt werden, in dem diese Elemente nicht mitgeschätzt werden. Nur bei Verwendung der beiden HOARX-Ansätze, also bei den statistischen Verfahren und beim PBSIDopt, wird sowohl für den Fall mit als auch ohne Durchgriff die Block-Toeplitz-Struktur der Parametermatrizen berücksichtigt.

Die statistischen und Prädiktor-basierten Verfahren haben durch Verwendung des HOARX-Modells bzw. der zeilenweisen Projektion außerdem den Vorteil, dass sie auch für die Identifikation von Systemen im geschlossenen Regelkreis im Rahmen der direkten Methode verwendet werden können. Dabei werden die Ein- und Ausgangsdaten der zu untersuchenden Strecke gemessen und in den Algorithmen wie die Daten im Fall des offenen Kreises behandelt [See09]. Damit können mit diesen Methoden auch instabile Systeme identifiziert werden, die bei den Messungen durch einen Regler stabilisiert werden müssen. Durch die Rückkopplung im Regelkreis sind die Eingangsdaten mit dem Rauschen der Ausgangsdaten korreliert, weshalb mit den geometrischen Verfahren keine erwartungstreue Schätzung möglich ist [LM96, See09].

Neben der Eignung zur Identifikation eines Systems im Regelkreis wirkt sich die freie Wählbarkeit von Vergangenheits- und Zukunftshorizont positiv auf die Effizienz der Datennutzung aus. Wird beispielsweise ein langer Vergangenheitshorizont benötigt, so muss bei den geometrischen Verfahren der Parameter $i = \ell_p$ der Block-Hankel-Matrizen entsprechend dieses Horizonts gewählt werden. Da dort die Datenmatrizen immer hälftig aufgeteilt sind bedeutet dies, dass auch der Zukunftshorizont entsprechend zu $\ell_f = i$ gewählt wird, wodurch die Block-Hankel-Matrizen insgesamt $2i = \ell_p + \ell_f$ Blockzeilen aufweisen. Die für die Güte der Schätzung notwendige hohe Anzahl an Spalten j dieser Datenmatrizen kann dann durch den Zusammenhang $j = N - 2i + 1$ nicht so groß gewählt werden wie bei einer unabhängigen Wahl von $\ell_f < i$. Damit ist zu erwarten, dass bei kleinen Datensätzen die geometrischen Verfahren schlechter abschneiden bzw. zum Erreichen derselben Güte wie bei den statistischen und Prädiktor-basierten Verfahren größere Datensätze verwendet werden müssen.

Auch zu den statistischen und Prädiktor-basierten Verfahren existieren in der Literatur diverse Untersuchungen, u. a. [Bau98, Chi06, Chi07a, Chi09a, CP04, CP05, Lar96, Lar04, PSD96]. Oftmals werden nur Teilaspekte der Algorithmen betrachtet und beispielsweise die Ordnung als bekannt vorausgesetzt. Außerdem betrachten auch diese Untersuchungen alle das asymptotische Verhalten. In einigen Fällen wurden als Teilergebnisse dabei Entscheidungshilfen für die Parameterwahl bei den Algorithmen gefunden, die allerdings aufgrund der asymptotischen Betrachtung nicht zwingend für endliche Stichproben gültig sein müssen. Als wichtigstes Ergebnis kann zusammengefasst werden, dass insbesondere durch [Chi07a, Chi09a] die asymptoti-

sche Äquivalenz der Algorithmen CVA, SSARX, PBSID und PBSIDopt gezeigt wurde. Das Verhalten bei einer endlichen Anzahl an Stichproben sowie eine verlässliche Basis zur Wahl der Parameter sind jedoch noch ungelöste Fragen und Gegenstand aktueller Untersuchungen (vgl. auch [Chi09a]).

In selbst durchgeführten praktischen Untersuchungen hat sich ebenfalls gezeigt, dass die statistischen und Prädiktor-basierten Verfahren den anderen vorzuziehen sind. So traten bei der Implementierung der in [OM96] als „robuster Algorithmus“ vorgestellten Variante des generischen Algorithmus diverse numerische Schwierigkeiten auf, die durch eine geschickte Implementierung umgangen werden mussten. Zusätzlich zeigte die Implementierung eine Tendenz zum Schätzen instabiler Systemdarstellungen (vgl. Abschnitt 5.2 und [Nic07]).

Zusätzlich wurde ein systematischer Vergleich des generischen Algorithmus mit CVA-Gewichtung, der CVA-Implementierung ADAPT_x sowie einer Implementierung der PBSIDopt an einfachen Beispielsystemen durchgeführt, welcher in [See09] dokumentiert ist. Dabei wurde das Verhalten bei weißem und farbigem Rauschen, bei verschiedenen Messdatenumfängen, bei verschiedenen Anregungssignalen und bei der Verwendung von Daten aus dem geschlossenen Regelkreis untersucht. Hinsichtlich des Rauschens fielen die Ergebnisse wie erwartet beim geometrischen Algorithmus gegenüber den beiden anderen Verfahren ab, insbesondere bei kleinerem Signal-zu-Rausch-Verhältnis. Auch bei farbigem Rauschen trat dieser Effekt auf, konnte jedoch bei einer Erhöhung des Datenumfanges N wieder reduziert werden. Sprünge als Eingangssignal erzielten ebenso wie weißes Rauschen gute Ergebnisse. Auch konnte das erwartete Verhalten bei kleinen Datensätzen beobachtet werden. Bei farbigem Rauschen musste für den generischen Algorithmus die Länge des Datensatzes um eine Größenordnung erhöht werden, um eine verschwindend geringe Verzerrung wie bei der CVA und der PBSIDopt bei der ursprünglichen Datensatzlänge zu erhalten.

Bei der Identifikation im geschlossenen Regelkreis zeigte sich ebenfalls das zu erwartende Bild. Während die beiden Ansätze mit HOARX-Modell eine gute Schätzung lieferten, waren die Ergebnisse mit der Funktion `n4sid` aus MATLAB deutlich verzerrt. Bei einem MIMO-Beispiel scheiterte sie sogar komplett.

Bei der Schätzung der Modellordnung war auffällig, dass die Implementierung des AICc in ADAPT_x die Modellordnung gelegentlich leicht zu hoch schätzte. Dies führte jedoch in diesen Fällen auch zu besseren Approximationen des zeitlichen Verlaufs der Sprungantworten des Originalsystems im Vergleich zur PBSIDopt, bei der die Ordnung korrekt geschätzt wurde. Dabei ist jedoch auch zu berücksichtigen, dass die Versuche hauptsächlich an Systemen erster Ordnung durchgeführt wurden und nicht repräsentativ sind. Bei Versuchen im Rahmen eines Vergleichs von Informationskriterien, die in [Kru08] dokumentiert sind, hat das AICc sehr gute Ergebnisse geliefert, auch in Verbindung mit der CVA.

Von der Anwendungsseite ist ADAPT_x am einfachsten der drei Varianten zu bedienen, da einerseits eine kommerzielle Implementierung mit Ansprechpartner bei Problemen zur Verfügung steht, und andererseits im Vergleich zur PBSIDopt auch weniger Parameter durch den Benutzer zu wählen sind. Bezüglich des Speicherplatzes sind die auf den Hankel-Matrizen basierenden Verfahren anspruchsvoller, solange diese vollständig im Speicher abgelegt werden. Die CVA, die die Kovarianzmatrix nutzt, benötigt weniger Speicherplatz und auch weniger Rechenoperationen als die geometrischen Verfahren [Lar99b]. Nach [CMM09] ist die PBSIDopt der aktuell am wenigsten Rechenkapazität beanspruchende 4SID-Algorithmus, der auch mit Daten aus dem geschlossenen Regelkreis korrekt umgehen kann.

3.6.2 Erweiterungen

Während die hier vorgestellten 4SID-Verfahren sich alle auf zeitdiskrete Zustandsraummodelle von LTI-Systemen beschränken, existieren in der Literatur verschiedenste Ansätze zur Erweiterung dieser Verfahren für weitere Systemklassen und zum Erreichen bestimmter Eigenschaften bei LTI-Systemen.

So können die Verfahren, die in den hier vorgestellten Versionen einen durchgehenden Datensatz erfordern, auch für mehrere Datensatzfragmente erweitert werden. Für die geometrischen Verfahren findet sich in [DFPB96] eine solche Möglichkeit, bei der aus jedem Fragment eigene Block-Hankel-Matrizen aufgestellt und diese dann zu den im weiteren verwendeten Datenmatrizen zusammengesetzt werden. Diese Möglichkeit wurde auch im selbst implementierten generischen geometrischen 4SID-Algorithmus berücksichtigt, der zu den praktischen Vergleichen bei der Brennstoffzelle (vgl. Abschnitt 5.2.3) herangezogen wurde. Auch die kommerziellen Produkte `n4sid` aus der `SYSTEM IDENTIFICATION TOOLBOX` in `MATLAB` und ADAPT_x unterstützen mehrere Datensatzfragmente.

Der Effekt von instabilen Systemmodellen für stabile Systeme bei den geometrischen Verfahren kann ebenfalls vermieden werden, Ansätze dazu werden z. B. in [Mac95, CM96, GSDM01, LB03] vorgeschlagen. Auch kann die Eignung für die Identifikation im geschlossenen Regelkreis beispielsweise durch ein zweistufiges Vorgehen verbessert werden [KKP05, KT07]. Daneben existieren geometrische 4SID-Varianten, bei denen Daten aus dem Frequenzbereich zur Identifikation herangezogen werden [MAL96, McK04], oder bei welchen ein kontinuierliches Zustandsraummodell geschätzt wird [MMW07]. Schließlich existieren noch Erweiterungen für spezielle nichtlineare Systemklassen, u. a. bilineare und LPV-Systeme [FMO99, Ver02, CM00, VV02] sowie Hammerstein- und Wiener-Modelle [VW96, VW95].

Auch bei den statistischen und Prädiktor-basierten Verfahren existieren einige Erweiterungen. So sind in [Lar90b, Lar05] Ansätze zu einer nichtlinearen Erweiterung

der CVA zu finden. Unter dem Namen ADAPT_{NL} [Ada09] ist eine entsprechende Erweiterung erhältlich, bei der auch nichtlineare Transformationen der Ein- und Ausgangsdaten in die HOARX-Modellierung und die CCA mit einbezogen werden. Für die Prädiktor-basierten Verfahren existiert beispielsweise eine Erweiterung für LPV-Systeme [Win08].

3.7 Beispiel zur Arbeitsweise der 4SID-Verfahren

Um nach diesen mathematischen Beschreibungen und den Vergleichen der 4SID-Verfahren die Vorgehensweise anschaulich darzustellen, wird in diesem Abschnitt das mathematische Modell eines Drei-Tank-Systems identifiziert, welches das linearisierte Verhalten um einen Arbeitspunkt beschreibt. Das kontinuierliche, linearisierte Beispielsystem wurde samt Parametrierung [Klu08] entnommen. Beispielfhaft wird die Identifikation zunächst mit der selbst implementierten Variante des generischen geometrischen Algorithmus mit CVA-Gewichtung beschrieben, die sich an den dort „robust“ genannten Algorithmus in [OM96] anlehnt (vgl. auch [Nic07]). Anschließend wird kurz auf die mit der MATLAB-Funktion `n4sid` und dem Programm ADAPT_{x} erzielten Ergebnisse eingegangen.

Wird das in der Abbildung 3.5 dargestellte Drei-Tank-System um den in der Tabelle 3.4(a) angegebenen Arbeitspunkt linearisiert, so erhält man mit den Größen aus der Tabelle 3.4(b) das kontinuierliche Zustandsraummodell

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \begin{bmatrix} -0.332 & 0.332 & 0 \\ 0.332 & -0.664 & 0.332 \\ 0 & 0.332 & -0.524 \end{bmatrix} \mathbf{x}(t) + \begin{bmatrix} 0.764 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0.764 \end{bmatrix} \mathbf{u}(t), \quad (3.116a)$$

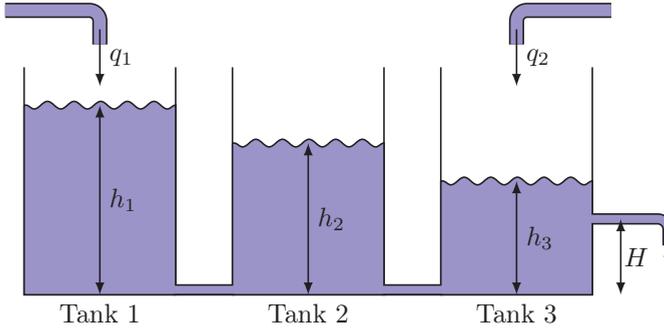
$$\mathbf{y}(t) = \mathbf{x}(t). \quad (3.116b)$$

Diskretisiert man dieses System mit der normierten Abtastzeit von $T_A = 0.1$, so ergibt sich das zeitdiskrete Zustandsraummodell

$$\mathbf{x}(k+1) = \begin{bmatrix} 0.9679 & 0.0316 & 0.0005 \\ 0.0316 & 0.9368 & 0.0313 \\ 0.0005 & 0.0313 & 0.9495 \end{bmatrix} \mathbf{x}(k) + \begin{bmatrix} 0.0752 & 0.0000 \\ 0.0012 & 0.0012 \\ 0.0000 & 0.0744 \end{bmatrix} \mathbf{u}(k), \quad (3.117a)$$

$$\mathbf{y}(k) = \mathbf{x}(k). \quad (3.117b)$$

Für die durchzuführende Identifikation wurde das kontinuierliche lineare Zustandsraummodell (3.116) in Simulink implementiert und ein Betrieb von 10 h simuliert. Während der Simulation wurden die Signale mit der normierten Abtastzeit von



(a) Drei-Tank-System

Parameter	Wert
Grundfläche der Tanks	$A = 25\pi \text{ m}^2$
Querschnittsfläche Verbindungen/Abfluss	$a = 0.0625\pi \text{ m}^2$
Höhe des Abflusses von den Tankböden	$H = 4 \text{ m}$

(b) Parameter des Drei-Tank-Systems

Abbildung 3.5: Aufbau und Parameter des Drei-Tank-Systems [Klu08]

Größe	Wert im Arbeitspunkt
Höhe Tank 1 (x_1)	9 m
Höhe Tank 2 (x_2)	8 m
Höhe Tank 3 (x_3)	7 m
Zufluss Tank 1 (u_1)	$0.87 \text{ m}^3/\text{s}$
Zufluss Tank 3 (u_2)	$0.63 \text{ m}^3/\text{s}$

(a) Arbeitspunkt für die Linearisierung

Größe	Abweichung vom Arbeitspunkt der Größe
$y_1 = x_1$	h_1 normiert auf 1 m
$y_2 = x_2$	h_2 normiert auf 1 m
$y_3 = x_3$	h_3 normiert auf 1 m
u_1	q_1 normiert auf $1 \text{ m}^3/\text{s}$
u_2	q_2 normiert auf $1 \text{ m}^3/\text{s}$
t	Echtzeit normiert auf 1 min

(b) Zuordnung der Größen im Zustandsraummodell

Tabelle 3.4: Arbeitspunkt für die Linearisierung und Größen des linearen Zustandsraummodells [Klu08]

$T_A = 0.1$ aufgezeichnet. Damit liegen 6000 Datenpunkte pro Signal vor. Als Ausgangsgrößen wurden jeweils bandbegrenzte weiße Rauschprozesse mit der Varianz $\sigma^2 = 1$ gewählt, wodurch die Bedingung der genügenden Anregung sicher erfüllt ist. Zusätzlich wurden die Ausgangsgrößen mit unabhängig verteiltem, bandbegrenztem weißem Rauschen mit der Varianz $\sigma^2 = 0.05$ überlagert. Die drei Ausgangssignale sind in der Abbildung 3.6 zusammen mit den unverrauschten Signalverläufen dargestellt.

Aus diesem Datensatz wurden dann im Rahmen der eigenen Implementierung des generischen geometrischen 4SID-Algorithmus die Block-Hankel-Matrizen mit $i = 30$ aufgebaut und der schiefe Prädiktor mittels Projektion berechnet. Anschließend wurde dieser mit den CVA-Gewichtungsmatrizen gewichtet und die Singulärwertzerlegung durchgeführt. Die ersten 20 berechneten Singulärwerte sind in der Abbildung 3.7 dargestellt.

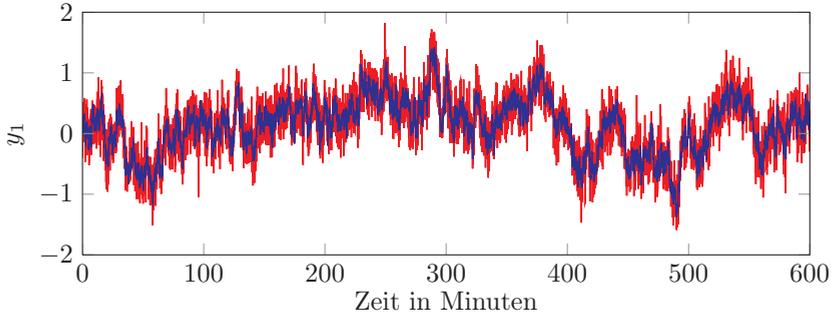
Wie man der Abbildung entnehmen kann, sind die ersten drei Singulärwerte deutlich größer als alle weiteren, und es liegt zwischen dem dritten und vierten Singulärwert auch die größte Differenz $s_i - s_{i+1}$ vor. Somit wurde die Ordnung 3 korrekt identifiziert. Das mit dem selbst implementierten Algorithmus berechnete zeitdiskrete Zustandsraummodell dritter Ordnung lautet

$$\tilde{\mathbf{x}}(k+1) = \begin{bmatrix} 0.9955 & -0.0007 & -0.0002 \\ 0.0018 & 0.9577 & 0.0005 \\ -0.0341 & 0.0204 & 0.8989 \end{bmatrix} \tilde{\mathbf{x}}(k) + \begin{bmatrix} -0.0890 & -0.0477 \\ -0.1623 & 0.2212 \\ -0.2663 & -0.2485 \end{bmatrix} \mathbf{u}(k), \quad (3.118a)$$

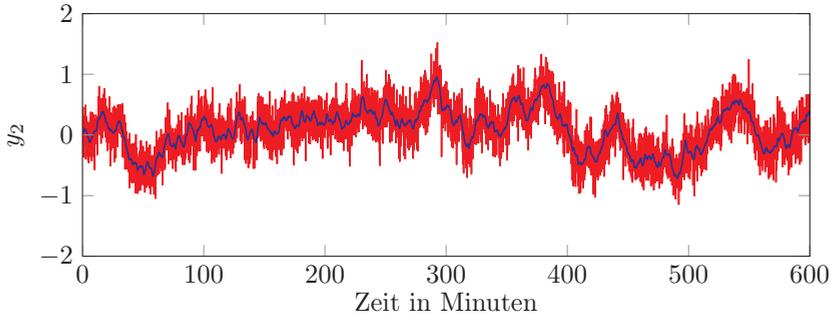
$$\mathbf{y}(k) = \begin{bmatrix} -0.4302 & -0.1503 & -0.0501 \\ -0.3306 & 0.0247 & 0.0833 \\ -0.2718 & 0.2220 & -0.0489 \end{bmatrix} \tilde{\mathbf{x}}(k) + \begin{bmatrix} 0.0022 & -0.0030 \\ -0.0059 & 0.0066 \\ -0.0030 & -0.0002 \end{bmatrix} \mathbf{u}(k). \quad (3.118b)$$

Da im selbst implementierten Algorithmus stets ein Modell mit Durchgriff berechnet wird, tritt hier aufgrund des Rauschens auch eine Matrix \mathbf{D} auf, deren Elemente jedoch ein bis zwei Größenordnungen kleiner sind als die Elemente der anderen Parametermatrizen. Erwartungsgemäß fallen auch die weiteren Parametermatrizen deutlich anders aus als beim exakt diskretisierten Zustandsraummodell (3.117), da bei der 4SID nur eine mögliche, nicht physikalisch interpretierbare Wahl der Zustandsvariablen getroffen wird.

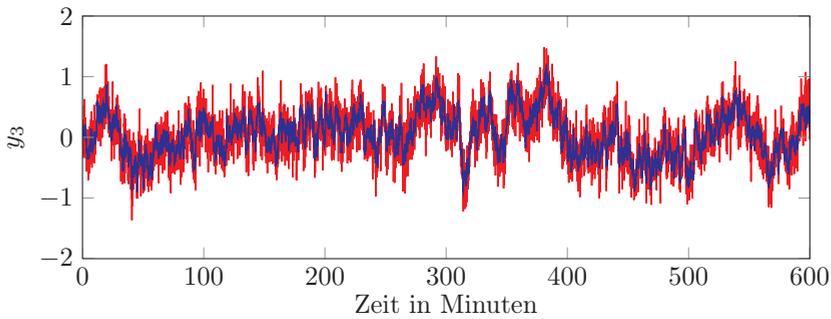
In diesem speziellen Fall kann jedoch die notwendige Transformationsmatrix direkt angegeben werden, um die identifizierten Zustandsgrößen auf die ursprünglichen Zustandsgrößen zu transformieren. Da im Originalsystem (3.117) die Ausgangsgrößen genau den Zustandsgrößen entsprechen, stellt die identifizierte Matrix $\tilde{\mathbf{C}}$ die benö-



(a) Abweichung der Höhe im Tank 1



(b) Abweichung der Höhe im Tank 2



(c) Abweichung der Höhe im Tank 3

Abbildung 3.6: Verlauf der Ausgangsgrößen ohne (blau) und mit (rot) überlagertem Rauschen

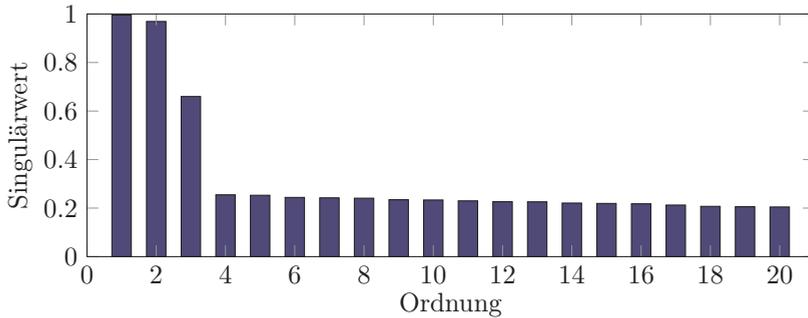


Abbildung 3.7: Die ersten 20 Singulärwerte des selbst implementierten Algorithmus für das Drei-Tank-System

tigte Transformationsvorschrift dar. Damit kann mit dem Zusammenhang $\mathbf{x} = \widehat{\mathbf{C}}\tilde{\mathbf{x}}$ das identifizierte System in den physikalischen Zuständen geschrieben werden:

$$\mathbf{x}(k+1) = \begin{bmatrix} 0.9646 & 0.0381 & -0.0028 \\ 0.0310 & 0.9374 & 0.0319 \\ -0.0006 & 0.0318 & 0.9501 \end{bmatrix} \mathbf{x}(k) + \begin{bmatrix} 0.0760 & -0.0002 \\ 0.0032 & 0.0005 \\ 0.0012 & 0.0742 \end{bmatrix} \mathbf{u}(k), \quad (3.119a)$$

$$\mathbf{y}(k) = \mathbf{x}(k) + \begin{bmatrix} 0.0022 & -0.0030 \\ -0.0059 & 0.0066 \\ -0.0030 & -0.0002 \end{bmatrix} \mathbf{u}(k). \quad (3.119b)$$

Alle Fehler der geschätzten Matrixelemente liegen in der Größenordnung 10^{-3} oder darunter. Die Systeme stimmen somit gut überein, was auch der Vergleich der Sprungantworten mit denen des exakt diskretisierten Modells zeigt, der in der Abbildung 3.8 dargestellt ist.

Zum Vergleich wurde mit der in der SYSTEM IDENTIFICATION TOOLBOX von MATLAB verfügbaren 4SID-Implementierung `n4sid` ebenfalls ein Systemmodell aus dem Datensatz ermittelt. Um eine vergleichbare Ausgangslage zu haben, wurde die Berechnung der Durchgangsmatrix manuell ausgewählt. Außerdem wurde der Zukunfts- und Vergangenheitshorizont mit $i = 30$ vorgegeben. Mit diesen Einstellungen ergab sich ebenfalls ein Modell dritter Ordnung, dessen Parameter wie beim eben gezeigten Modell nur Fehler in der Größenordnung 10^{-3} oder darunter aufweisen. Die Sprungantworten dieses Modells sind ebenfalls in der Abbildung 3.8 dargestellt und sind nicht von denen des zuvor berechneten Modells zu unterscheiden. Die Modellparameter sowie die Sprungantwortverläufe änderten sich praktisch nicht, als ein Modell ohne Durchgriff angenommen wurde. Auch bei einem Durchlauf mit der Standardkonfiguration der Funktion, bei der die Horizonte automatisch ermittelt werden, wurde nahezu dasselbe Ergebnis berechnet.

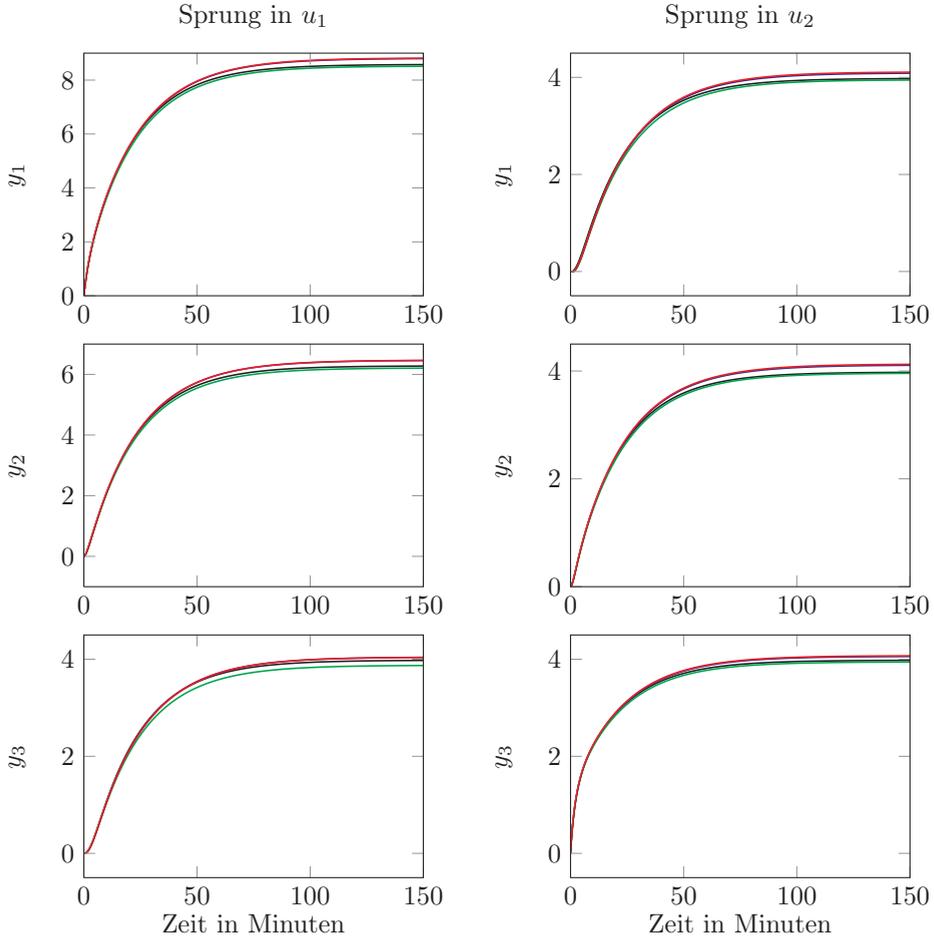


Abbildung 3.8: Vergleich der Sprungantworten des exakt diskretisierten Zustandsraummodells (schwarz) und der identifizierten Zustandsraummodelle mit dem selbst implementierten Algorithmus (blau), mit der MATLAB-Funktion `n4sid` (rot) und mit ADAPT_x (grün), wobei die roten über den blauen sowie die grünen über den schwarzen Verläufen liegen, wenn diese nicht sichtbar sind

Als dritte 4SID-Implementierung kam die kommerzielle Software ADAPT_x für MATLAB zum Einsatz, um ein Modell des Drei-Tank-Systems zu schätzen. Auch hier wurde der Horizont für das HOARX-Modell mit 30 vorgegeben sowie eine Durchgangsmatrix berechnet. Das Programm ermittelte aus den Daten ein Systemmodell vierter Ordnung als optimale Lösung. Dieses Verhalten deckt sich mit der im Abschnitt 3.6 dargestellten Eigenschaft des hier zur Anwendung kommenden AIC, welches zum leichten Überschätzen der Ordnung tendiert. Durch die zu hohe Ordnung konnte keine Transformation und Analyse der Systemparameter durchgeführt werden. Daher wurde hier manuell die Ordnung drei vorgegeben, um die Ergebnisse zu vergleichen. Auch die Parameter des Modells dritter Ordnung weisen dieselbe Größenordnung in der Abweichung zu den wahren Parametern auf wie die beiden mit den anderen Verfahren geschätzten Modelle. Die Verläufe der Sprungantworten dieses Modells sind ebenfalls in der Abbildung 3.8 zu finden. Diese Verläufe sind nahezu identisch mit den hier nicht dargestellten Verläufen des automatisch berechneten Modells vierter Ordnung und liegen mit Ausnahme des Verlaufs für die Ausgangsgröße y_3 bei einem Sprung in u_1 näher am wahren Verlauf als die der beiden anderen Modelle.

3.8 Zusammenfassung

Die 4SID in den verschiedenen Ausprägungen, von denen die wichtigsten in diesem Kapitel vorgestellt wurden, stellt ein mächtiges Werkzeug zur Black-Box-Identifikation dar. Durch den enthaltenen Ordnungsreduktionsschritt und die nicht-iterative Vorgehensweise erhält man sehr schnell Modelle niedriger Ordnung und hoher Güte. Durch die Auslegung auf Zustandsraummodelle ist die Methode dabei von vornherein für MIMO-Systeme geeignet, ohne dass Besonderheiten zu berücksichtigen sind. Nutzt man ein geeignetes Informationskriterium zur Ordnungsschätzung, so kann die Identifikation mit den 4SID-Methoden vollständig automatisiert ablaufen.

Das vorgestellte Ablaufschema erlaubt es, die von der Herleitung her sehr verschiedenen Algorithmen in einem einheitlichen Rahmen zu betrachten. Die neben der CVA ältesten und in der Literatur weit verbreiteten geometrischen Verfahren sind dabei nur für die Identifikation im offenen Kreis geeignet. Insbesondere wegen der Skalierungsunabhängigkeit ist bei unbekannter Systemordnung dabei die CVA-Gewichtung zu empfehlen, wenngleich diese Interpretation nicht an die statistische Original-CVA heranreicht, da sie kein HOARX-Modell im Datenvorverarbeitungsschritt beinhaltet.

Insbesondere bei der Identifikation im geschlossenen Regelkreis, aber auch wegen ihrer höheren numerischen Stabilität, sind die statistische CVA sowie die Prädiktorbasierten Verfahren zu empfehlen. Letztere, die erst seit kurzem in dieser Form beschrieben sind, schnitten beim praktischen Vergleich von der Güte der Schät-

zung ebenso gut ab wie die kommerzielle Implementierung der CVA. Jedoch ist die Handhabbarkeit der Prädiktor-basierten Verfahren etwas schwieriger, und eine kommerzielle Implementierung mit entsprechender Unterstützung durch den Hersteller bei der Anwendung existiert zumindest bisher noch nicht.

Kapitel 4

Grundlagen der PEM-Brennstoffzelle

Brennstoffzellen sind galvanische Elemente, deren Fähigkeit die direkte Umwandlung chemischer Energie in elektrische Energie darstellt. Man unterscheidet insgesamt drei Arten von galvanischen Elementen. Primäre galvanische Zellen verbrauchen mindestens einen der Reaktanden aus einem endlichen Vorrat, wobei die Reaktion nicht direkt umkehrbar ist. Damit muss eine solche Zelle ersetzt werden, wenn der Vorrat erschöpft ist. Zu dieser Art gehören die klassischen Batterien. Kann man, wie bei Akkumulatoren, die Reaktion umkehren und durch Zuführen elektrischer Energie die im Vorrat gespeicherte Stoffmenge an Reaktanden wieder erhöhen, so spricht man von sekundären galvanischen Zellen. Die Brennstoffzelle schließlich gehört der Gruppe der tertiären galvanischen Zellen an, bei welchen der chemische Energieträger nicht in einem zur Zelle gehörenden Vorrat gespeichert ist, sondern durch externe Zuführung von Stoffen bereitgestellt wird. Diese externe Zuführung der Reaktanden ermöglicht einen dauerhaften Betrieb, solange die Versorgung aufrecht erhalten wird.

Wie bei den Batterien und Akkumulatoren gibt es auch bei den Brennstoffzellen verschiedene Typen, denen allen dasselbe Funktionsprinzip zugrunde liegt. Die elektrochemische Reaktion findet räumlich durch einen Elektrolyt getrennt in Teilreaktionen an den Elektroden statt, wobei an der Anode Elektronen frei werden (Oxidationsreaktion) und an der Kathode Elektronen bei der Reaktion aufgenommen werden (Reduktionsreaktion). Der Elektrolyt leitet dabei Ionen, für Elektronen ist er nicht leitfähig. Die Elektroden werden über den gewünschten Verbraucher elektrisch leitend verbunden, sodass die Elektronen über diesen Weg von der Anode zu Kathode gelangen und dabei im Verbraucher elektrische Arbeit verrichten. Diese direkte Umwandlung in elektrische Energie ermöglicht gegenüber Verbrennungsprozessen mit dem Umweg über thermische und kinetische Energie einen höheren elektrischen Wirkungsgrad, der nicht durch den Carnot-Faktor beschränkt ist [IT01].

Die verschiedenen Typen von Brennstoffzellen unterscheiden sich im Aufbau sowie den verwendeten Materialien, den verwendeten Reaktanden und der Betriebstemperatur. Sie werden im Folgenden in einem knappen Überblick basierend auf [IT01, LD03, Has08, Nie09] vorgestellt:

Festelektrolyt-Brennstoffzelle: Als Vertreter der Hochtemperaturbrennstoffzellen wird die Festelektrolyt-Brennstoffzellen (SOFC¹) bei 700 °C bis 1000 °C betrieben. Der Elektrolyt ist meist eine technische Keramik, die Sauerstoffionen leitet. Als Oxidationsmittel wird Luft oder reiner Sauerstoff verwendet, das als Reduktionsmittel zugeführte Brenngas kann Wasserstoff, Methan, Erd- oder Kohlegas sein. Aufgrund der hohen Temperatur sind hitzebeständige Werkstoffe wie Keramiken nötig, es werden dafür jedoch keine Edelmetalle als Katalysatoren benötigt. Die SOFC ist im Vergleich zu anderen Typen daher unempfindlicher gegenüber Verunreinigungen der Brenngase.

Schmelzkarbonat-Brennstoffzelle: Ebenfalls zu den Hochtemperaturbrennstoffzellen gehört die Schmelzkarbonat-Brennstoffzelle (MCFC²), deren übliche Betriebstemperatur zwischen 600 °C und 800 °C liegt. Das Karbonation ist für den Ladungstransport im Schmelzkarbonat-Elektrolyt zuständig, als Brenngas sind daher kohlenstoffhaltige Gase wie Methan, Erd- oder Kohlegas gegenüber Wasserstoff zu bevorzugen, als Oxidationsmittel sind mit Kohlendioxid angereicherter Sauerstoff oder Luft möglich.

Phosphorsäure-Brennstoffzelle: Die Temperatur der Phosphorsäure-Brennstoffzelle (PAFC³) beträgt im Betrieb zwischen 160 °C und 200 °C. Die bei diesen Temperaturen flüssige Phosphorsäure ist als Protonen leitender Elektrolyt in einem schwammartigen Material gebunden. Auch bei diesem Typ kommen Luft oder Sauerstoff als Kathodengas in Frage. Als Brenngas wird Wasserstoff benötigt, mit einem zusätzlichen Reformer kann auch Erdgas verwendet werden.

Alkalische Brennstoffzelle: Bei der ersten technischen Verwendung von Brennstoffzellen im Rahmen der Raumfahrtmissionen der NASA kamen alkalische Brennstoffzellen (AFC⁴) zum Einsatz, deren Elektrolyt aus Kalilauge besteht und Hydroxidionen leitet. Die AFC kann nur mit reinem Wasserstoff und reinem Sauerstoff betrieben werden, die Betriebstemperatur liegt um 80 °C.

Direkt-Methanol-Brennstoffzelle: Als einzige Art verwendet die Direkt-Methanol-Brennstoffzelle (DMFC⁵) den Brennstoff Methanol. Sie ist eine Variante der PEMFC, hat jedoch eine geringere Leistungsdichte, die von der langsamer ablaufenden Reaktion und der Löslichkeit von Methanol in Wasser herrührt.

¹SOFC steht für „solid oxide fuel cell“ (engl. für Festelektrolyt-Brennstoffzelle).

²MCFC steht für „molten carbonate fuel cell“ (engl. für Schmelzkarbonat-Brennstoffzelle).

³PAFC steht für „phosphoric acid fuel cell“ (engl. für Phosphorsäure-Brennstoffzelle).

⁴AFC steht für „alkaline fuel cell“ (engl. für alkalische Brennstoffzelle).

⁵DMFC steht für „direct methanol fuel cell“ (engl. für Direkt-Methanol-Brennstoffzelle).

Polymerelektrolytmembran-Brennstoffzelle: Die PEMFC wird bei Temperaturen bis etwa 80 °C unter Verwendung von reinem Wasserstoff als Brenngas betrieben. Als Oxidationsmittel sind Luft und reiner Sauerstoff möglich. Die Membran aus einem Polymerelektrolyten benötigt Wasser, um Protonen leiten zu können, weshalb meist eine Befeuchtung der Betriebsgase stattfindet. Seit einiger Zeit wird vermehrt auch an einer Variante der PEMFC für Temperaturen zwischen 120 °C und 200 °C geforscht, der sogenannten Hochtemperatur-PEMFC (HT-PEMFC).

Weitere Informationen über die verschiedenen Brennstoffzellen können der angegebenen Literatur entnommen werden. Im Rahmen dieser Arbeit werden nur die PEM-Brennstoffzellen weiter betrachtet, da sie, u. a. aufgrund ihrer Leistungsdichte und der niedrigen Betriebstemperatur, den bevorzugten Typus im Automobilbereich darstellen. Ihre Funktionsweise wird im Abschnitt 4.1 nochmals genauer beschrieben. Daran schließt sich der Abschnitt 4.2 an, in dem auf die zur Nutzung des PEMFC-Stacks benötigten weiteren Komponenten, die gemeinsam das PEMFC-System bilden, eingegangen wird. Wie der Betrieb in einem solchen System auf einem Stack-Teststand nachgebildet werden kann, wird im Abschnitt 4.3 beschrieben. Zum Abschluss des Kapitels wird im Abschnitt 4.4 die systemtheoretische Sichtweise auf einen PEMFC-Stack dargelegt.

4.1 Funktionsweise der PEM-Brennstoffzelle

Da die im Rahmen dieser Arbeit vorgeschlagenen Modellierungsansätze mit Messdaten des Stacks durch Systemidentifikation gewonnen werden und nicht durch eine rigorose Modellbildung, ist eine genaue physikalische Betrachtung wie in [IT01, LD03, Nie09] nicht notwendig. Dennoch muss auch bei der Systemidentifikation ein grundsätzliches Verständnis des zu untersuchenden Systems vorhanden sein, um beispielsweise die korrekte Zuordnung der gemessenen Signale zu den Ein- und Ausgangsgrößen oder auch die Wahl der Anregungssignale vornehmen zu können. Daher wird im Folgenden zunächst die Funktionsweise einer einzelnen PEM-Brennstoffzelle beschrieben, ohne dabei die mathematischen Beschreibungen und Zusammenhänge zu vertiefen.

Der schematische Aufbau einer PEM-Brennstoffzelle ist in der Abbildung 4.1 dargestellt. Die gasdichten, gut elektrisch leitenden Interkonnektoren begrenzen die Zelle nach oben und unten. Ihre Dicke wurde aus Platzgründen, im Gegensatz zu den weiteren Schichten, nicht in einem realistischen Größenverhältnis zu den anderen Lagen dargestellt. In der Realität sind sie im Verhältnis deutlich dicker und können zusätzlich noch Kühlwasserkanäle enthalten.

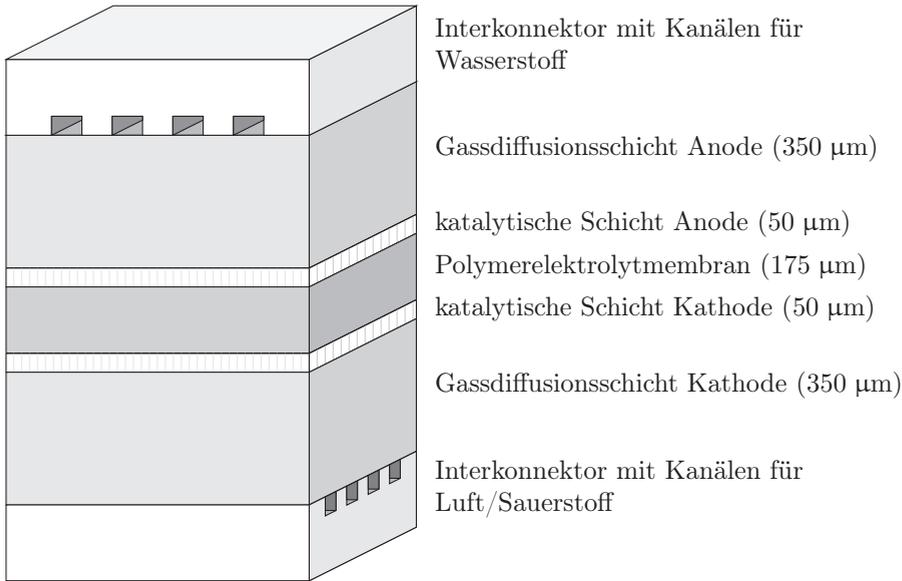
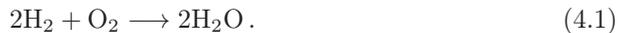


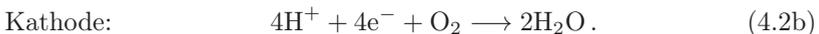
Abbildung 4.1: Schematischer Aufbau einer PEMFC nach [Nie09]

Die beiden Elektroden setzen sich jeweils aus der Gassdiffusionsschicht und einer katalytisch aktiven Schicht zusammen. Die Gassdiffusionsschichten bestehen aus porösem, Elektronen leitendem Material. Auf dieses sind zur Membran hin Platinpartikel aufgebracht, welche als Katalysator für den Ablauf der chemischen Reaktionen bei den niedrigen Betriebstemperaturen der PEMFC notwendig sind. Die Membran selbst ist nicht durchlässig für Gase und trennt die beiden Gasräume voneinander ab. Angefeuchtet leitet sie Protonen (H^+ -Ionen), für Elektronen ist sie nicht leitfähig.

Nur an der sogenannten Drei-Phasen-Grenzfläche, an welcher Katalysator, Elektrolyt und Gas zusammentreffen, können die chemischen Reaktionen in der Zelle ablaufen. Die Gesamtreaktion in der PEMFC entspricht der Verbrennungsreaktion des Brenngases Wasserstoff:



In der Brennstoffzelle läuft diese Oxidation des Wasserstoffs getrennt in zwei Teilreaktionen an den beiden Drei-Phasen-Flächen der Elektroden ab:



Dabei wird im Gegensatz zur Verbrennungsreaktion nicht nur Wärme, sondern auch elektrische Energie frei. Bei nicht geschlossenem Stromkreis baut sich ein Potenzial,

die sogenannte Leerlaufspannung, zwischen den beiden Elektroden auf, da die Protonen durch den Elektrolyten wandern, die Elektronen aber nicht von der Anode zur Kathode gelangen können. Wird der Stromkreis über einen Verbraucher geschlossen, so fließt ein Strom und es wird elektrische Arbeit im Verbraucher verrichtet. Wegen dieser direkten Umwandlung in elektrische Energie anstelle von Wärmeenergie spricht man auch von der „kalten Verbrennung“. Trotzdem wird hier ebenfalls ein Teil der chemischen Energie durch die internen Widerstände der Zelle in Wärme umgewandelt, sobald ein Stromfluss stattfindet.

Um höhere Ausgangsspannungen zu erreichen, werden mehrere Zellen elektrisch seriell zu einem sogenannten Brennstoffzellen-Stack verschaltet. Möchte man bei gleicher Spannung einen höheren Strom aus der Zelle entnehmen, so muss die aktive Zellfläche vergrößert werden. Die Abhängigkeit zwischen dem fließenden Strom und der zugehörigen Zellspannung wird in sogenannten Polarisationskurven aufgetragen. Der genaue Verlauf dieser auch Strom-Spannungskennlinie genannten nichtlinearen Funktion zwischen Strom und Spannung hängt von den weiteren Betriebsbedingungen der Zelle sowie dem konkreten Zellaufbau ab. Um eine bessere Vergleichbarkeit des Verhaltens zu haben, werden in den Polarisationskurven von Stacks häufig die mittlere Zellspannung über der auf die Zellfläche bezogene Stromdichte angegeben. In der Abbildung 4.2 sind die gemessenen Verläufe acht solcher Polarisationskurven eines kommerziell erhältlichen PEMFC-Stacks bei verschiedenen Betriebsbedingungen abgebildet, die für die Validation eines Diagnoseansatzes aufgenommen wurden (vgl. auch [BPNK06, BPNK07]).

Die die verbrauchten Gasmengen im Betrieb hängen direkt vom Stromfluss ab. Je mehr Strom fließt und je mehr Elektronen damit umgesetzt werden müssen, desto größer sind die Mengen an benötigtem Gas sowohl an der Anode als auch an der Kathode. Das Verhältnis zwischen zugeführter und verbrauchter Menge an Gas nennt man Stöchiometrie. Führt man der Zelle an Anode und Kathode genau soviel Gas zu, wie für die gewünschte Leistung benötigt wird, so ist dieses Verhältnis für beide Gase eins und man spricht vom stöchiometrischen Betrieb. Bei einer Unterversorgung der PEMFC mit Betriebsgasen können Schäden an der Zelle auftreten, weshalb man die Zellen mit Stöchiometriewerten größer eins betreibt. Aus Effizienzsicht versucht man allerdings zumindest beim Wasserstoff, sich dem stöchiometrischen Betrieb so gut wie möglich zu nähern, ohne dabei Schädigungen der Zelle in Kauf nehmen zu müssen.

Die Gaszuführung an die Gasdiffusionsschichten der Elektroden erfolgt durch die eingefrästen Gaskanäle in den Interkonnektoren. Diese aus Metallen oder kohlenstoffhaltigen Werkstoffen bestehenden Platten dienen auch als elektrische Verbindung und gasdichte Abtrennung zur nächsten Zelle in einem Brennstoffzellen-Stack. In einem Stack wird zwischen zwei Zellen meist nur eine Platte mit beidseitig eingefrästen Kanälen verwendet.

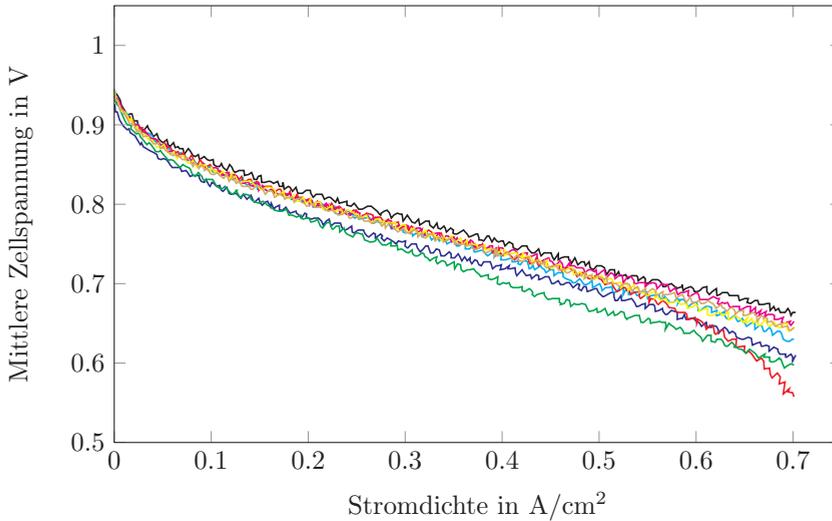


Abbildung 4.2: Polarisationskurven eines PEMFC-Stacks mit acht Zellen und einer Zellfläche von 100 cm^2 bei verschiedenen Betriebsbedingungen [BPNK06, BPNK07]

Neben der optimalen Versorgung mit Betriebsgasen spielen auch der Wassergehalt der Membran sowie die Temperatur der Brennstoffzelle jeweils eine wichtige Rolle beim Betrieb. So darf die Membran für eine gute Protonenleitfähigkeit nicht zu trocken werden. Auf der anderen Seite kann das aufgrund der niedrigen Betriebstemperatur der PEMFC zumindest teilweise flüssige Wasser auch die Poren der Gasdiffusionsschicht zusetzen. Wenn zu große Mengen an Wasser im Stack sind, verhindert dies einen Gasaustausch mit der Reaktionsschicht. Die Temperatur der Brennstoffzelle nimmt im normalen Betrieb durch die in der Zelle entstehende Wärme zu. Damit die Zelle nicht zu heiß wird und die Membran dadurch austrocknet, muss der PEMFC-Stack gekühlt werden. Außerdem werden die Betriebsgase häufig befeuchtet, um ein Austrocknen zu verhindern.

Im Laufe der Zeit verschlechtert sich die Leistungsfähigkeit PEM-Brennstoffzelle, d. h. es kann weniger Leistung bei identischen Betriebsbedingungen entnommen werden als zu Beginn, da die Verluste an inneren Widerständen der Zelle höher werden. Diese auch Degradation genannten Alterungseffekte treten verstärkt auf, wenn die Betriebsbedingungen den optimalen Bereich verlassen. Die Untersuchung der hinter dieser Degradation steckenden Mechanismen und die zugehörige mathematische Beschreibung sind Gegenstand aktueller Forschungsarbeiten (z. B. [GEVD09, JKT⁺09]). Im Rahmen dieser Arbeit werden diese Effekte nicht weiter betrachtet, da keine reproduzierbaren Messdaten für Alterungseffekte zur Verfügung standen.

4.2 Aufbau eines PEMFC-Systems

Für den Betrieb des PEMFC-Stacks sind verschiedene weitere Komponenten notwendig, die für die Versorgung mit den Betriebsgasen oder die Temperierung mittels Kühlwasser verantwortlich sind. Zusammen bilden sie das PEMFC-System, das zur Energieversorgung elektrischer Verbraucher in Anwendungen integriert werden kann. Je nach geplanter Anwendung und der damit verbundenen Randbedingungen sowie in Abhängigkeit der elektrischen Leistung des PEMFC-Stacks variiert der Aufbau eines solchen Systems.

Bei sehr kleinen PEMFC-Stacks mit geringer Leistung ist oftmals kein kompliziertes Kühlsystem notwendig, da die Oberfläche im Verhältnis zum Volumen relativ groß ist und die Wärme beispielsweise mit einem passiven Kühlkörper abgeführt werden kann. Bei Bedarf kann dies durch einen Lüfter unterstützt werden. Bei größeren Leistungen, wie sie auch in automobilen Anwendungen benötigt werden, wird meist eine Wasserkühlung eingesetzt. Dazu wird Wasser durch zusätzliche Kanäle in den Bipolarplatten und durch einen Wärmetauscher gepumpt. Über den Wärmetauscher kann die Wärme je nach Anwendung entweder weiter genutzt oder an die Umgebung abgegeben werden, wie beispielsweise beim mobilen Service-Roboter in [Nie09]. Eine Nutzung der Abwärme kommt beispielsweise zum Vorheizen der Betriebsgase, aber auch zur weiteren Verwertung beispielsweise in PEMFC-Systemen in Blockheizkraftwerken [Vet05, Kön07] in Frage. Bei der Verwendung einer Wasserkühlung kann der Kreislauf prinzipiell auch zum Aufheizen des Stacks bei Inbetriebnahme in kalten Umgebungen genutzt werden, um so schneller die Betriebstemperatur des Stacks zu erreichen.

Neben der Temperierung sind auch verschiedene Komponenten notwendig, um die Versorgung der Gase sicherzustellen. Anstelle von reinem Sauerstoff wird meist Luft als Kathodengas verwendet, da diese praktisch kostenlos zur Verfügung steht. Allerdings wird dann ein Kompressor benötigt, der für eine ausreichende Durchströmung der Kathode sorgt. Durch den Sauerstoffanteil der Luft von knapp 21% muss der Kathode etwa die fünffache Gasmenge zugeführt werden wie bei reinem Sauerstoff. Das Abgas der Kathode, welches das Produktwasser der chemischen Reaktion aus dem Stack transportiert, kann zur Anfeuchtung der Betriebsgase über einen Gas-Gas-Befeuchter genutzt werden. Alternativ kann das Wasser auch in einem Wasserabscheider dem Luftstrom entzogen und über andere Befeuchtungsmechanismen, beispielsweise Injektion, den Betriebsgasen teilweise wieder zugegeben werden.

Auf der Anodenseite wird der Wasserstoff aus einem geeigneten Vorratsbehälter oder aus einem Reformier über ein Ventil zugeführt. Als Vorratsbehälter kommen Druck- oder Flüssigtanks in Frage. Alternativ dazu existieren auch Metallhydrid-Speicher, bei denen der Wasserstoff in einem Metallgeflecht durch chemische Bindung gespeichert wird. Erwärmt man den Metallhydrid-Speicher, wozu beispielsweise die

Abwärme des Stacks verwendet werden kann, so gibt er den Wasserstoff wieder frei. Diese Speichertechnologie wird wegen des relativ hohen Gewichts und aufgrund des relativ langsamen Befüllungsvorgangs praktisch nicht für automobiler Anwendungen eingesetzt. Dort kommen Drucktanks mit bis zu 700 bar zum Einsatz. Tanks mit flüssigem Wasserstoff haben zwar eine noch höhere Speicherkapazität, jedoch ist die Verflüssigung des Wasserstoffs relativ energieintensiv und die Isolierung der Tanks schwierig. Würde ein Fahrzeug lange stehen und sich der Tank langsam erwärmen, so müsste nach und nach Wasserstoff über ein Überdruckventil abgelassen werden, was im schlimmsten Fall nach einiger Zeit zu einem leeren Tank führen kann. Auch ist die Technologie zum Befüllen von Drucktanks bereits für Erdgasfahrzeuge erprobt und bei den Kunden akzeptiert.

Eine Beschränkung der Gasmenge auf den stöchiometrischen Betrieb könnte zu lokalen Unterversorgungen führen. Damit ist beispielsweise an der Anode gemeint, dass zwar genügend Wasserstoff im Anodengasraum vorhanden ist, jedoch nicht an allen Stellen der aktiven Reaktionsschicht verfügbar ist, sodass an diesen Stellen lokale Schäden auftreten können. Auf Dauer sinkt dadurch die Leistungsfähigkeit der Brennstoffzelle. Um diese lokalen Unterversorgungen zu vermeiden, wird mehr Gas zugeführt, da eine homogene Verteilung im Stack nie vollständig erreicht werden kann. Zusätzlich werden die Gase mit erhöhtem Druck an Kathode und Anode bereitgestellt. Mithilfe eines sogenannten Spülventils kann der Gasraum der Anode beispielsweise von Wasseransammlungen befreit werden. Der erhöhte Druck sorgt auch für eine schneller ablaufende chemische Reaktion und damit für eine höhere Leistung des Stacks.

Um nicht unnötig Wasserstoff durch den überstöchiometrischen Betrieb ungenutzt an die Umwelt abzugeben, kann das Anodenabgas durch Verbrennung thermisch verwertet werden, wenn wie in einem Blockheizkraftwerk die Wärme sinnvoll genutzt werden kann. In anderen Anwendungen wie dem Automobil, wo bereits die normale Abwärme des Stacks den Wärmebedarf deckt oder übersteigt, kann auf der Anodenseite des PEMFC-Stacks eine sogenannte Rezyklierung des Gases stattfinden. Dabei wird das Anodenabgas über eine Pumpe komprimiert und dem Stack am Anodeneingang wieder zugeführt. Somit geht zumindest theoretisch kein unverbrauchter Wasserstoff verloren. Über ein Ventil wird dann, sobald die im Anodenkreislauf verfügbare Wasserstoffmenge zu gering ist, frischer Wasserstoff zugeführt. In der Praxis sammelt sich neben möglichem Flüssigwasser an der aktiven Schicht auch Stickstoff im Anodengas an, welcher von der Kathodenseite durch die Membran an die Anode diffundiert. Damit der Wasserstoffanteil im Anodengas nicht zu gering wird und es dadurch zu einer Unterversorgung der Zellen kommt, wird regelmäßig die Anode über das Spülventil gespült, wobei natürlich auch unverbrauchter Wasserstoff entweicht und somit eine vollständige Ausnutzung des Brenngases nicht möglich ist.

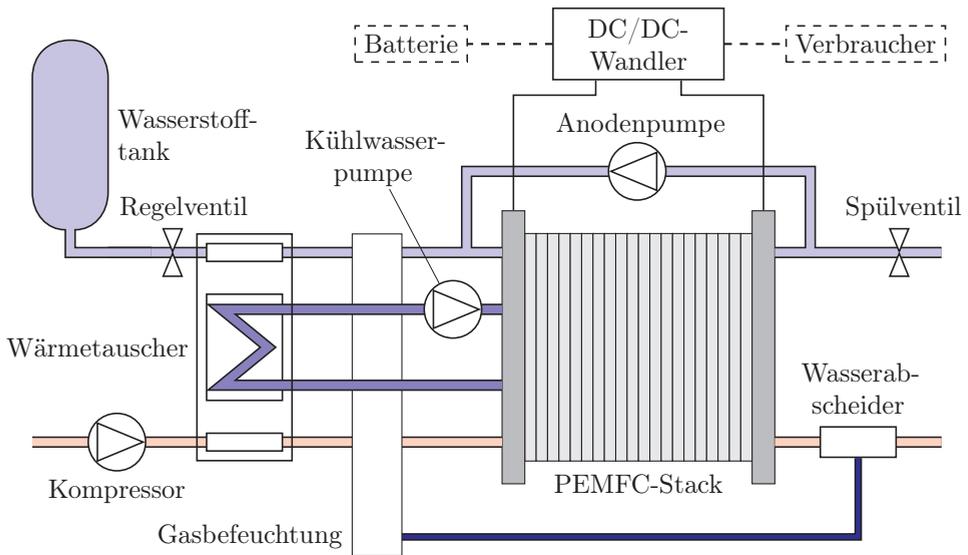


Abbildung 4.3: Schematischer Aufbau eines PEMFC-Systems

Auch auf der elektrischen Seite sind gegebenenfalls noch zusätzliche Komponenten erforderlich. Beim Betrieb eines Stacks kann entweder die Stackspannung (potentiostatischer Betrieb) oder, was bei den PEMFC häufiger der Fall ist, der entnommene Strom (galvanostatischer Betrieb) vorgegeben werden. Entsprechend des Betriebspunkts des Stacks, der auch mit durch die weiteren Betriebsparameter bestimmt wird, stellt sich die jeweils andere Größe auf den zugehörigen Wert ein. Bei dynamischem Betrieb erfolgen dabei Übergangsvorgänge, wodurch die Leistung schwankt. Möchte man beispielsweise Verbraucher über einen Stromkreis mit konstanter Spannung anschließen, so ist ein Gleichstromwandler (DC/DC-Wandler⁶) auf eine feste Ausgangsspannung nötig. Auch eine Wechselrichtung auf Wechselstrom ist möglich, diese wird im Automobil jedoch nicht eingesetzt.

Die hier beschriebenen zusätzlichen Komponenten des PEMFC-Systems sind teilweise selbst elektrische Verbraucher, die ebenfalls vom PEMFC-Stack versorgt und damit bei der Leistungsauslegung des Stacks berücksichtigt werden müssen. Bereits beim Anfahren des PEMFC-Systems müssen diese Verbraucher versorgt werden, damit der Stack von Beginn an beispielsweise mit Gasen versorgt wird. Daher ist eine zusätzliche Batterie notwendig, die diese Startphase überbrücken kann. Im Automobil wird die Batterie jedoch deutlich größer ausgelegt, als es für diese Startphase nötig wäre, damit sie im Fahrbetrieb zusätzliche elektrische Energie liefern kann. In dieser Batterie wird durch Rekuperation beim Bremsen elektrische Energie gespeichert, die durch den generatorischen Betrieb des Elektromotors in dieser Fahrsitua-

⁶DC steht für „direct current“ (engl. für Gleichstrom).

tion durch Umwandlung kinetischer Energie bereitgestellt wird. Bei konventionellen Fahrzeugen wird diese kinetische Energie über die Bremsen in Wärme umgesetzt. Durch diese Rückgewinnung elektrischer Energie kann Treibstoff durch die spätere Nutzung der in der Batterie gespeicherten Energie für den Antrieb gespart werden. Dies hat neben der Kostenersparnis für den Kunden auch den Vorteil einer größeren Reichweite bei gleicher Tankgröße. Schematisch ist der in einem Fahrzeug übliche Systemaufbau für PEM-Brennstoffzellen nach [PPS02] in der Abbildung 4.3 grafisch zusammengefasst.

4.3 Nachbildung des PEMFC-Systems auf einem Stack-Teststand

An einem Stack-Teststand steht nur der Stack selbst als wichtigster Teil des PEMFC-Systems zur Verfügung. Alle weiteren Komponenten des Systems müssen also vom Teststand ersetzt werden. Es werden häufig Stacks mit weniger Zellen und damit weniger Leistung als im späteren PEMFC-System untersucht und die Ergebnisse später skaliert, um Kosten für den Stack, aber auch Kosten und Aufwand am Teststand zu sparen.

Anstelle der im vorigen Abschnitt beschriebenen Komponenten im Bereich der Gasversorgung wie Pumpen und Kompressoren stehen am Teststand direkt Druckluft- und Wasserstoffanschlüsse zur Verfügung. Da die Dynamik der zusätzlichen Komponenten nicht modelliert werden soll, muss diese auch nicht durch den Teststand nachgebildet werden. So kann die Gasversorgung direkt über die im Teststand integrierten Druck- und Gasflussregler erfolgen. Auch eine Rezyklierung des Anodengases oder die Nutzung des Produktwassers aus dem Kathodengas finden am Teststand nicht statt. Das Verhalten des Stacks bei einer Wasserstoffrezyklierung an der Anode kann durch Beimischen von Stickstoff, der ebenfalls direkt zur Verfügung steht, emuliert werden. Die Befeuchtung der Betriebsgase erfolgt über zusätzliche, im Teststand integrierte Gasbefeuchter.

Die in den Testständen verbauten Gasflussregler arbeiten relativ genau, haben aber nur einen bestimmten Arbeitsbereich. Daher sind für jede Gassorte meist zwei oder drei unterschiedlich dimensionierte Gasregler verbaut, zwischen welchen am Teststand umgeschaltet werden muss, wenn die vorgegebenen Messzyklen sich über den Arbeitsbereich mehrerer Flussregler erstrecken. Beim Erreichen einer Umschaltgrenze wird das Testprogramm unterbrochen und der bisher verwendete Gasflussregler zu- und der neue aufgefahren. In dieser Zeit kann der Gasfluss über oder unter der gewünschten Menge liegen, da dieses Umschalten jeweils mit der maximalen Dynamik

des Reglers erfolgt. Dieses Umschalten sorgt daher für Abschnitte in den Messdaten, die in der späteren Anwendung so nicht auftreten werden.

Die durch den Stack zur Verfügung gestellte elektrische Energie wird am Teststand über eine elektronisch gesteuerte Last abgeführt. Mit deren Hilfe können nahezu beliebige Stromprofile vorgegeben und dem Stack aufgeprägt werden. So können beispielsweise neben einfachen, häufig zur Identifikation verwendeten Signalen wie Sprung- oder Treppenfunktionen auch Fahrzyklen am Teststand nachgebildet und so der PEMFC-Stack unter einer für eine automobilen Anwendung realistischen Belastung getestet werden.

Für die Temperierung des PEMFC-Stacks im Teststandsbetrieb steht dort auch ein Kühlwasserkreislauf zur Verfügung. Je nach Teststand können verschiedene Parameter vorgegeben werden. So wird üblicherweise die Temperatur des Kühlwassers am Stack-Eingang auf die gewünschte Stack-Temperatur eingestellt. Dann kann mit festem Kühlwasserfluss als Eingangsgröße eine Konfiguration realisiert werden, bei der die Temperatur des Kühlwassers am Stackaustritt eine Ausgangsgröße darstellt. Je nach Teststand ist auch die Möglichkeit implementiert, die Temperaturdifferenz des Kühlwassers über den Kühlwasserfluss zu regeln.

Die Datenerfassung aller Signale erfolgt üblicherweise zeitsynchronisiert. An den Testständen, die für die Erfassung der Daten dieser Arbeit zum Einsatz kamen, betrug die Abtastzeit der Signale eine Sekunde. Durch die internen Abläufe der Teststandssteuerung sowie der Trägheit der verbauten Regler konnten insbesondere aufgrund nicht sichergestellter Gasversorgungen bei hohen Dynamiken nicht beliebige Fahrzyklen vorgegeben werden. Die Dynamik der gemessenen Fahrzyklen wurde dabei mit einem gewissen Sicherheitsabstand zur maximal möglichen Dynamik realisiert, um Schäden des Stacks während der Messungen auf jeden Fall zu vermeiden. Die Erläuterungen zur konkreten Umsetzung bei den einzelnen für diese Arbeit durchgeführten Messungen erfolgt gemeinsam mit der Beschreibung der Vorgehensweise zur Identifikation und Diagnose in den folgenden beiden Kapiteln.

4.4 Systemtheoretische Betrachtung

Vorbereitend für die Identifikation und Diagnose wird der Stack hier noch aus systemtheoretischer Sichtweise betrachtet. Bei Berücksichtigung von Alterungseffekten stellt er ein zeitvariantes, nichtlineares MIMO-System dar. Da im Rahmen dieser Arbeit diese Degradation nicht betrachtet wird, kann der Stack hier als zeitinvariantes System angenommen werden. Durch die ausgedehnte Struktur der Reaktionsfläche ist er ein System mit verteilten Parametern, welches bei physikalisch-chemischer Modellierung durch partielle Differenzialgleichungen beschrieben werden muss. Eingangsgrößen des Systems sind, stromgeführten Betrieb vorausgesetzt,

- der Strom bzw. die Stromdichte,
- die Volumenströme der Gase an Kathode und Anode bzw. entsprechend die Wasserstoff- und die Sauerstoffstöchiometrie,
- jeweils der Druck der Betriebsgase an Kathode und Anode,
- über das Spülventil in indirekter Form die Wasserstoffkonzentration im Anodengas,
- die Befeuchtungsgrade der zugeführten Gase an Anode und Kathode,
- die Temperatur des Kühlwassers bei Eintritt in den Stack sowie
- der Volumenstrom des Kühlwassers oder die Temperaturdifferenz zwischen Kühlwassereintritt und -austritt am Stack.

Als Ausgangsgrößen können die Größen

- Stackspannung bzw. mittlere Zellspannung,
- jeweils der Druckabfall über Kathode und Anode sowie
- die Temperatur des Kühlwassers beim Kühlwasseraustritt aus dem Stack

angesehen werden. Diese systemtheoretische Betrachtung ist in der Abbildung 4.4 grafisch dargestellt. Bei dieser Darstellung sind bereits einige Vereinfachungen enthalten. So wird beispielsweise von einem Wärmeaustausch nur über das Kühlwasser ausgegangen, die Konvektion an die Umgebung wird vernachlässigt. Geht man bei diesem Wärmeübergang zusätzlich von idealen Bedingungen aus, so kann als Stack-Temperatur die Kühlwassertemperatur am Stack-Eingang angesehen werden, da dann der Stack alle Wärmeenergie über dieser Temperatur an das Kühlwasser abgibt. Durch diese idealisierten Überlegungen kann zumindest näherungsweise die Stack-Temperatur messtechnisch erfasst werden. Weitere innere Größen wie beispielsweise die Membranfeuchte oder Stöchiometriewerte an bestimmten Stellen wären ebenfalls interessante Größen für eine Betriebsführung, sind jedoch messtechnisch nicht erfassbar.

Werden diese inneren Größen des Systems nicht benötigt, weil beispielsweise andere Regelstrategien auf Basis der verfügbaren Messinformationen oder gar nur eine Steuerung der betreffenden Systemanteile zum Einsatz kommen, oder weil ein reines Simulationsmodell für die zur Verfügung stehende Leistung in Abhängigkeit der Eingangsgrößen benötigt wird, kann das System durch Nachbildung des Ein-/Ausgangsverhaltens beschrieben werden. Für diese Aufgabe eignen sich insbesondere auch Grey-Box- und Black-Box-Identifikationsmodelle, in denen die inneren Größen nicht oder nur bedingt berechnet werden. Wird nur die Spannung als Ausgangsgröße betrachtet, reduziert sich das zu erstellende Modell auf die MISO-Form.

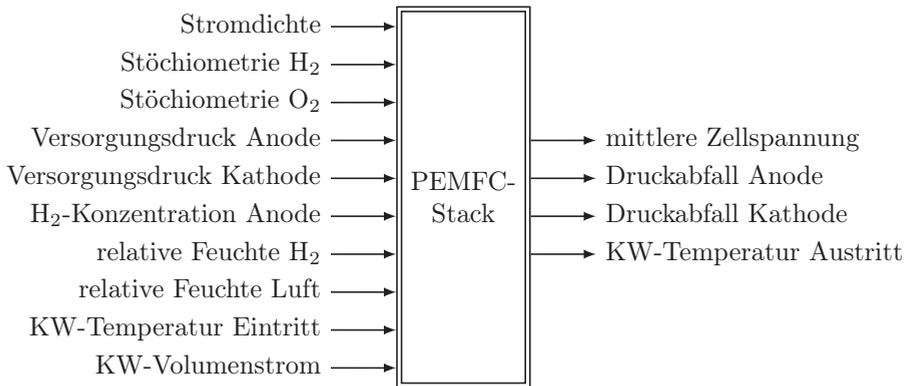


Abbildung 4.4: Systemtheoretische Darstellung des PEMFC-Stacks als nichtlineares MIMO-System (KW steht für Kühlwasser)

Auf Basis dieser systemtheoretischen Betrachtungen werden im folgenden Kapitel Simulationsmodelle für das Ein-/Ausgangsverhalten des Stacks beschrieben. Die Anwendung solcher Modelle für Diagnoseansätze folgt im Kapitel 6.

Kapitel 5

Simulationsmodelle für PEMFC-Stacks

Das Spektrum möglicher Anwendungen mit Brennstoffzellen als Quelle elektrischer Energie ist sehr breit und reicht von Blockheizkraftwerken (BHKW), bei denen neben der elektrischen Energie auch die Abwärme genutzt werden kann, über mobile Stromaggregate zur Versorgung nicht ans Stromnetz angeschlossener Verbraucher bis hin zur Versorgung mobiler Geräte aus dem Verbraucherelektroniksektor. Auch der Automobilbereich stellt, wie in der Einleitung bereits dargestellt, ein potenzielles Einsatzgebiet dar.

Insbesondere im Fahrzeugbereich, aber auch in den meisten anderen Bereichen müssen sich die Brennstoffzellen gegen teilweise schon lange bewährte Technologien behaupten, die während dieser Zeit immer weiter optimiert wurden. Eine erfolgreiche Positionierung in diesen Märkten kann nur gelingen, wenn die Vorteile der neuen Technologie nicht mit gravierenden Nachteilen verbunden ist, die der Kunde aufgrund seiner Gewohnheit nicht in Kauf nehmen möchte. Dies ist neben der noch relativ teuren Herstellung ein Grund, weshalb Brennstoffzellen bisher nur in Nischen oder als Prototypen zur Anwendung kommen.

Die genannten Einsatzgebiete unterscheiden sich teilweise deutlich in den Anforderungen an das Brennstoffzellensystem. Spielen bei einem BHKW Platzbedarf und Gewicht eine eher untergeordnete Rolle, so sind diese Faktoren bei mobilen Anwendungen in elektrischen Geräten, aber auch im Fahrzeugbereich mitentscheidend für die Einsatztauglichkeit. Auch die elektrischen Anforderungen unterscheiden sich nicht nur in der Größenordnung des Energiebedarfs, sondern auch in der Dynamik durch die Bedarfsänderung während der Nutzung. Hier stellt ein Automobil durch seine im normalen Straßenverkehr stark schwankenden Leistungsanforderungen eine der dynamischsten Anwendungen dar.

Diese dynamischen Anforderungen prägen zusammen mit den einzuhaltenden Sicherheitsvorschriften die notwendige thermische, mechanische und elektrochemische Belastbarkeit des Systems und stellen außerdem eine regelungstechnische Herausforderung dar. Dabei spielen aufgrund der Kosten die Zuverlässigkeit und die Lebensdauer des Brennstoffzellensystems eine wichtige Rolle und sind bereits bei der Auslegung und im Rahmen der Betriebsführung zu berücksichtigen.

Um das Zusammenspiel der einzelnen Komponenten eines PEMFC-Systems untereinander, aber auch als Teil des elektrischen Antriebsstrangs eines Brennstoffzellenfahrzeugs zu untersuchen, werden Simulationen des Antriebsstrangs mit Simulationsmodellen der einzelnen Komponenten durchgeführt, da Tests an Aufbauten zu zeitaufwändig und teuer wären. Für diese Untersuchungen wird im speziellen auch ein Modell des PEMFC-Stacks benötigt, der die Hauptkomponente des PEMFC-Systems darstellt. Damit die Simulationen wirklich die Tests an einem realen System ersetzen können, müssen die Modelle im betrachteten Betriebsbereich möglichst exakt das Verhalten der modellierten Komponente nachbilden. Zusätzlich sollten die Modelle einfach gehalten sein, damit die Simulation des Gesamtsystems schnell durchgeführt werden kann.

Über die Untersuchung des Antriebstrangaufbaus hinaus können solche Simulationsmodelle auch zum Entwurf geeigneter Regler und Betriebsführungsstrategien herangezogen werden. Kommen zur Regelung aufgrund der Komplexität der Systeme modellbasierte Verfahren zum Einsatz, die später auch im Fahrzeug implementiert werden müssen, so spielt der Aspekt der geringen Rechenkomplexität eine noch größere Rolle, da die Steuergeräte im Fahrzeug von der Leistungsfähigkeit weit hinter den heute gebräuchlichen Arbeitsplatzrechnern zurückliegen. In diesem Kapitel werden daher Ansätze auf Basis der Systemidentifikation zur Modellierung des PEM-Brennstoffzellenstacks, der im Energieversorgungssystem die komplexeste Komponente darstellt, vorgeschlagen, die das dynamische Verhalten des Stackes gut nachbilden und vom Rechenaufwand dennoch relativ einfach sind.

Ziel der in diesem Abschnitt vorgestellten Modelle ist die Nachbildung der mittleren Zellspannung, die weiteren Ausgangsgrößen (vgl. Abschnitt 4.4) werden nicht betrachtet. Zu Beginn wird im Abschnitt 5.1 ein kurzer Überblick über die in der Literatur zu findenden Modelle gegeben. Die beiden im Rahmen dieser Arbeit untersuchten Modellansätze, ein Spezialfall eines Uryson-Modells und ein lineares Zustandsraummodell, werden in den Abschnitten 5.2 und 5.3 beschrieben. Dort werden auch jeweils die zur Identifikation verwendeten Datensätze und die erzielten Ergebnisse vorgestellt. Den Abschluss des Kapitels bildet eine kurze Zusammenfassung im Abschnitt 5.4.

Die Parameter der vorgestellten Modelle sind aus Gründen der Übersichtlichkeit im Anhang B zusammengefasst.

5.1 Existierende Ansätze für PEMFC-Stack-Modelle

In der Literatur existieren eine Vielzahl verschiedener PEMFC-Modelle, die auf sehr unterschiedlichen Ansätzen beruhen. Mit Abstand die größte Gruppe stellen Modelle dar, die detailliert die Vorgänge in der Brennstoffzelle nachzubilden versuchen. Neben physikalischen Gesetzmäßigkeiten, die bei orts aufgelösten Modellen zu partiellen Differenzialgleichungen führen, wird dabei auch auf empirische Gleichungen zurückgegriffen, die die beobachteten Effekte gut beschreiben. Viele dieser Modelle, deren betrachteter Bereich zwischen der Zell- und der atomaren Ebene liegt, beschränken sich auf einzelne Teilbereiche der Vorgänge in der Zelle oder beschreiben nur das statische Verhalten der PEMFC. Eine Vielzahl dieser Modelle ist nicht mit Messdaten validiert, was auch an der Zielsetzung dieser Modelle liegt. Sie dienen in der Regel dazu, tieferes Verständnis über die in der Zelle ablaufenden Vorgänge und den Einfluss verschiedener Parameter wie den Materialeigenschaften oder der Zellgeometrie auf diese Vorgänge zu gewinnen, um daraus Rückschlüsse für die Entwicklung ziehen zu können. Diese Art von Modellen sind weder für eine schnelle Simulation noch für modellbasierte Regel- und Diagnoseverfahren geeignet, weshalb sie nicht weiter betrachtet werden. Ein ausführlicherer Überblick über diese Art der PEMFC-Modellformen kann beispielsweise [Nie09] und den darin referenzierten Quellen entnommen werden.

Physikalische Modelle mit der Zielsetzung einer sehr schnellen Simulation, beispielsweise für eine Regelung oder Diagnose, sind erst in jüngerer Zeit häufiger in der Literatur zu finden. Dies ist auf die reifer werdenden Stacks und die stärkeren Bestrebungen nach technisch zuverlässigem Einsatz der Brennstoffzellensysteme zurückzuführen. Viele dieser Modelle gehen von einer Modellstruktur aus physikalischen Überlegungen, beispielsweise einem elektrischen Ersatzschaltbild einer Zelle, aus. Deren Parameter werden dann durch geeignete Identifikationsverfahren ermittelt. Eine hierzu häufig genutzte Methode ist die Impedanzspektroskopie (siehe z. B. [BTSM04, Sch06, Dan09]). In [Nie09] werden die Parameter aus Messdaten des Stacks im Zeitbereich mittels numerischer Optimierung eines quadratischen Gütemaßes gewonnen.

Rein identifikationsbasierte Modelle hingegen sind sehr selten zu finden. In [JHF⁺05] wird ein KNN zur Modellierung des statischen Verhaltens eines PEMFC-Stacks unter Berücksichtigung der Alterung vorgeschlagen. Allerdings werden dort Polarisationskurven modelliert, die in einem festen Betriebspunkt der weiteren Eingangsgrößen ermittelt wurden. In [SAM⁺01a, SAM⁺01b] wird die statistische CVA zur Modellierung des dynamischen Verhaltens einer DMFC herangezogen und die Übertragbarkeit eines solchen Modells auf kleinere und größere Stacks untersucht. Allerdings wird

dort nur ein SISO-Modell mit der Stromdichte als Eingangsgröße und der Spannung als Ausgangsgröße betrachtet.

In [MSSH08, MASH09, MAP⁺09] wird der in dieser Arbeit beschriebene Ansatz des Uryson-Modells weiterentwickelt. Dort wird nur die Variante mit statischem Kennfeld für die stationären Betriebspunkte und Übertragungsfunktionen für die dynamische Abweichungen von diesen Punkten betrachtet. Die Erweiterung besteht neben der Untersuchung weiterer Größen für den dynamischen Anteil hauptsächlich in der Verwendung vom Betriebspunkt abhängiger Koeffizienten in den Übertragungsfunktionen, wodurch in der Summe ein nichtlineares dynamisches Teilmodell entsteht. Zusätzlich wird dort die Möglichkeit einer effizienten Versuchsplanung zur Gewinnung der Identifikationsdaten für dieses Modell beschrieben.

5.2 Uryson-Modell

Inspiriert durch ein einfaches SISO-Modell für eine SOFC [HWK⁺04, HWK⁺06] wurde ein Modellansatz gewählt, bei dem ein statischer Anteil parallel zu einem dynamischen Anteil geschaltet wird. Die Summe der Ausgänge dieser beiden Teilsysteme ergibt den Ausgang des Gesamtmodells. Aus Sicht der Systemidentifikation stellt dies einen Grey-Box-Ansatz dar, da der statische Block die stationären Betriebszustände repräsentiert und der dynamische Block die Abweichung von diesen stationären Punkten nach Änderungen in einer oder mehreren Eingangsgrößen beschreibt. Damit muss der Ausgang des dynamischen Teilsystems nach einer Anregung mit der Zeit gegen null streben.

Diese Struktur kann als Spezialfall eines Uryson-Modells nach der Definition 2.23 aufgefasst werden. Dabei stellt im ersten Zweig, dem dynamischen Teilsystem, die statische Abbildung die Ausblendung der nicht genutzten Eingangsgrößen für diesen Teil dar, die weiteren Eingangsgrößen werden nicht verändert. Im zweiten Zweig ist die Übertragungsmatrix eine Einheitsmatrix, woraus die rein statische Abbildung resultiert.

Die Modellierung der beiden Teilmodelle kann modular erfolgen. Der dynamische Teil wurde als linear angenommen, wodurch sich die Identifikation erheblich vereinfacht. Bei der Realisierung dieses Modells müssen nicht alle Eingangsgrößen des Stacks auch Eingänge des dynamischen Teilsystems sein. Beim PEMFC-Stack sind, in Abhängigkeit des Systemaufbaus, nicht alle Eingangsgrößen dynamisch schnell veränderlich, andere haben sehr direkten und praktisch keinen verzögerten Einfluss auf die mittlere Zellspannung. Es ist zu erwarten, dass der Einfluss solcher Eingangsgrößen durch den statischen Anteil bereits gut abgebildet wird, sodass diese nicht in das dynamische Teilmodell mit einfließen.

Größe	min.	max.	konstant
Stromdichte in A/cm ²	0.2	1.0	-
Stöchiometrie Anode	-	-	2
Stöchiometrie Kathode	1.8	2.5	-
Betriebsdruck in bar	1.5	3	-
Wasserstoffkonzentration im Anodengas in %	-	-	100
relative Feuchte der Gase in %	50	100	-
Stacktemperatur in °C	-	-	75

Tabelle 5.1: Untersucher Betriebsbereich für das Uryson-Modell

5.2.1 Datensätze

Für die Untersuchungen wurden einige den Betriebsbereich der PEM-Brennstoffzelle einschränkende Annahmen gemacht, um den Messaufwand geringer zu halten. So wurden die relativen Feuchten der Gase und der Gasdruck auf Kathoden- und Anodenseite identisch vorgegeben. Außerdem wurden die Stöchiometrie des Wasserstoffs, der Volumenstrom des Kühlwassers sowie die Kühlwassertemperatur am Stackeintritt, welche als Stack-Temperatur angesehen wurde, konstant auf den Nominalwerten des Stackherstellers gehalten. Eine Stickstoffbeimischung fand nicht statt. Der untersuchte Betriebsbereich ist in der Tabelle 5.1 zusammengefasst.

Damit reduzieren sich die zu betrachtenden Eingänge des Stackmodells auf vier Größen. Der Druck stellt dabei eine Größe dar, die sehr direkten Einfluss auf die mittlere Zellspannung hat (siehe z. B. [MSSH08]), die dynamische Auswirkung ist im Vergleich zu der der Stromdichte vernachlässigbar. Der Grad der Befeuchtung der Gase andererseits ist nur sehr langsam veränderlich, solange er, wie in diesem Fall, über die Temperatur der Gase und den gewünschten Taupunkt im Befeuchter eingestellt wird. Daher werden diese beiden Größen nicht dynamisch betrachtet. Für diese Konfiguration ergibt sich insgesamt die in der Abbildung 5.1 dargestellte Struktur.

Um Repräsentationen der beiden Teilsysteme aus Messdaten identifizieren zu können, musste ein geeigneter Versuchsplan für Messungen an einem PEMFC-Stack mit vier Zellen beim Industriepartner erstellt werden. Für das nichtlineare Teilsystem wurde daher eine Rasterung der vier Eingangsgrößen im betrachteten Betriebsbereich vorgenommen. Da jede Kombination betrachtet werden muss, ist der Messaufwand bei feiner Rasterung nicht mehr zu bewältigen. Deshalb wurden für die drei Eingangsgrößen Druck, Befeuchtungsgrad und Sauerstoffstöchiometrie nur drei Rasterpunkte, nämlich das Minimum, das Maximum und die Mitte des betrachteten Betriebsbereichs gewählt. Für die Stromdichte j , die mit Abstand am meisten Einfluss auf die mittlere Zellspannung hat, wurden vier Rasterpunkte festgelegt, und

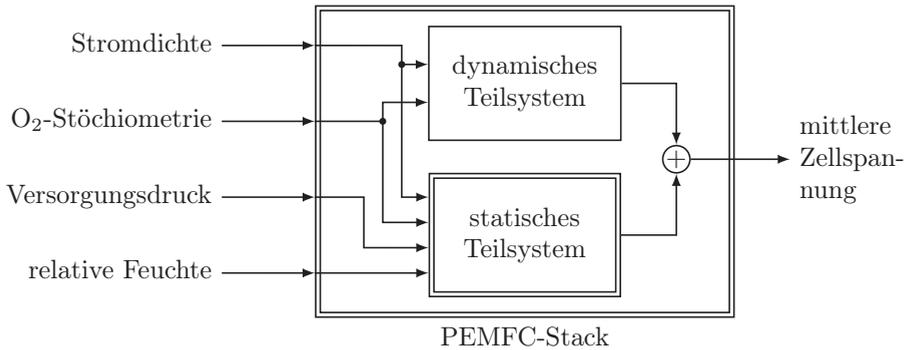


Abbildung 5.1: Struktur des Uryson-Modellansatzes für den PEMFC-Stack

zwar bei den Werten 0.2 A/cm^2 , 0.3 A/cm^2 , 0.7 A/cm^2 und 1.0 A/cm^2 . Somit ergeben sich insgesamt $3^3 \cdot 4 = 128$ stationäre Betriebspunkte des PEMFC-Stacks, die ausgemessen werden müssen. Zusätzlich werden noch Daten für den dynamischen Modellteil benötigt. Dafür sollte das System ebenfalls in möglichst vielen Betriebspunkten geeignet angeregt werden, damit die lineare Näherung der Dynamik möglichst alle Betriebsbereiche gleich gut abdeckt. Als Anregungssignale für die beiden Eingangsgrößen des dynamischen Teils wurden Sprünge gewählt.

Um die zur Verfügung stehende Zeit am Teststand möglichst effizient auszunutzen, wurden die dynamischen Messungen mit denen für die stationären Betriebspunkte kombiniert. Dazu wurde ein Profil der Stromdichte mit unterschiedlich hohen Sprüngen aus den deshalb nicht äquidistant gewählten Rasterpunkten der Stromdichte gebildet, das in der Abbildung 5.2 zu sehen ist. Für jede der 27 Kombinationen der übrigen drei Eingangsgrößen wurde dieses Profil abgefahren. Die Wartezeit von 15 min zwischen zwei Stromdichtesprüngen wurde als gerade noch ausreichend ermittelt, um nach einem Sprung den stationären Betrieb wenigstens näherungsweise zu erreichen. Diese stationären Werte tauchen jeweils mindestens zweimal pro Messung auf, sodass eine Mittelung möglich ist. Eine längere Wartezeit ließ sich aufgrund beschränkter Teststandskapazitäten nicht realisieren. Vor dem ersten Sprung wurde der neu eingestellte Betriebspunkt ebenfalls 15 min lang nicht geändert.

Zur Vermeidung von Stack-Schädigungen durch lokale Unterversorgung mit den Betriebsgasen wurden bei Stromdichtesprüngen nach oben eine Minute vor dem Sprung die Gasflüsse bereits auf die neuen Werte entsprechend der zukünftigen Stromdichte und der Stöchiometriewerte eingestellt. Ebenso wurden die Gasflüsse erst eine Minute nach einem Stromdichtesprung nach unten auf die niedrigeren Werte angepasst. Dadurch sind in den Messungen automatisch auch Sprünge der Sauerstoffstöchiometrie λ_{O_2} enthalten. Allerdings ist zu erwarten, dass sich die dynamischen Effekte von Stromdichte- und Stöchiometriesprüngen überlagern. Da gleichzeitig mit dem Luft-

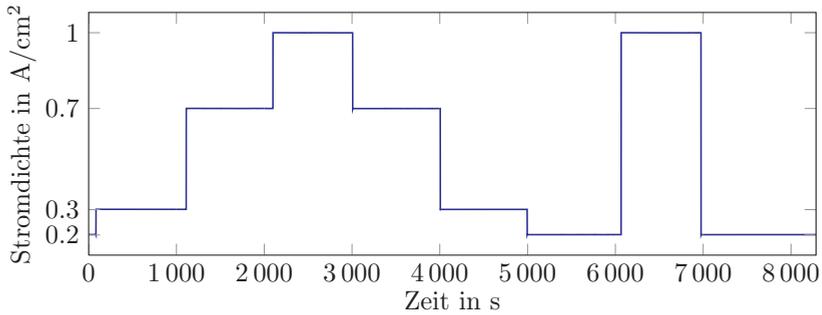


Abbildung 5.2: Stromdichteprofil für die Identifikation des Uryson-Modells

volumenstrom auch der Wasserstofffluss geändert wurde, dessen Stöchiometrie jedoch nicht ins Modell eingeht, werden eventuell daraus resultierende Veränderungen bei der Identifikation der Sauerstoffstöchiometrie zugeschrieben. Zusätzlich enthält der Datensatz zwei Messungen, die neben jeweils zwei Stromdichtesprüngen bei konstantem Gasfluss auch einen O_2 -Stöchiometriesprung mit einer Haltezeit von 15 min umfasst.

Gelegentlich traten während der Versuche kurze Abschaltungen auf, bei denen die Stromdichte den Wert von 0 A/cm^2 annahm. Diese Störungen wurden aus den Messdaten herausgeschnitten, da in diesen Punkten die Stöchiometrie nicht berechnet werden kann. Da ohne Stromfluss kein Gasverbrauch vorliegt, müsste somit die zur Berechnung der Stöchiometrie die zugeführte Menge durch null geteilt werden. Außerdem wurden vom Industriepartner einzelne der Stromdichtesprünge wiederholt, da in den ersten Datensätzen diese nicht oder nur fehlerhaft enthalten waren. Diese Wiederholungen wurden in die ursprünglichen Messreihen integriert, um so vollständige Datensätze mit möglichst wenig Störungen zu erhalten.

Beispielhaft ist in der Abbildung 5.3 eine der 27 Messungen abgebildet. Bei der Stöchiometrie des Sauerstoffs sind dort deutlich die Effekte der nicht synchron mit den Stromdichtesprüngen veränderten Gasflüsse zu sehen. Die Stöchiometrie nimmt kurzzeitig deutlich höhere Werte an, da die Gasflüsse wie oben beschrieben einige Zeit vor Stromdichtesprüngen nach oben bereits erhöht und erst einige Zeit nach Stromdichtesprüngen nach unten wieder verringert wurden. Die dabei auftretenden Spitzen in der Eingangsgröße O_2 -Stöchiometrie überschreiten teilweise um ein vielfaches den eigentlich betrachteten Betriebsbereich. Für solch hohe Werte liegen keine Messungen von stationären Betriebspunkten vor, weshalb in diesen Bereichen Abweichungen zwischen Simulation und Messung zu erwarten sind.

Bei der Analyse der Daten hat sich gezeigt, dass nicht alle Messungen so gut wie der in der Abbildung 5.3 gezeigte Versuch 18 verlaufen sind. Insbesondere beim mittleren Rasterpunkt für den Betriebsdruck sind Schwingungen im Druckregler aufgetreten,

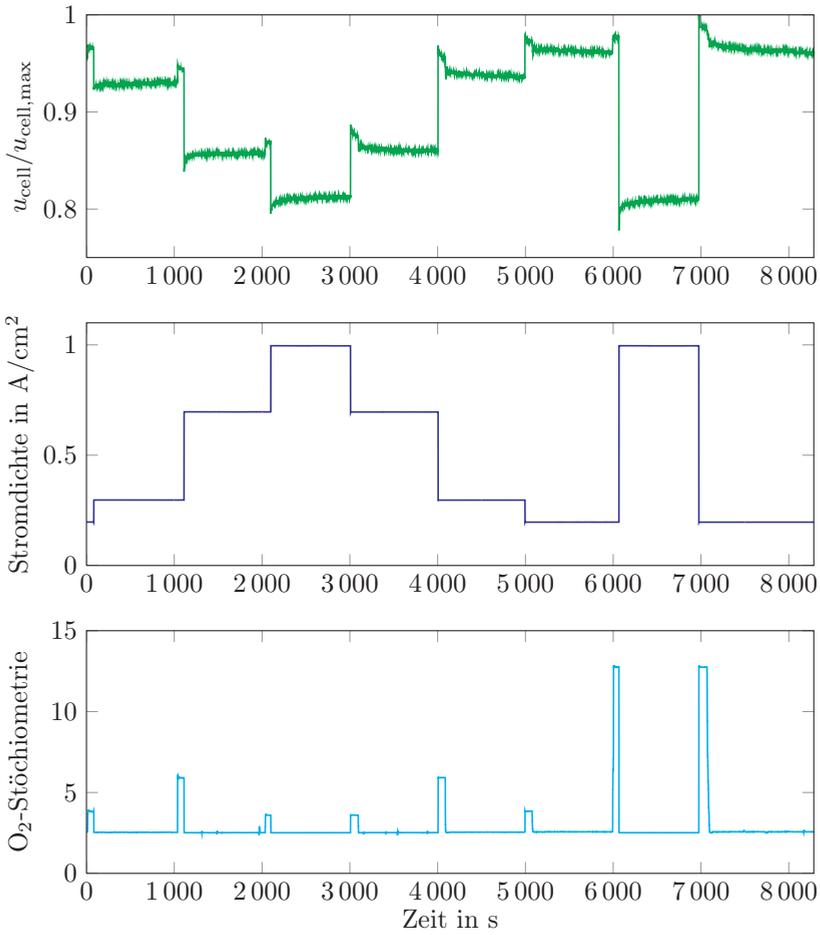


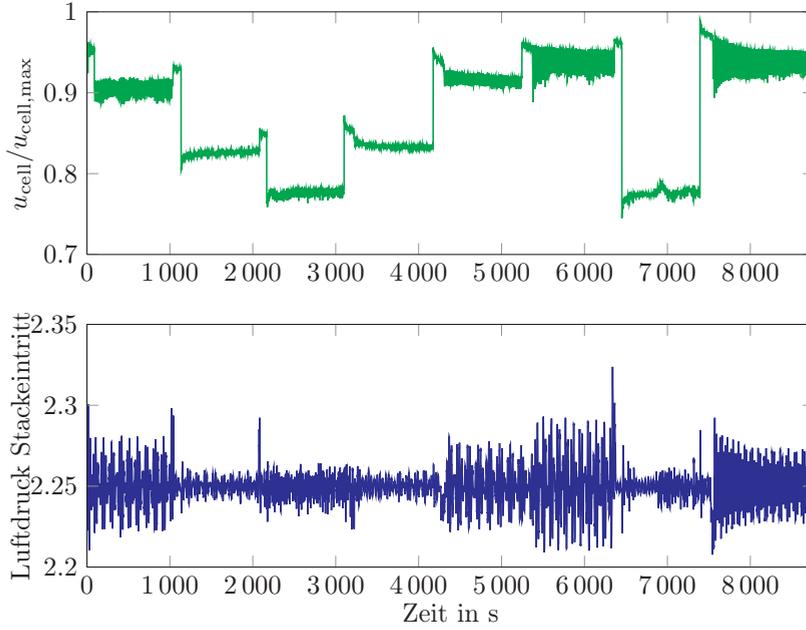
Abbildung 5.3: Beispiel einer Messung (Versuch 18)

die auch eine deutliche Auswirkung auf die gemessene mittlere Zellspannung haben (vgl. Abbildung 5.4(a)). Auch weitere kleinere Störungen, deren Ursache nicht bekannt ist, finden sich immer wieder in den Messdaten (vgl. Abbildung 5.4(b)). Zusätzlich zeigte die erste der vier Zellen eine schlechtere Leistung bei höheren Stromdichtewerten als die übrigen Zellen (vgl. Abbildung 5.5). Da der Stack bei Beginn der Versuche nicht neu war, wurde das auf eine leichte Degradation durch frühere Versuche zurückgeführt. Für die Ermittlung der mittleren Zellspannung wurden daher nur die Spannungen der zweiten bis vierten Zelle herangezogen.

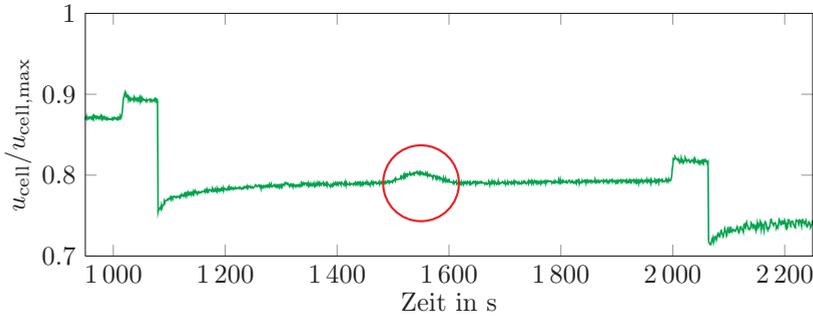
Die Abtastrate bei diesen Messungen betrug für alle Signale 1 Hz. Zusätzlich wurden die Stromdichte und die mittlere Zellspannung auch mit einer Abtastzeit von 0.2 ms aufgezeichnet, allerdings nur für jeweils eine Sekunde um die Stromdichtesprünge. Mit diesen Daten sollen bei der Identifikation sehr schnelle dynamische Vorgänge ermittelt werden. Für den statischen Modellteil spielen sie keine Rolle. Insgesamt enthält dieser Datensatz gut eine Million Messpunkte.

Um auch für die Sauerstoffstöchiometrie eine entsprechend gute Datenlage für den dynamischen Fall zu haben und um zusätzlich den Betriebsbereich bei der Sauerstoffstöchiometrie auch für die stationären Betriebspunkte nach oben zu vergrößern, wurden beim Industriepartner weitere Messungen mit einer Abtastzeit von 1 s durchgeführt. Aufgrund von Degradation im inzwischen für andere Testreihen verwendeten Stack und daraus resultierenden Problemen bei der Messdatenaufnahme konnten jedoch diese Daten nicht wie geplant verwendet werden. Da sich das Verhalten des PEMFC-Stacks durch die Degradation in den stationären Zuständen verändert hat, war eine Verwendung zur Erweiterung des Kennfelds nicht möglich.

Neben den Identifikationsdaten wurden vom Industriepartner auch Validationsdaten zur Verfügung gestellt. Diese wurden an einem PEMFC-Stack gleicher Bauart, jedoch mit 10 Zellen gemessen. Sie sollten neben der allgemeinen Validation auch zur Überprüfung der Skalierungsfähigkeit des Modellansatzes herangezogen werden. Die Validationsdaten bestehen aus einzelnen Stromdichtesprüngen, nach denen jeweils für 15 min die Antwort des Systems gemessen wurde. Neben acht bereits in den Identifikationsdaten erhaltenen Sprüngen mit gleichem Ausgangs- und Zielpunkt beinhalten die Validationsdaten 22 Sprünge im Betriebsbereich, die so in den Identifikationsdaten nicht enthalten sind. Sie wurden ebenfalls vollständig mit einer Abtastzeit von 1 s aufgezeichnet. Zusätzlich wurden Strom und Spannung auch für ca. 20 s um Sprünge mit einer Abtastzeit von 0.01 s gespeichert. Allerdings wurden bei den Versuchen stets die Gasflüsse entsprechend der gewählten Stöchiometriestufe für den höheren der beiden Stromdichtewerte eingestellt und konstant gehalten. Bei Stromdichtesprüngen nach oben hat dadurch nur der kleine Anteil der Daten vor dem Sprung einen höheren Stöchiometriewert als in den stationären Daten berücksichtigt. Bei Sprüngen der Stromdichte auf einen kleineren Wert tritt der Effekt jedoch bei einem Großteil der Datenpunkte dieser Va-



(a) Schwingungen des Druckreglers (Versuch 11)



(b) Störungen unbekannter Ursache (Versuch 19)

Abbildung 5.4: Beispiele für Störungen in den Messdaten der mittleren Zellspannung

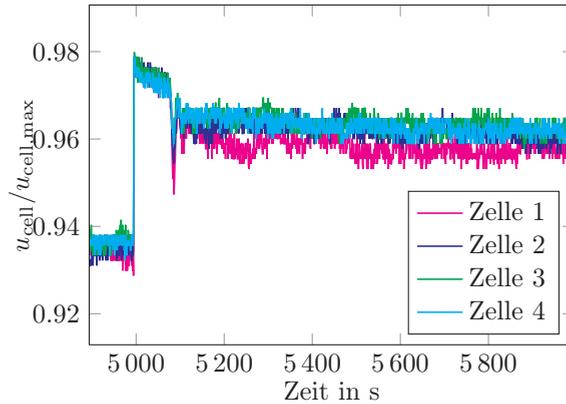


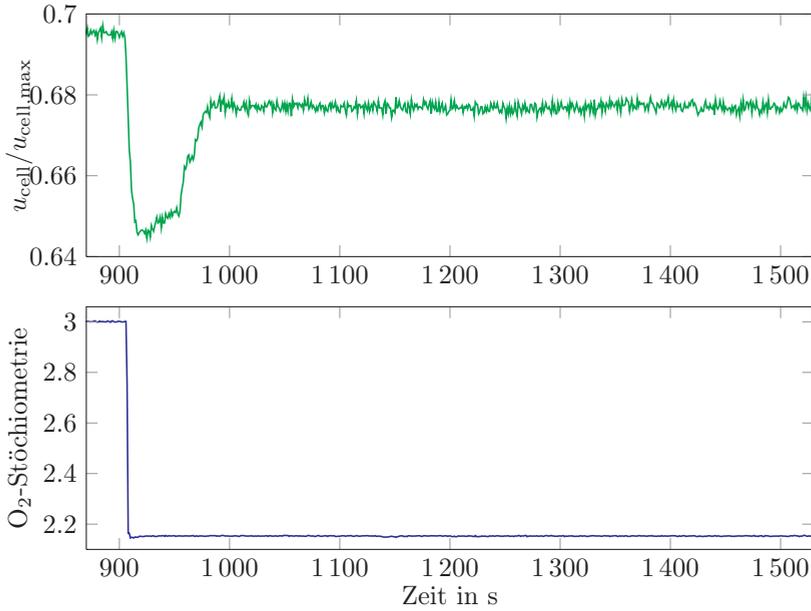
Abbildung 5.5: Ausschnitt aus dem Versuch 18 mit verringerter Leistung der ersten Zelle

lidationsmessung auf, was bei der Auswertung der Daten berücksichtigt werden muss.

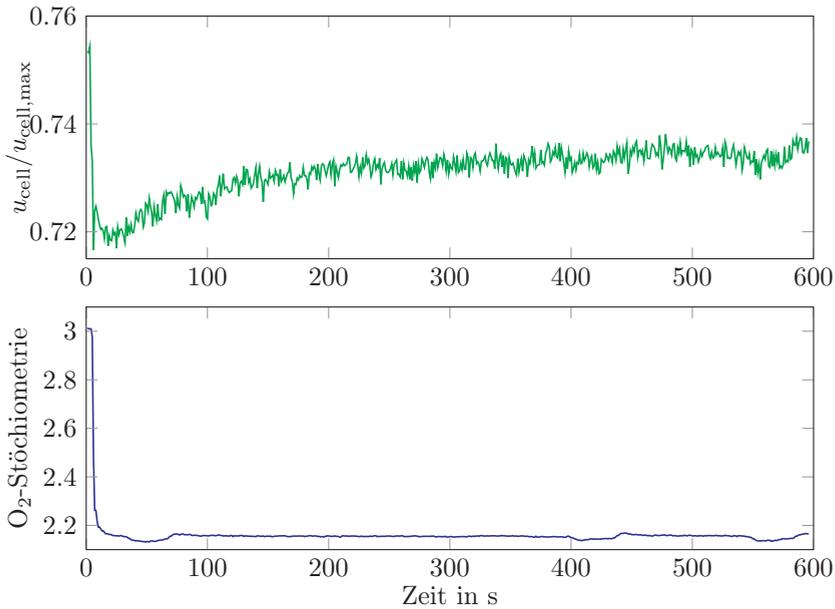
Nach derselben Vorgehensweise wurden zur Validation die Antworten auf zehn Sauerstoffstöchiometriesprünge aufgezeichnet. Vier dieser Sprünge sind identisch zu Sprüngen in den Identifikationsdaten, die gemessenen Antworten zeigen jedoch einen deutlich anderen Verlauf (vgl. Abbildung 5.6). Es ist zu vermuten, dass dies u. a. an der unterschiedlich fortgeschrittenen Degradation der beiden verwendeten Stacks liegt und das Verhalten in den Identifikationsdaten durch die oben beschriebene starke Degradation nicht mehr dem ursprünglichen Verhalten entspricht. Insbesondere der für die Identifikationsdatenaufnahme verwendete Stack wurde auch für verschiedene andere Messungen verwendet. Über diese vorangegangenen Versuche liegen jedoch keine weiteren Informationen vor, sodass hier keine weitere Interpretation im Hinblick auf die Ursachen der Degradation möglich ist.

Die im Folgenden Vorversuche genannten Messungen der Validationsdaten enthalten jeweils die Sprünge, die identisch bereits in den Identifikationsdaten enthalten sind. Als Hauptversuche werden die Messungen bezeichnet, die innerhalb des Betriebsbereichs liegen, so jedoch nicht in den Identifikationsdaten vorkommen. Die Tabelle 5.2 zeigt im Überblick die Zusammensetzung der Validationsdaten.

Im Gegensatz zu den Validationsdaten, die am Ende des Identifikationsprozesses direkt für einen Vergleich zwischen Modell und Messung verwendet werden können, müssen die Identifikationsdaten aufgrund der Verschmelzung von stationären und dynamischen Messungen in einem Messplan geeignet vorverarbeitet werden. Dabei müssen die Daten in stationäre Werte für das statische Teilsystem und dynamische Abweichungen für das dynamische Teilsystem getrennt werden. Zur Ermittlung der



(a) Sprung 2 aus Versuch 74 der zusätzlichen Identifikationsdaten für die Sauerstoffstöchiometrie



(b) Sprung 1 aus den Validationsdaten für die O_2 -Stöchiometrie

Abbildung 5.6: Vergleich der Antwort auf denselben Stöchiometriesprung in den Identifikations- und Validationsdaten

Name	Anzahl d. Versuche	Anzahl Datenpunkte		mit gültigem λ_{O_2}	
		$T_A = 1 \text{ s}$	$T_A = 0.01 \text{ s}$	$T_A = 1 \text{ s}$	$T_A = 0.01 \text{ s}$
Vorvers. j	8	4 766	17 420	50.8%	54.6%
Hauptvers. j	22	12 933	54 744	68.6%	68.2%
Vorvers. λ_{O_2}	4	2 413	–	49.2%	–
Hauptvers. λ_{O_2}	6	3 561	–	66.8%	–

Tabelle 5.2: Zusammensetzung des Validationsdatensatzes

stationären Werte wurden die Bereiche am Ende der Haltezeiten von 15 min vor dem nächsten Sprung betrachtet. Aus den gemessenen Signalwerten in diesen Bereichen, die aufgrund der oben beschriebenen Störungen in den Messdaten manuell ausgewählt wurden, wurden dann die Mittelwerte gebildet, um Fehler beispielsweise durch Messrauschen zu minimieren. Von allen stationären Werten wurden so zwei Schätzungen ermittelt, die nochmals durch Mittelwertbildung verrechnet wurden. Die mit dieser Methode gewonnenen stationären Werte bilden die Basis, um die dynamische Abweichung als Differenz zwischen den Messungen und den stationären Punkten zu berechnen.

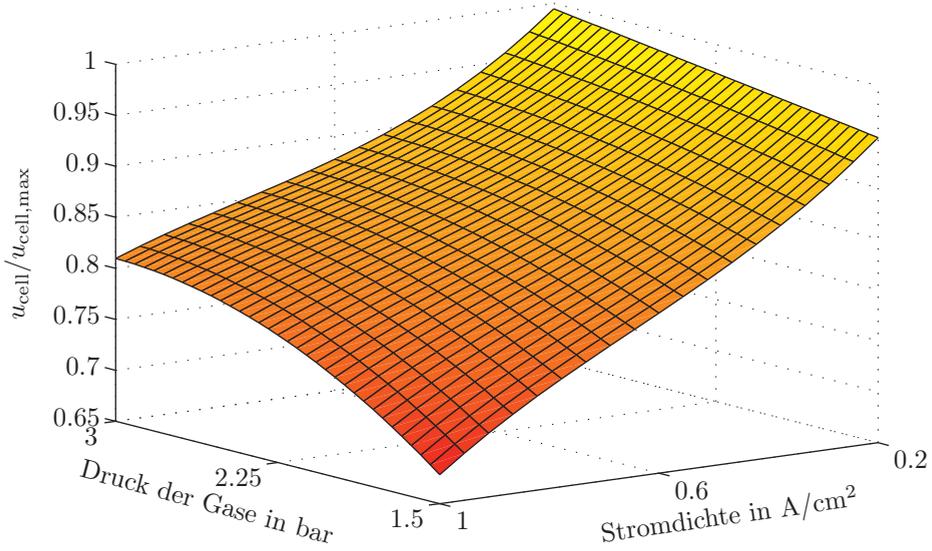
Zusätzlich wurden für die Sprungdaten mit hoher Abtastrate, die selbst nur die Stromdichte- und Spannungswerte enthalten, aus den vollständigen Messungen die zugehörigen Werte der weiteren Eingangsgrößen ermittelt, damit auch für diese die Differenz aus gemessener Spannung und stationären Werten gebildet werden kann.

5.2.2 Statisches Teilmodell

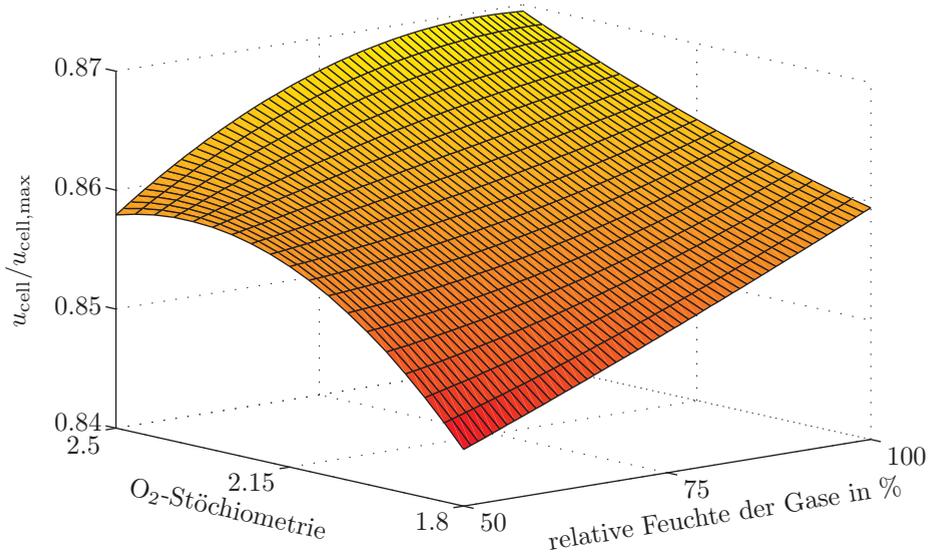
Mit den aus den gemeinsamen Messdaten extrahierten stationären Betriebspunkten können Modelle für den statischen Teil des Uryson-Modells gewonnen werden. Im Rahmen dieser Arbeit wurden ein durch Interpolation gewonnenes Kennfeld in Form einer Nachschlagetabelle sowie ein KNN in Form eines MLP identifiziert und verglichen.

Kennfeld

Das vierdimensionale Kennfeld wurde mittels einer kubischen Spline-Interpolation berechnet. Da sich ein vierdimensionales Kennfeld nicht grafisch darstellen lässt, sind in der Abbildung 5.7 beispielhaft zwei Schnitte durch das Kennfeld dargestellt. Im oberen Schnitt (Abbildung 5.7(a)), der unter anderem über der Stromdichte aufgetragen ist, lässt sich der typische Verlauf der Polarisationskurven gut erkennen, deren Form sich in diesem Fall mit der Feuchte verändert.



(a) Schnitt für den Maximalwert der O_2 -Stöchiometrie und die minimale relative Feuchte der Gase



(b) Schnitt für die Mittelwerte von Stromdichte und Druck

Abbildung 5.7: Zwei Schnitte durch das berechnete Kennfeld der stationären Punkte

Das Kennfeld wurde sehr fein gerastert als Nachschlagetabelle abgespeichert. Dadurch ist es möglich, zur Laufzeit anstelle einer Interpolation den nächsten in der Tabelle vorhandenen Punkt auszulesen, ohne dabei einen großen Fehler zu machen (Methode des nächsten Nachbarn). Die Berechnung der Interpolation, die mit wachsender Zahl an Dimensionen zeitaufwändiger wird, muss so also nicht während der Simulation, sondern nur einmal vorab durchgeführt werden. Dafür ist jedoch der Speicherbedarf der Tabelle aufgrund der feinen Rasterung sehr groß. In diesem Fall wurde der Abstand der Rasterpunkte bei allen Eingangsgrößen mit Ausnahme der Feuchte zu 0.05, bei der Feuchte zu 1 gewählt. Das so in Tabellenform abgespeicherte Kennfeld benötigt in MATLAB 5 761 560 Bytes an Speicherplatz. Verdoppelt man die Schrittweiten, so werden für dieses verkleinerte Kennfeld nur noch 239 616 Bytes benötigt.

Künstliches neuronales Netz

Alternativ zum Kennfeld wurde mit den Daten der stationären Punkte ein KNN trainiert. Als Struktur wurde ein MLP gewählt. Versuche haben gezeigt, dass sechs Neuronen mit der logistischen Funktion als Aktivierungsfunktion in der verdeckten Schicht und die Verwendung einer linearen Aktivierungsfunktion in der Ausgangsschicht die besten Ergebnisse bei der Approximation des Kennfelds liefern (siehe auch [BK07, Wai06]). Mit 29 467 Bytes in MATLAB benötigt das MLP nur 0.5% des Speicherplatzes des großen und 12.3% des verkleinerten Kennfelds, jedoch muss die Ausgangsgröße mittels der Gewichte und Schwellwerte für jeden Zeitpunkt in Abhängigkeit der Eingangsgrößen berechnet werden.

Vergleich der beiden Ansätze

Von der Güte unterscheiden sich die Ansätze kaum. Die mittlere quadratische Abweichung zwischen dem verkleinerten Kennfeld und dem neuronalen Netz liegt in der Größenordnung von 10^{-6} . Um den Rechenaufwand zu vergleichen, wurde die Simulation von zehn Datensätzen à 1 000 Datenpunkten jeweils 100 mal mit dem großen Kennfeld und dem MLP berechnet¹. Die mittlere Zeit für die Simulation eines Datensatzes betrug beim Kennfeld etwa 7.7 ms, beim MLP war sie mit etwa 9.7 ms um 2 ms langsamer. Beide Ansätze sind in der Simulation für den statischen Anteil bereits unter MATLAB drei Größenordnungen schneller als die Echtzeit, was auf ein schnelles Gesamtmodell hoffen lässt, das eventuell sogar für den Einsatz im Steuergerät eines Fahrzeugs geeignet ist.

¹Die Berechnungen wurden auf einer AMD ATHLON64 3200+ CPU unter WINDOWS XP 32bit und MATLAB 2006a durchgeführt.

5.2.3 Dynamisches Teilmodell

Für den dynamischen Modellanteil wurden zwei lineare Ansätze untersucht. Zum einen wurden jeweils getrennte zeitkontinuierliche Übertragungsfunktionen für die beiden Eingangsgrößen berechnet. Zum anderen wurden zeitdiskrete Zustandsraummodelle mit verschiedenen 4SID-Verfahren identifiziert. In beiden Fällen wurden die Daten zur Identifikation des dynamischen Teilmodells aus der Differenz zwischen dem gemessenen Ausgangssignal und dem simulierten Ausgangssignal des statischen Teilsystems simuliert. Als Beispiel sind in der Abbildung 5.8 die Identifikationsdaten des Versuchs 18 für das dynamische Teilmodell dargestellt. Deutlich zu erkennen sind etwa alle 1000 Sekunden Abweichungen nach oben im dynamischen Anteil der vollständigen Daten (Abbildung 5.8(a) unten) durch die hohen O_2 -Stöchiometriewerte, die in den stationären Werten nicht enthalten sind.

Übertragungsfunktionen

Zur Ermittlung der zeitkontinuierlichen Übertragungsfunktionen (vgl. auch Definition 2.10) wurde zunächst eine Analyse der Messdaten durchgeführt, um eine geeignete Struktur zu wählen. Da die dynamische Abweichung für größer werdende Zeiten gegen null geht, muss der Parameter b_0 zu null gewählt werden. Außerdem zeigen die Messungen zu Beginn einen Sprung, sodass ein sprungfähiges System, also ein System mit Durchgriff gewählt wurde. Der Zählergrad der Übertragungsfunktionen ist also gleich deren Nennergrad. Insgesamt haben die im Folgenden betrachteten Übertragungsfunktionen die Form

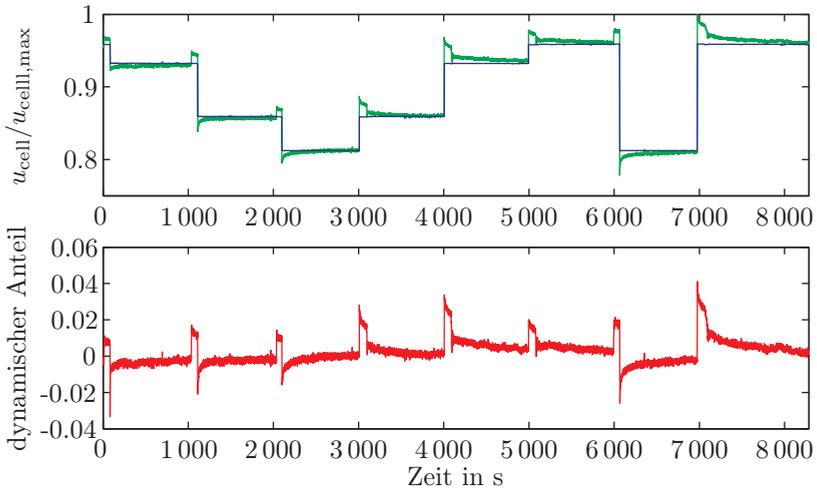
$$G(s) = \frac{b_n s^n + \dots + b_1 s}{a_n s^n + \dots + a_1 s + 1} \quad (5.1)$$

mit noch unbekannter Ordnung n und Parametern a_i und b_i . Diese Übertragungsfunktion kann durch Umformung auch in die Darstellung

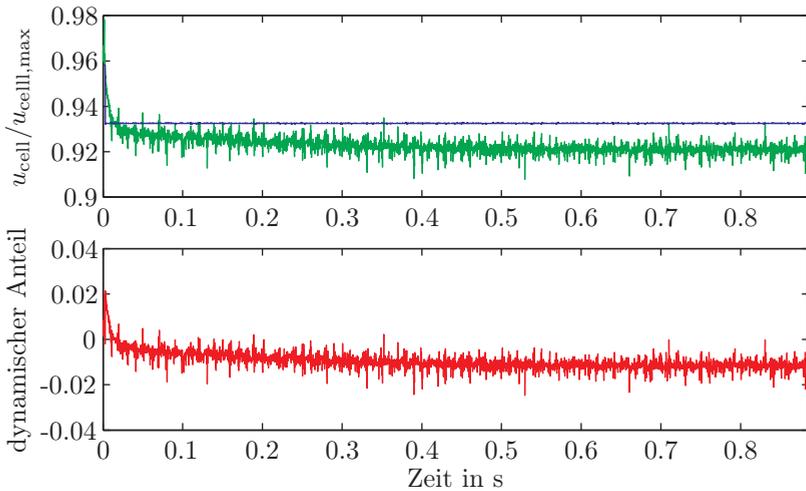
$$G(s) = k_0 + \frac{k_1}{T_1 s + 1} + \dots + \frac{k_n}{T_n s + 1} \quad (5.2)$$

umgeschrieben werden, also einer Parallelschaltung eines P-Glieds und n PT₁-Gliedern. Dabei gilt der Zusammenhang $k_0 = -k_1 - \dots - k_n$, da die Sprungantwort für $t \rightarrow \infty$ gegen null streben soll.

Zunächst wurden beide Eingangsgrößen getrennt betrachtet. Da die Messdaten für die Übertragungsfunktion der Sauerstoffstöchiometrie $G_{\lambda_{O_2}}(s)$ an einem bereits degradierten Stack ermittelt wurden und deutlich von den Messungen im Identifikationsdatensatz abweichen, konnten diese nicht zur Parameteridentifikation eingesetzt. Der Anteil an Stöchiometriesprüngen im Identifikationsdatensatz ist so gering, dass



(a) Dynamischer Anteil der vollständigen Messdaten



(b) Dynamischer Anteil der hoch aufgelösten Messdaten von Sprung 1

Abbildung 5.8: Dynamischer Anteil (rot) als Differenzsignal der Messdaten (grün) und der statischen Simulation mit dem interpolierten Kennfeld (blau) für Versuch 18

daran keine aussagekräftigen Untersuchungen für die Sauerstoffstöchiometrie ohne zusätzliche Nutzung der in den Stromsprüngen implizit enthaltenen Information möglich ist. Da das Verhalten bei den Messungen ohne Degradation ein deutlich erkennbaren dynamischen Verlauf aufweist (vgl. Abbildung 5.6(b)), der stark dem Verlauf eines PT_1 -Glieds ähnelt, wird im Folgenden neben einer rein statischen Betrachtung der Sauerstoffstöchiometrie eine Übertragungsfunktion erster Ordnung in die Untersuchungen mit einbezogen.

Für die Übertragungsfunktion der Stromdichte wurden Untersuchungen mit dem Identifikationsdatensatz durchgeführt. Die Analyse der Messdaten hat gezeigt, dass durch die sehr schnelle Dynamik, die in den hoch aufgelösten Messdaten zu sehen ist, und die Dynamik der vollständigen Messdaten zumindest ein System zweiter Ordnung angesetzt werden muss, da beide Signalanteile einen dynamischen Verlauf aufweisen (vgl. auch Abbildung 5.8). Um auch eventuelle Überlagerungen durch verschiedene Zeitkonstanten entdecken zu können, wurden zusätzlich Übertragungsfunktionen dritter und vierter Ordnung betrachtet. Die Parameter der Übertragungsfunktionen zweiter bis vierter Ordnung sollten mittels nichtlinearer LS-Schätzung bestimmt werden. Die Untersuchungen basieren auf den mit dem Kennfeld berechneten dynamischen Abweichungen, die für alle Datensätze, d. h. sowohl die mit einer Sekunde Abtastzeit als auch die hoch aufgelösten Daten der Sprünge, berechnet wurde. Viele nichtlineare LS-Schätzungen der Parameter mit unterschiedlichen Startwerten hätten aufgrund des großen Datensatzes sehr viel Rechenzeit in Anspruch genommen. Daher wurden zunächst nur anhand des Versuchs 13 die Parameter geschätzt. Der Versuch 13 wurde ausgewählt, da dieser etwa in der Mitte des betrachteten Betriebsbereichs durchgeführt wurde und keine Schwingungen des Druckreglers aufweist. Mit den Ergebnissen aus diesen Schätzungen als Startwerte wurden dann die Parameter mittels nichtlinearer LS-Schätzung über den gesamten Datensatz ermittelt. Bei der Übertragungsfunktion vierter Ordnung bereitete die Wahl geeigneter Startparameter bereits Probleme, da in vielen Fällen die Identifikation nicht zu einem sinnvollen Ergebnis führte. Dies deutet auf eine zu große Zahl an Freiheitsgraden bei der Identifikation hin, weshalb auch keine noch höheren Ordnungen untersucht wurden.

Wie bereits bei den Erläuterungen zur Abbildung 5.3 beschrieben, sind in den dynamischen Abweichungen auch Signalanteile enthalten, die auf den Fehler zwischen maximal im Kennfeld bzw. neuronalen Netz berücksichtigten O_2 -Stöchiometriewert von 2.6 und den tatsächlich auftretenden Werten bis über 13 zurückzuführen sind. Daher wurden zusätzlich Untersuchungen mit den Datenpunkten durchgeführt, deren Sauerstoffstöchiometriewert im Gültigkeitsbereich liegt oder diesen um nicht mehr als 0.1 übersteigt. Der Anteil der Datenpunkte des gesamten Datensatzes, die eine Stöchiometrie über 2.7 aufweisen, beträgt 39.8%. Dieser hohe Anteil kommt von den Messdaten mit hoher Auflösung, die aufgrund der niedrigen Abtastzeit einen

Ordnung von $G_j(s)$	gesamter Datensatz		Punkte mit gültigem λ_{O_2}	
	Mittelwert	Standardabw.	Mittelwert	Standardabw.
2	$0.15 \cdot 10^{-3}$	$13.04 \cdot 10^{-3}$	$1.63 \cdot 10^{-3}$	$14.77 \cdot 10^{-3}$
3	$0.13 \cdot 10^{-3}$	$12.96 \cdot 10^{-3}$	$1.63 \cdot 10^{-3}$	$14.63 \cdot 10^{-3}$
4	$0.13 \cdot 10^{-3}$	$12.90 \cdot 10^{-3}$	$1.63 \cdot 10^{-3}$	$14.57 \cdot 10^{-3}$

(a) Alle Datenpunkte im Gütemaß

Ordnung von $G_j(s)$	gesamter Datensatz		Punkte mit gültigem λ_{O_2}	
	Mittelwert	Standardabw.	Mittelwert	Standardabw.
2	$0.39 \cdot 10^{-3}$	$11.45 \cdot 10^{-3}$	$0.65 \cdot 10^{-3}$	$14.75 \cdot 10^{-3}$
3	$0.38 \cdot 10^{-3}$	$11.33 \cdot 10^{-3}$	$0.63 \cdot 10^{-3}$	$14.60 \cdot 10^{-3}$
4	$0.38 \cdot 10^{-3}$	$11.33 \cdot 10^{-3}$	$0.63 \cdot 10^{-3}$	$14.59 \cdot 10^{-3}$

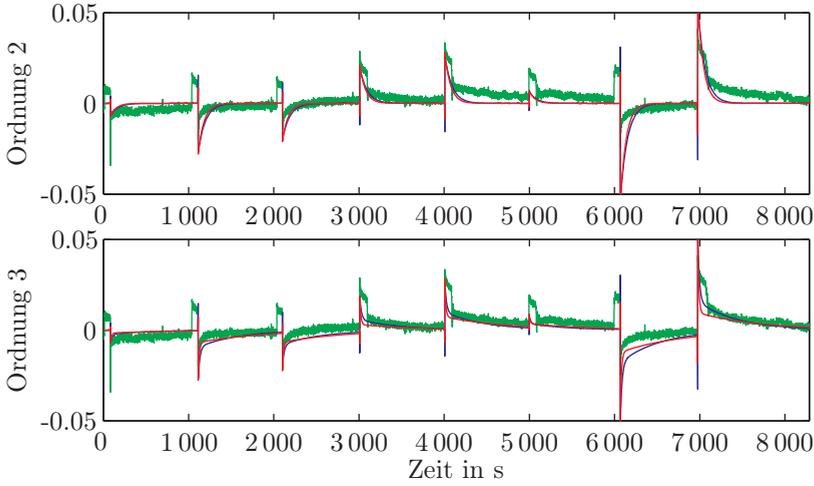
(b) Nur Datenpunkte mit gültiger O_2 -Stöchiometrie im Gütemaß

Tabelle 5.3: Statistische Daten des Simulationsfehlers für den Identifikationsdatensatz bei Übertragungsfunktionen unterschiedlicher Ordnung für die Stromdichte j

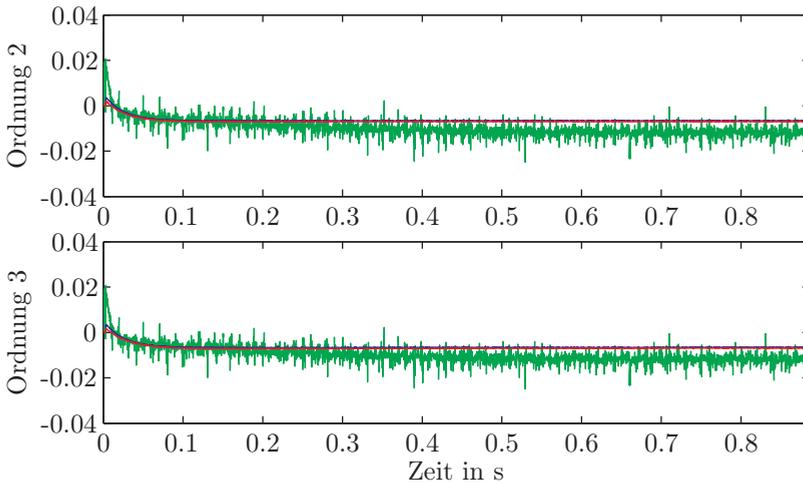
relativ großen Anteil (79.1%) am Datensatz haben und genau um die Stromdichtespüße aufgenommen wurden, wo der Effekt der hohen Stöchiometriewerte auftritt. Neben einer reinen Bewertung der Ergebnisse in diesen Punkten wurden in einem weiteren Schritt nur diese Punkte bei der Identifikation im Gütemaß bewertet. Die statistischen Daten der Simulationsergebnisse dieser verschiedenen Modelle sind in der Tabelle 5.3 zu finden.

Analysiert man die Ergebnisse, so sieht man an den statistischen Daten bereits deutlich, dass die Punkte außerhalb des gültigen Bereichs des statischen Anteils die Simulationsergebnisse maßgeblich beeinflussen. Werden diese Punkte nicht im Gütemaß berücksichtigt, so verbessert sich das Ergebnis in den Punkten mit gültiger Stöchiometrie deutlich.

Als Ergebnis dieser Untersuchungen der Eingangsgröße Stromdichte lässt sich zusammenfassen, dass die Übertragungsfunktionen zweiter Ordnung bereits gute Ergebnisse liefern. Beispielhaft sind in der Abbildung 5.9 die Simulationsergebnisse zweiter und dritter Ordnung für den dynamischen Anteil des Versuchs 18 abgebildet. Bei der Verwendung einer Übertragungsfunktion dritter Ordnung kann noch eine leichte Verbesserung erzielt werden, höhere Ordnungen bringen jedoch keine weiteren Vorteile. Die Beschränkung des Gütemaßes auf Punkte mit gültiger Stöchiometrie bringt eine leichte Verbesserung, da nicht mehr versucht wird, die fehlenden Anteile des Kennfelds auszugleichen.



(a) Dynamischer Anteil der vollständigen Messdaten



(b) Dynamischer Anteil der hoch aufgelösten Messdaten von Sprung 1

Abbildung 5.9: Simulationsergebnisse mit Übertragungsfunktionen verschiedener Ordnung für die Stromdichte für den dynamischen Anteil der Messdaten des Versuchs 18 (grün) mit allen Punkten im Gütemaß (blau) und nur den Punkten mit gültigem λ_{O_2} im Gütemaß (rot) bei Identifikation über den kompletten Datensatz, wobei die Verläufe der Modelle in weiten Bereichen nahezu übereinstimmen (nur rot sichtbar)

Ordnung von $G_j(s)$	gesamter Datensatz		Punkte mit gültigem λ_{O_2}	
	Mittelwert	Standardabw.	Mittelwert	Standardabw.
1	$-2.68 \cdot 10^{-3}$	$5.94 \cdot 10^{-3}$	$-2.00 \cdot 10^{-3}$	$5.46 \cdot 10^{-3}$
2	$-2.69 \cdot 10^{-3}$	$5.92 \cdot 10^{-3}$	$-2.00 \cdot 10^{-3}$	$5.44 \cdot 10^{-3}$
3	$-2.75 \cdot 10^{-3}$	$5.77 \cdot 10^{-3}$	$-2.10 \cdot 10^{-3}$	$5.34 \cdot 10^{-3}$

(a) Alle Datenpunkte im Gütemaß

Ordnung von $G_j(s)$	gesamter Datensatz		Punkte mit gültigem λ_{O_2}	
	Mittelwert	Standardabw.	Mittelwert	Standardabw.
1	$-1.67 \cdot 10^{-3}$	$5.04 \cdot 10^{-3}$	$-1.88 \cdot 10^{-3}$	$5.30 \cdot 10^{-3}$
2	$-1.68 \cdot 10^{-3}$	$5.03 \cdot 10^{-3}$	$-1.88 \cdot 10^{-3}$	$5.29 \cdot 10^{-3}$
3	$-1.25 \cdot 10^{-3}$	$6.43 \cdot 10^{-3}$	$-1.41 \cdot 10^{-3}$	$6.79 \cdot 10^{-3}$

(b) Nur Datenpunkte mit gültiger O_2 -Stöchiometrie im Gütemaß

Tabelle 5.4: Statistische Daten des Simulationsfehlers bei Übertragungsfunktionen unterschiedlicher Ordnung für die Stromdichte j nur für die Datensätze mit $T_A = 1$ s des Identifikationsdatensatzes

Nicht immer sind die ganz schnellen dynamischen Vorgänge, die in den hoch aufgelösten Daten zu sehen sind, bei der Simulation von Interesse. Daher wurde zusätzlich untersucht, wie die Ergebnisse bei der Identifikation von Übertragungsfunktionen alleine auf Basis der vollständigen Datensätze mit einer Abtastzeit von $T_A = 1$ s ausfallen. In diesem Fall hat der Identifikationsdatensatz nur 228 443 Messpunkte, wovon nur 10.7% einen zu hohen O_2 -Stöchiometriewert aufweisen. Da hier der sehr schnelle dynamische Anteil der hoch aufgelösten Daten wegfällt, wurden Übertragungsfunktionen erster bis dritter Ordnung untersucht. Die statistischen Ergebnisse finden sich in der Tabelle 5.4.

Ebenfalls am Versuch 18 sind die Ergebnisse erster und zweiter Ordnung in der Abbildung 5.10 dargestellt. Wie schon anhand der statistischen Daten zu erwarten ist, unterscheiden sich die Ergebnisse zwischen erster und zweiter Ordnung praktisch nicht, womit die Verwendung zweiter Ordnung nicht gerechtfertigt ist. Allerdings spielt im Vergleich zum vollständigen Datensatz die Beschränkung des Gütemaßes auf Punkte mit gültigem λ_{O_2} eine deutlich größere Rolle. Durch sie werden die guten Ergebnisse nochmals verbessert.

Es ist bereits an diesen Untersuchungen ersichtlich, dass mit den Übertragungsfunktionen ein gutes Ergebnis des Modells zu erwarten ist. So verschwindet bereits bei alleiniger Verwendung einer Übertragungsfunktion für die Stromdichte der Simulationsfehler nahezu. Die Standardabweichung bleibt unter einem Prozent des niedrigsten im Betrieb vorkommenden mittleren Zellspannungswertes. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen dienen als Basis für die gemeinsame Identifikation je-

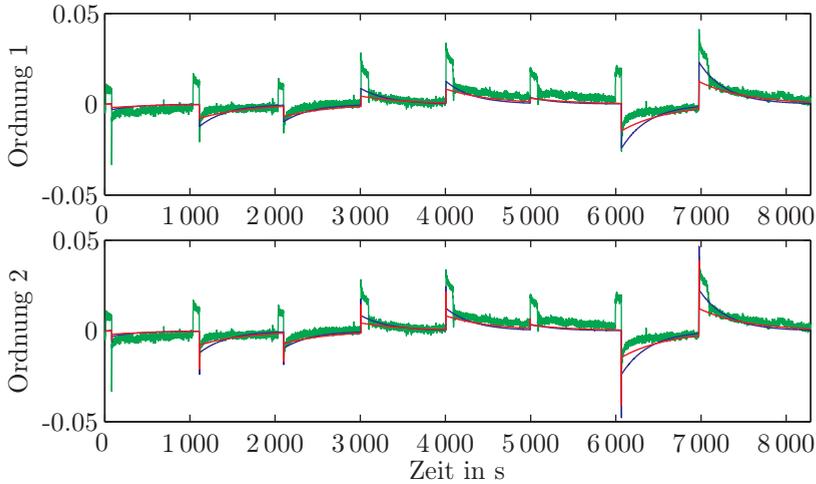


Abbildung 5.10: Simulationsergebnisse der Übertragungsfunktionen verschiedener Ordnung für die Stromdichte für den dynamischen Anteil der Messdaten des Versuchs 18 (grün) mit allen Punkten im Gütemaß (blau) und nur den Punkten mit gültigem λ_{O_2} im Gütemaß (rot) bei der Identifikation nur mit den Daten mit $T_A = 1$ s, wobei die Verläufe der Modelle in weiten Bereichen nahezu übereinstimmen (nur rot sichtbar)

Ordnung von $G_j(s)$	alle Datenpunkte		Punkte mit gültigem λ_{O_2}	
	Mittelwert	Standardabw.	Mittelwert	Standardabw.
2	$0.05 \cdot 10^{-3}$	$12.22 \cdot 10^{-3}$	$1.05 \cdot 10^{-3}$	$14.08 \cdot 10^{-3}$
3	$0.02 \cdot 10^{-3}$	$12.10 \cdot 10^{-3}$	$0.99 \cdot 10^{-3}$	$13.95 \cdot 10^{-3}$

(a) Identifikation mit dem kompletten Datensatz

Ordnung von $G_j(s)$	alle Datenpunkte		Punkte mit gültigem λ_{O_2}	
	Mittelwert	Standardabw.	Mittelwert	Standardabw.
1	$-2.17 \cdot 10^{-3}$	$5.59 \cdot 10^{-3}$	$-1.98 \cdot 10^{-3}$	$5.29 \cdot 10^{-3}$
2	$-2.67 \cdot 10^{-3}$	$5.56 \cdot 10^{-3}$	$-2.38 \cdot 10^{-3}$	$5.37 \cdot 10^{-3}$

(b) Identifikation mit den Daten mit $T_A = 1$ s

Tabelle 5.5: Statistische Daten des Simulationsfehlers bei unterschiedlichen Ordnungen der Übertragungsfunktion für die Stromdichte j und erster Ordnung der Übertragungsfunktion für die O_2 -Stöchiometrie λ_{O_2}

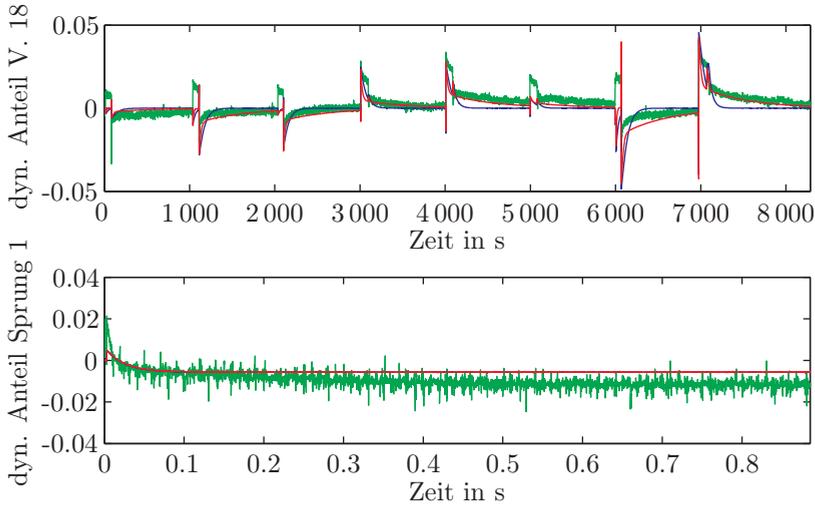
weils einer Übertragungsfunktion für Stromdichte und Sauerstoffstöchiometrie auf Basis des Identifikationsdatensatzes. Die Ordnung der Übertragungsfunktion für die O_2 -Stöchiometrie wurde dabei zu eins gewählt. Der Fall einer rein statischen Betrachtung dieser Eingangsgröße entspricht gerade den oben beschriebenen Untersuchungen für die Stromdichte.

Bei der gemeinsamen Identifikation wurden im Fall aller Messdaten für die Stromdichte Übertragungsfunktionen zweiter und dritter Ordnung weiter untersucht, für den Datensatz ohne hoch aufgelöste Daten Übertragungsfunktionen erster und zweiter Ordnung. Eine Beschränkung des Gütemaßes auf die Datenpunkte mit gültigem λ_{O_2} fand nicht statt, da diese Bereiche genau die dynamische Antwort des PEMFC-Stacks auf Sprünge in der O_2 -Stöchiometrie enthalten. Ohne diese Bereiche wäre somit die Übertragungsfunktion für diese Eingangsgröße nicht sinnvoll identifizierbar. Die statistischen Kenndaten der so gewonnenen Ergebnisse sind für die Identifikation mit dem kompletten Datensatz in der Tabelle 5.5(a) und für die Identifikation ohne die hoch aufgelösten Daten in der Tabelle 5.5(b) zusammengefasst.

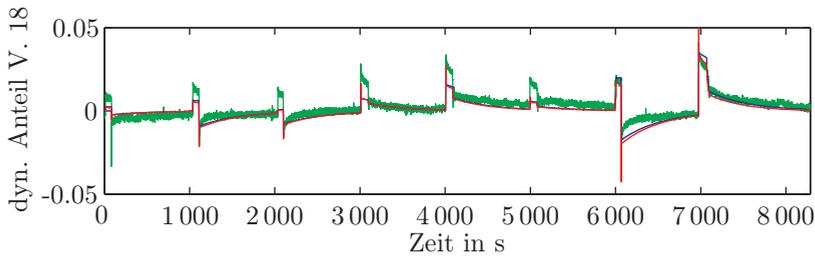
Vergleicht man die Ergebnisse für den kompletten Datensatz mit den Ergebnissen mit reiner Stromdichte-Dynamik aus der Tabelle 5.3, so sieht man, dass durch die Hinzunahme der Übertragungsfunktion für die Sauerstoffstöchiometrie ähnliche Verbesserungen erreicht werden wie durch die Beschränkung auf Punkte mit gültigem λ_{O_2} im Gütemaß. Am Beispiel von Versuch 18 sind in der Abbildung 5.11 die verschiedenen Simulationsverläufe dargestellt. Daran wird deutlich, dass ähnlich wie bei der Beschränkung des Gütemaßes die Verläufe nun in den Bereichen gültiger Stöchiometriewerte besser mit der Messung übereinstimmen. Die stationären Abweichungen durch die fehlenden Kennfelddaten können jedoch nicht vollständig durch die zusätzliche Übertragungsfunktion ausgeglichen werden. Wie schon bei den vorigen Untersuchungen ist auch hier bei der Verwendung des kompletten Datensatzes trotz einer relativ geringen Verbesserung in den statistischen Daten die qualitative Nachbildung der Messdaten bei einer Übertragungsfunktion dritter Ordnung besser als bei der zweiten Ordnung.

Bei der Beschränkung auf die Daten mit $T_A = 1$ s ist im Gegensatz zur reinen Betrachtung der Stromdichte der Unterschied zwischen erster und zweiter Ordnung praktisch vernachlässigbar. Zusätzlich werden hier auch die Bereiche der reinen Anregung durch Stöchiometriespünge am Besten von allen bisher untersuchten Möglichkeiten nachgebildet, wenngleich die Fehler im stationären Kennfeld nicht immer vollständig ausgeglichen werden können.

Alle bisher beschriebenen Versuche wurden exemplarisch mit den stationären Daten des interpolierten Kennfelds durchgeführt. Die prinzipiellen Aussagen gelten ebenso für die Verwendung des MLP als statische Komponente zur Berechnung der dynamischen Abweichung. Ein Vergleich der Ergebnisse mit Kennfeld und neuronalem



(a) Identifikation mit dem kompletten Datensatz für die Ordnungen zwei (blau) und drei (rot)



(b) Identifikation mit den Daten mit $T_A = 1$ s für die Ordnungen eins (blau) und zwei (rot)

Abbildung 5.11: Simulationsergebnisse mit Übertragungsfunktionen verschiedener Ordnung für die Stromdichte und einer Übertragungsfunktion erster Ordnung für die O_2 -Stöchiometrie für den dynamischen Anteil der Messdaten des Versuchs 18 (grün), wobei die Verläufe der Modelle in weiten Bereichen nahezu übereinstimmen (nur rot sichtbar)

Netz erfolgt im Abschnitt 5.2.4, zuvor wird noch die alternative Modellierungsform des dynamischen Teilmodells durch ein lineares zeitdiskretes Zustandsraummodell beschrieben.

Zustandsraummodell

Zur Identifikation eines Zustandsraummodells für die beiden Eingangsgrößen des dynamischen Anteils wurden drei verschiedene 4SID-Varianten eingesetzt. Zum einen wurden die beiden kommerziellen Produkte, die Funktion `n4sid` aus der SYSTEM IDENTIFICATION TOOLBOX in MATLAB sowie `ADAPTx`, verwendet. Daneben kam eine selbst implementierte Version des generischen Algorithmus der geometrischen 4SID-Verfahren zum Einsatz, die zusätzlich für den Einsatz mit mehreren Datensätzen nach [DFPB96] erweitert wurde (vgl. auch [Nic07]). Dabei werden für jedes Fragment die Block-Hankel-Matrizen einzeln aufgestellt und nebeneinander zu den Gesamtdatenmatrizen zusammengefügt, die im 4SID-Algorithmus dann verwendet werden. Die Implementierung wurde gegenüber der Originalbeschreibung in [OM96] numerisch auf den dynamischen Anteil des vorliegenden Identifikationsdatensatzes optimiert, insbesondere hinsichtlich der auftretenden Matrixinversionen.

Da für die 4SID-Methoden äquidistant abgetastete Signale benötigt werden, wurden nur die Messdaten mit $T_A = 1$ s verwendet, die Abtastzeit des geschätzten zeitdiskreten Zustandsraummodells beträgt also ebenfalls $T_A = 1$ s. Aus diesem Grund konnten auch die Datenpunkte mit zu hohen O_2 -Stöchiometriewerten nicht aus dem Datensatz entfernt oder wie bei den Übertragungsfunktionen bei der Gewichtung ausgelassen werden. Die Gesamtzahl der Datenpunkte dieses Datensatzes beträgt $N = 228\,443$.

Zunächst werden die Vorgehensweise mit der selbst implementierten Variante des generischen Algorithmus und die damit erzielten Ergebnisse präsentiert. Der Parameter i der Block-Hankel-Datenmatrizen und damit die höchst mögliche zu identifizierende Ordnung wurde hier zu $i = 15$ gewählt, was auf Basis der Ergebnisse der Übertragungsfunktionen mehr als ausreichend erschien, aufgrund des großen Datenumfangs jedoch auch keinen Nachteil gegenüber kleineren Werten hat. Die Zahl der Spalten der Datenmatrizen berechnet sich bei der Erweiterung auf N_f Datensatzfragmente über die Formel $j = N - N_f(2i - 1)$. Für die $N_f = 29$ Fragmente ergibt sich damit hier $j = 227\,602$. Eine physikalische Einschränkung der Struktur wie bei den Übertragungsfunktionen ist im Rahmen der 4SID nicht möglich. Die folgenden Untersuchungen wurden wie bei den Übertragungsfunktionen mit dem Kennfeld zur Berechnung des dynamischen Anteils durchgeführt.

Die mit dem generischen geometrischen 4SID-Algorithmus berechneten Singulärwerte sind in der Abbildung 5.12 dargestellt. Bei der manuellen Wahl der Ordnung wird

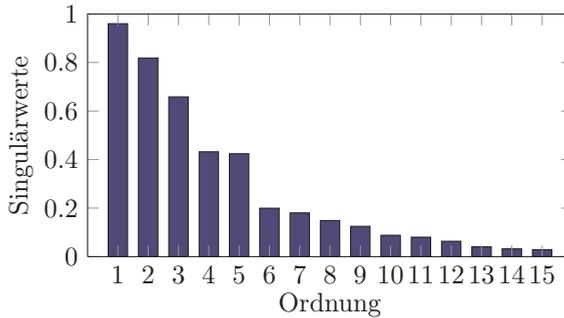


Abbildung 5.12: Mit dem generischen geometrischen 4SID-Algorithmus mit CVA-Gewichtung berechnete Singulärwerte zur Ordnungsbestimmung

Ordnung	alle Datenpunkte		Punkte mit gültigem λ_{O_2}	
	Mittelwert	Standardabw.	Mittelwert	Standardabw.
1	$0.48 \cdot 10^{-3}$	$6.13 \cdot 10^{-3}$	$0.28 \cdot 10^{-3}$	$5.93 \cdot 10^{-3}$
2	$0.46 \cdot 10^{-3}$	$7.65 \cdot 10^{-3}$	$-0.11 \cdot 10^{-3}$	$7.11 \cdot 10^{-3}$

Tabelle 5.6: Statistische Daten des Simulationsfehlers für das Zustandsraummodell verschiedener Ordnungen bei Identifikation mit allen Daten mit $T_A = 1$ s

häufig nach einem großen Abfall zwischen zwei Singulärwerten gesucht. Mit dieser Regel kämen hier ein Modell dritter oder fünfter Ordnung in Betracht. Für eine Analyse wurden Modelle mit allen möglichen Ordnungen berechnet. Dabei zeigte sich, dass alle Modelle mit einer Ordnung größer als zwei nicht brauchbar sind, da sie starke Schwingungen aufweisen, ein Großteil davon zeigt zusätzlich instabiles Verhalten. Die Modelle erster und zweiter Ordnung lieferten brauchbare Ergebnisse (vgl. Tabelle 5.6 und Abbildung 5.13), allerdings zeigt das Modell zweiter Ordnung bereits Überschwingen. Insgesamt sind die Resultate nicht so gut wie die besten Ergebnisse mit den Übertragungsfunktionen auf derselben Datenbasis.

Als Ursache für die auftretenden Schwingungen bei höheren Ordnungen konnten bei Untersuchungen mit jeweils einer Auswahl der Versuche die Messungen ermittelt werden, bei denen die Schwingungen des Druckreglers auftraten. Besonders stark waren diese Schwingungen bei den Versuchen 2, 5, 11 und 23 der Fall. Daher wurde die Identifikation erneut mit einem Datensatz durchgeführt, aus dem diese Versuche entfernt wurden. Die daraus berechneten Singulärwerte sind in der Abbildung 5.14 dargestellt. Hier würden nach dem Kriterium des großen Abfalls Modelle erster und fünfter Ordnung in Frage kommen.

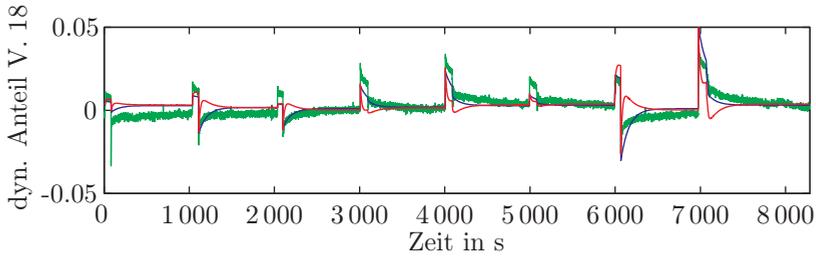


Abbildung 5.13: Simulationsergebnisse für den dynamischen Anteil der Messdaten von Versuch 18 (grün) mit den Zustandsraummodellen erster (blau) und zweiter Ordnung (rot) bei Identifikation mit allen Daten mit $T_A = 1$ s

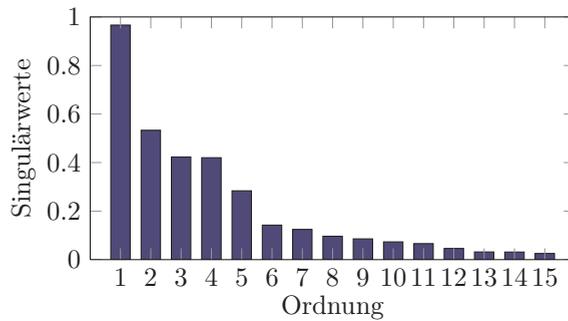


Abbildung 5.14: Mit dem generischen geometrischen 4SID-Algorithmus mit CVA-Gewichtung berechnete Singulärwerte zur Ordnungsbestimmung bei reduziertem Datensatz

Ordnung	alle Datenpunkte		Punkte mit gültigem λ_{O_2}	
	Mittelwert	Standardabw.	Mittelwert	Standardabw.
1	$0.78 \cdot 10^{-3}$	$6.02 \cdot 10^{-3}$	$0.62 \cdot 10^{-3}$	$5.84 \cdot 10^{-3}$
5	$0.98 \cdot 10^{-3}$	$6.20 \cdot 10^{-3}$	$0.63 \cdot 10^{-3}$	$5.93 \cdot 10^{-3}$

Tabelle 5.7: Statistische Daten des Simulationsfehlers für das Zustandsraummodell verschiedener Ordnungen bei Identifikation mit dem reduzierten Datensatz mit $T_A = 1$ s

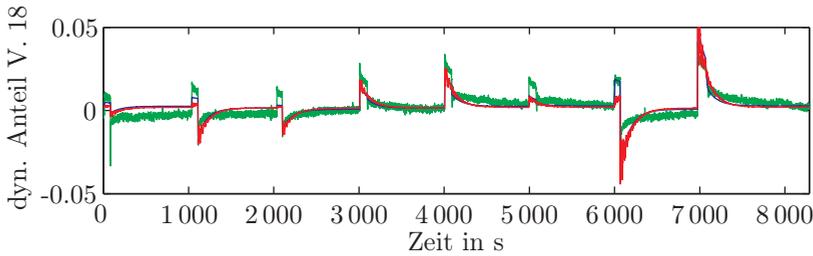


Abbildung 5.15: Simulationsergebnisse für den dynamischen Anteil der Messdaten von Versuch 18 (grün) mit den Zustandsraummodellen erster (blau) und fünfter Ordnung (rot) bei Identifikation mit dem reduzierten Datensatz mit $T_A = 1$ s, wobei die Verläufe der Modelle in weiten Bereichen nahezu übereinstimmen (nur rot sichtbar)

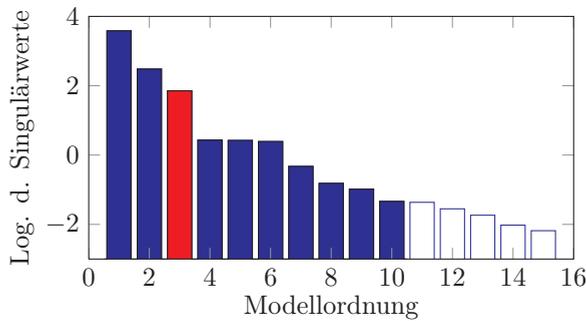


Abbildung 5.16: Von der MATLAB-Funktion `n4sid` ausgegebene Grafik der berechneten Singulärwerte mit automatisch gewählter Ordnung (rot)

Die Ergebnisse für die Modelle erster und fünfter Ordnung sind in der Tabelle 5.7 und für die Messung 18 in der Abbildung 5.15 abgebildet. Die geschätzten Modelle zweiter bis vierter Ordnung sind instabil. Die Modelle höherer Ordnungen sind zwar stabil, die Ergebnisse unterscheiden sich jedoch praktisch nicht von dem Modell fünfter Ordnung, sodass die höhere Ordnung keine Vorteile bringt. Auch die Unterschiede zwischen erster und fünfter Ordnung sind so gering, dass wegen des höheren Rechenaufwands sich die Verwendung der hohen Ordnung nicht lohnt und das Modell erster Ordnung somit das beste mit dieser Implementierung ermittelte Modell darstellt.

Bei der Berechnung mit der kommerziell implementierten Variante eines laut Dokumentation [Mat09] sehr ähnlichen geometrischen Algorithmus, der Funktion `n4sid` aus der SYSTEM IDENTIFICATION TOOLBOX in MATLAB, musste die Reduktion der

Ordnung	alle Datenpunkte		Punkte mit gültigem λ_{O_2}	
	Mittelwert	Standardabw.	Mittelwert	Standardabw.
1	$0.40 \cdot 10^{-3}$	$7.56 \cdot 10^{-3}$	$-0.39 \cdot 10^{-3}$	$6.76 \cdot 10^{-3}$
2	$0.81 \cdot 10^{-3}$	$6.82 \cdot 10^{-3}$	$0.12 \cdot 10^{-3}$	$6.38 \cdot 10^{-3}$
3	$0.62 \cdot 10^{-3}$	$7.07 \cdot 10^{-3}$	$-0.13 \cdot 10^{-3}$	$6.49 \cdot 10^{-3}$
4	$0.63 \cdot 10^{-3}$	$6.78 \cdot 10^{-3}$	$-0.04 \cdot 10^{-3}$	$6.31 \cdot 10^{-3}$
5	$0.63 \cdot 10^{-3}$	$6.92 \cdot 10^{-3}$	$-0.08 \cdot 10^{-3}$	$6.40 \cdot 10^{-3}$

(a) Modelle ohne Durchgriff

Ordnung	alle Datenpunkte		Punkte mit gültigem λ_{O_2}	
	Mittelwert	Standardabw.	Mittelwert	Standardabw.
1	$0.36 \cdot 10^{-3}$	$6.34 \cdot 10^{-3}$	$0.10 \cdot 10^{-3}$	$6.06 \cdot 10^{-3}$
2	$0.30 \cdot 10^{-3}$	$6.06 \cdot 10^{-3}$	$-0.03 \cdot 10^{-3}$	$5.80 \cdot 10^{-3}$
3	$0.49 \cdot 10^{-3}$	$6.07 \cdot 10^{-3}$	$0.25 \cdot 10^{-3}$	$5.88 \cdot 10^{-3}$
4	$0.48 \cdot 10^{-3}$	$6.06 \cdot 10^{-3}$	$0.23 \cdot 10^{-3}$	$5.86 \cdot 10^{-3}$
5	$0.49 \cdot 10^{-3}$	$6.07 \cdot 10^{-3}$	$0.25 \cdot 10^{-3}$	$5.88 \cdot 10^{-3}$

(b) Modelle mit Durchgriff

Tabelle 5.8: Statistische Daten des Simulationsfehlers für die mit der MATLAB-Funktion `n4sid` berechneten Zustandsraummodelle verschiedener Ordnungen für den Datensatz mit $T_A = 1$ s

Datensätze nicht vorgenommen werden. Es ist daher zu vermuten, dass hier zusätzlich Erweiterungen zur Stabilisierung des berechneten Systems implementiert sind. Der Algorithmus wurde mit seinen Standardeinstellungen verwendet, bei der Modelle bis zehnter Ordnung in Erwägung gezogen werden und einige weitere Parameter während des Durchlaufs automatisch gewählt werden. Bei diesem Datensatz kam stets die CVA-Gewichtung sowie ein Zukunftshorizont von 15 zur Anwendung. Die beiden Vergangenheitshorizonte (vgl. auch Abschnitt 3.3.3) wurden vom Algorithmus stets beide identisch zu 31 gewählt. Im Gegensatz zu den anderen hier verwendeten Algorithmen liefert die Funktion `n4sid` eine Systembeschreibung in Innovationsform, die in der Standardeinstellung keinen Durchgriff aufweist. Hier wurde zusätzlich die Variante mit explizit ausgewähltem Durchgriff mit in die Untersuchungen aufgenommen. Die Ordnung wird in der Standardeinstellung ebenfalls automatisch ermittelt. Die zugehörigen Singulärwerte sind in der Abbildung 5.16 zu finden, die automatische Wahl ergab jeweils ein Modell dritter Ordnung.

Zusätzlich zu diesen beiden Modellen wurden durch eine manuelle Ordnungswahl mit ansonsten identischen Parametern wie beim automatischen Durchlauf auch die Ordnungen eins bis fünf zusätzlich untersucht. Die Ergebnisse für die mit der Funktion `n4sid` berechneten Modelle sind in der Tabelle 5.8 zusammengefasst. Es ist klar

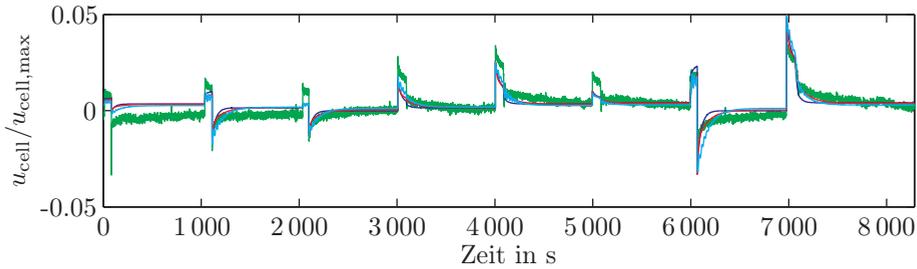


Abbildung 5.17: Simulationsergebnisse für den dynamischen Anteil der Messdaten von Versuch 18 (grün) mit den mit `n4sid` berechneten Zustandsraummodellen erster (blau), zweiter (rot) und dritter (cyan) Ordnung

zu erkennen, dass die Modelle mit Durchgriff besser abschneiden als die Modelle ohne Durchgriff, was auch dem gewählten Ansatz bei den Übertragungsfunktionen entspricht, der anhand des Verlaufs aus den Messdaten bestimmt wurde. Allerdings sieht man auch, dass die automatisch ausgewählten Modelle dritter Ordnung weder im Hinblick auf den Mittelwert des Fehlers noch auf die Varianz des Fehlers die optimale Wahl darstellen, da die Ordnungswahl auf Basis der Singulärwerte erfolgt. In beiden Fällen würden Modelle niedrigerer Ordnung mit besseren Ergebnissen bezüglich dieser Gütemaße existieren. Da es sich bei der Anwendung hier um die lineare Approximation eines nichtlinearen System handelt, ist jedoch ein genereller Rückschluss auf die Tauglichkeit der Ordnungsschätzung nicht möglich.

Um zusätzlich die Simulationen qualitativ beurteilen zu können, sind in der Abbildung 5.17 für die Modelle erster bis dritter Ordnung mit Durchgriff die Verläufe für den Versuch 18 aufgetragen. Die Ergebnisse sind sehr ähnlich und die Bereiche mit den Stöchiometriesprüngen werden relativ gut nachgebildet, weshalb auch die Fehler über den kompletten Datensatz sehr niedrig sind. Allerdings folgt der Einschwingvorgang bei dem Modell erster Ordnung nicht ganz so gut dem Verlauf der Messungen wie bei den anderen beiden Modellen. Die höhere Ordnung drei bringt hingegen keine Vorteile gegenüber dem Modell zweiter Ordnung. Somit stellt das Modell zweiter Ordnung mit Durchgriff die beste mit der Funktion `n4sid` berechnete Repräsentation des dynamischen Anteils bei manueller Wahl der Ordnung dar.

Als dritte Möglichkeit wurde das Zustandsraummodell mit `ADAPTx`, der kommerziell erhältlichen Implementierung der statistischen CVA, identifiziert. Auch bei dieser Variante kann ausgewählt werden, ob ein Modell mit oder ohne Durchgriff geschätzt werden soll. Zusätzlich muss die maximale Ordnung des HOARX-Modells vorgegeben werden, die bei der Bestimmung der HOARX-Ordnung mit dem AICc nicht überschritten werden darf. Sie stellt damit auch die Obergrenze für die Ordnung des Zustandsraummodells dar.

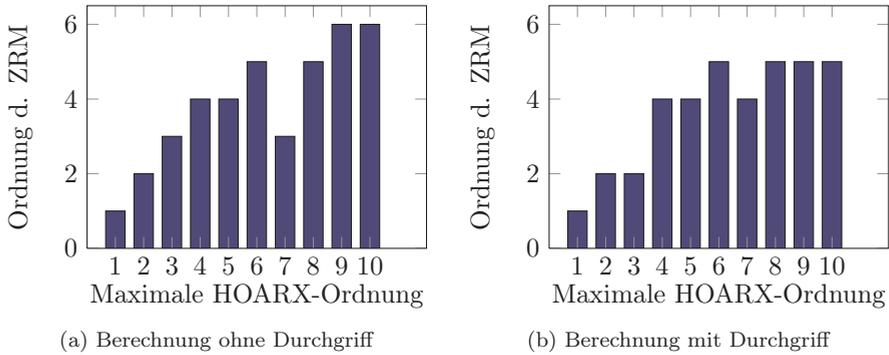


Abbildung 5.18: Mit ADAPT_x berechnete optimale Ordnungen des Zustandsraummodells (ZRM) in Abhängigkeit der maximalen Ordnung des HOARX-Modells

HOARX-Ordnung	alle Datenpunkte		Punkte mit gültigem λ_{O_2}	
	Mittelwert	Standardabw.	Mittelwert	Standardabw.
1	$0.30 \cdot 10^{-3}$	$7.25 \cdot 10^{-3}$	$-0.15 \cdot 10^{-3}$	$6.64 \cdot 10^{-3}$
2	$0.33 \cdot 10^{-3}$	$6.86 \cdot 10^{-3}$	$-0.12 \cdot 10^{-3}$	$6.38 \cdot 10^{-3}$
3	$0.31 \cdot 10^{-3}$	$7.19 \cdot 10^{-3}$	$-0.17 \cdot 10^{-3}$	$6.60 \cdot 10^{-3}$
4	$0.30 \cdot 10^{-3}$	$6.94 \cdot 10^{-3}$	$-0.18 \cdot 10^{-3}$	$6.41 \cdot 10^{-3}$
5	$0.30 \cdot 10^{-3}$	$7.09 \cdot 10^{-3}$	$-0.18 \cdot 10^{-3}$	$6.52 \cdot 10^{-3}$

(a) Modelle ohne Durchgriff

HOARX-Ordnung	alle Datenpunkte		Punkte mit gültigem λ_{O_2}	
	Mittelwert	Standardabw.	Mittelwert	Standardabw.
1	$0.37 \cdot 10^{-3}$	$6.59 \cdot 10^{-3}$	$-0.00 \cdot 10^{-3}$	$6.21 \cdot 10^{-3}$
2	$0.38 \cdot 10^{-3}$	$6.46 \cdot 10^{-3}$	$0.01 \cdot 10^{-3}$	$6.13 \cdot 10^{-3}$
3	$0.40 \cdot 10^{-3}$	$6.41 \cdot 10^{-3}$	$0.05 \cdot 10^{-3}$	$6.10 \cdot 10^{-3}$
4	$0.37 \cdot 10^{-3}$	$6.58 \cdot 10^{-3}$	$-0.02 \cdot 10^{-3}$	$6.20 \cdot 10^{-3}$
5	$0.38 \cdot 10^{-3}$	$6.59 \cdot 10^{-3}$	$-0.01 \cdot 10^{-3}$	$6.21 \cdot 10^{-3}$

(b) Modelle mit Durchgriff

Tabelle 5.9: Statistische Daten des Simulationsfehlers für die mit ADAPT_x berechneten Zustandsraummodelle bei verschiedenen HOARX-Ordnungen für den Datensatz mit $T_A = 1$ s

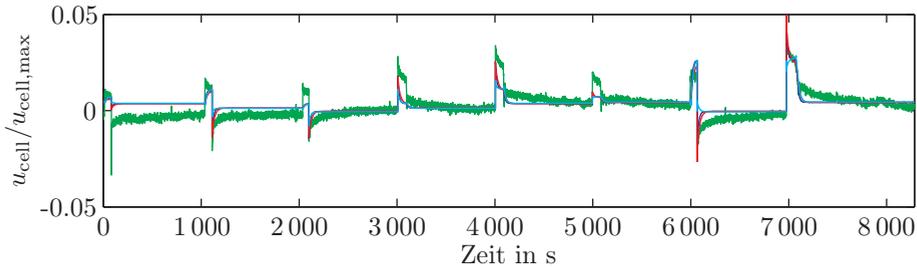


Abbildung 5.19: Simulationsergebnisse für den dynamischen Anteil der Messdaten von Versuch 18 (grün) mit den mit ADAPT_x berechneten Zustandsraummodellen erster (blau) und zweiter (rot) Ordnung mit Durchgriff und dem Modell zweiter Ordnung ohne Durchgriff (cyan), wobei die Verläufe der Modelle in weiten Bereichen nahezu übereinstimmen (nur cyan sichtbar)

In der Abbildung 5.18 sind die jeweils in Abhängigkeit der maximalen HOARX-Ordnung von ADAPT_x berechneten, bezüglich des AICc optimalen Ordnungen der Zustandsraummodelle mit und ohne Durchgriff dargestellt. Dabei entsprach die gewählte HOARX-Ordnung stets dem erlaubten Maximum. In beiden Fällen steigt die Ordnung des Zustandsraummodells nicht beliebig an, sondern stagniert. Tendenziell sind die geschätzten Ordnungen mit Durchgriff niedriger. Für die ersten fünf HOARX-Ordnungen beider Modellvarianten sind die statistischen Daten der Simulationsfehler in der Tabelle 5.9 zusammengefasst. Im Gegensatz zum vorigen Ansatz ist hier der Unterschied zwischen Modellen mit und ohne Durchgriff nicht so deutlich. Die Modelle mit Durchgriff weisen jedoch eine geringere Standardabweichung und ein besseres Verhalten im Bereich der gültigen Stöchiometrie auf, wohingegen die kaum erhöhten Mittelwerte des Fehlers über den gesamten Datensatz kaum ins Gewicht fallen.

Zum optischen Vergleich der Ergebnisse sind in der Abbildung 5.19 die mit den Modellen erster und zweiter Ordnung mit Durchgriff simulierten Verläufe für den Versuch 18 dargestellt. Zum Vergleich ist außerdem der Simulationsverlauf des Modells zweiter Ordnung ohne Durchgriff in derselben Abbildung zu finden, da dieses die geringste Varianz dieser Modellvarianten aufweist. Man sieht, dass der Verlauf des Modells ohne Durchgriff an einigen wenigen Stellen (z. B. bei etwa 6 000 s) etwas abweicht und die Messung nicht so gut wiedergibt wie die anderen beiden Modelle. Bei diesen ähneln sich die Verläufe sehr stark, sodass eine Ordnung höher als eins vom Verlauf her nicht gerechtfertigt erscheint. Da auch die statistischen Kenndaten nur minimal abweichen, kann also das Modell erster Ordnung mit Durchgriff als die beste mit der Implementierung ADAPT_x berechnete Variante angesehen werden.

Vergleich der beiden Ansätze

Trotz linear modellierter Dynamik und durch die Messung bedingte Abweichungen wie die zu hohen Stöchiometriewerte gelingt mit beiden Ansätzen, den Übertragungsfunktionen und dem Zustandsraummodell, die Nachbildung der dynamischen Abweichung von den stationären Werten im betrachteten Betriebsbereich sehr gut. Werden die sehr schnellen dynamischen Vorgänge nicht benötigt, beispielsweise weil ein zu regelndes Stellglied eine langsamere Dynamik hat, so gelingt die Modellierung bereits mit sehr einfachen Modellen erster Ordnung. Die Untersuchungen haben auch gezeigt, dass sich bei dem vorliegenden Versuchsszenario der Aufwand zur zusätzlichen Modellierung des dynamischen Verhaltens bei Sauerstoffstöchiometriesprüngen kaum lohnt. Wegen der nicht durch das Kennfeld abgedeckten hohen Stöchiometriewerte kann ein rein dynamischer Anteil in diesen Bereichen nicht berechnet werden. Dadurch müssen sehr große Abweichungen durch die Übertragungsfunktion nachgebildet werden. Das gelingt nur eingeschränkt, da diesen wiederum die korrekten rein dynamischen Abweichungen bei den Punkten mit gültiger Stöchiometrie gegenübersteht.

Bei den 4SID-Algorithmen stellt die Hinzunahme der Sauerstoffstöchiometrie als Eingangsgröße hingegen praktisch keinen weiteren Aufwand dar. Nur der Speicheraufwand, der insbesondere bei den geometrischen Verfahren durch die dort zum Einsatz kommenden Block-Hankel-Matrizen hoch ist, steigt. Bei größeren Datensätzen oder Betrachtung weiterer Eingangsgrößen müsste gegebenenfalls überprüft werden, ob durch eine optimierte Implementierung der Speicherplatzbedarf noch weiter reduziert werden kann, wenn bei der Anwendung des Algorithmus durch zu große Matrizen Speicherprobleme auftreten. Für die Identifikation mit Datensätzen unterschiedlicher Abtastzeit ist die 4SID-Identifikation jedoch nicht geeignet. Ansonsten liefert sie die deutlich besseren Ergebnisse und sollte daher den Übertragungsfunktionen vorgezogen werden.

Im Vergleich der drei verwendeten Algorithmen schneidet der selbst implementierte Algorithmus deutlich schlechter als die kommerziellen Produkte ab. Das kann u. a. an numerischen Schwierigkeiten der Implementierung, aber auch an der fehlenden Strukturbeschränkung bei der Schätzung des schiefen Prädiktors liegen. Der Vergleich mit den Ergebnissen der Funktion `n4sid` aus MATLAB lässt vermuten, dass anstelle des in der Dokumentation als Quelle genannten einfachen generischen Algorithmus aus [Lju99] eine andere Variante bzw. diverse Erweiterungen implementiert sind, die die Schätzung zusätzlich verbessern. Nur so können auch die Fähigkeit zur Verarbeitung mehrere Datensätze, die stets stabil geschätzten Modelle und die automatische Wahl diverser Parameter erklärt werden, die jedoch nicht exakt dokumentiert sind. Die erzielten Ergebnisse sind sehr gut, hier findet auch eine deutliche Kompensation des fehlenden statischen Kennfeldes statt. Ebenfalls sehr gut sind die

mit ADAPT_x erzielten Ergebnisse. In beiden Fällen konnte die Ordnung gegenüber der automatischen Wahl nochmals reduziert werden, ohne dabei einen merkbaren Abstrich bei der Qualität der Simulationsergebnisse hinnehmen zu müssen.

Vom Identifikationsaufwand her stellen die 4SID-Methoden die mit Abstand einfachere Methode dar. Es entfallen hier sowohl die aufwändige Parameteroptimierung im Rahmen der nichtlinearen LS-Schätzung als auch die dazu notwendige Suche nach geeigneten Startwerten und die mehrfache Durchführung zur Überprüfung, ob es sich nicht um ein lokales Minimum handelt. Auch ohne Strukturvorgaben, die bei der 4SID mit Ausnahme des Durchgriffs nicht möglich sind, zeigen die Modelle das gewünschte Verhalten. Bei der Simulationszeit hat unter MATLAB ein zeitdiskretes Zustandsraummodell fünfter Ordnung in Kombination mit dem Kennfeld als statischen Anteil mit durchschnittlich 17.7 ms einen klaren Geschwindigkeitsvorteil von etwa 6 ms pro 1 000 Datenpunkten gegenüber zwei zeitkontinuierlichen Übertragungsfunktionen zweiter und erster Ordnung, die ebenfalls mit dem Kennfeld kombiniert wurden und durchschnittlich 23.7 ms für 1 000 Datenpunkte benötigten². Legt man sich jedoch auf eine Abtastzeit für die Simulation fest, so können die zeitkontinuierlichen Übertragungsfunktionen diskretisiert und ggf. auch in eine Zustandsraumdarstellung umgerechnet werden, sodass dann dieser Nachteil entfällt.

5.2.4 Ergebnisse des Gesamtmodells und Validation

Die beschriebenen Möglichkeiten zur Modellierung des statischen und des dynamischen Teilsystems lassen sich jeweils zu einem Gesamtmodell kombinieren. Die bisher durchgeführten Untersuchungen für die dynamischen Modelle wurden dabei aus Gründen der Übersichtlichkeit nur für die dynamischen Anteile der Daten berechnet, die mit dem Kennfeld ermittelt wurden. Die prinzipiellen Aussagen gelten auch für die Verwendung des KNN, allerdings unterscheiden sich die konkreten statistischen Werte leicht. Im Folgenden werden daher mit den besten Ergebnissen der vorangegangenen Untersuchungen die jeweiligen Gesamtmodelle gegenübergestellt und zusätzlich an den Validationsdaten getestet.

Modelle für den gesamten Datensatz mit hoch aufgelösten Daten

Für den vollständigen Datensatz inklusive der hoch aufgelösten Daten kommen beim dynamischen Teilmodell nur die zeitkontinuierlichen Übertragungsfunktionen in Betracht. Als beste Ergebnisse der einzelnen Untersuchungen werden hier die alleinige

²Die Werte wurden auf einer AMD ATHLON64 3200+ CPU unter WINDOWS XP 32bit und MATLAB 2006a an einem Datensatz mit 1 000 Punkten mit $T_A = 1$ s durch Mittelung über 100 Simulationsläufe berechnet.

stat. Modell	Ordnung		alle Datenpunkte		Punkte mit gültigem λ_{O_2}	
	G_j	$G_{\lambda_{\text{O}_2}}$	Mittelwert	Standardabw.	Mittelwert	Standardabw.
KF	3	–	$0.38 \cdot 10^{-3}$	$11.33 \cdot 10^{-3}$	$0.63 \cdot 10^{-3}$	$14.60 \cdot 10^{-3}$
MLP	3	–	$0.68 \cdot 10^{-3}$	$10.12 \cdot 10^{-3}$	$1.14 \cdot 10^{-3}$	$13.02 \cdot 10^{-3}$
KF	3	1	$0.02 \cdot 10^{-3}$	$12.10 \cdot 10^{-3}$	$0.99 \cdot 10^{-3}$	$13.95 \cdot 10^{-3}$
MLP	3	1	$1.03 \cdot 10^{-3}$	$11.37 \cdot 10^{-3}$	$1.96 \cdot 10^{-3}$	$12.78 \cdot 10^{-3}$

Tabelle 5.10: Statistische Daten des Simulationsfehlers für die ausgewählten Kombinationen der Teilmodelle für den gesamten Identifikationsdatensatz (KF steht für Kennfeld)

Übertragungsfunktion dritter Ordnung für die Stromdichte, die mit der Beschränkung auf Punkte mit gültiger Sauerstoffstöchiometrie im Gütemaß berechnet wurde, und die Kombination aus Übertragungsfunktionen dritter Ordnung für die Stromdichte und erster Ordnung für die O_2 -Stöchiometrie gegenübergestellt. Im statischen Teilmodell können sowohl das neuronale Netz als auch das Kennfeld zum Einsatz kommen. Aus den Kombinationen ergeben sich insgesamt vier Modelle des PEMFC-Stacks, die für den vollständigen Datensatz gegenüber gestellt werden.

Die statistischen Kenndaten des Simulationsfehlers dieser vier Modelle für den Identifikationsdatensatz sind in der Tabelle 5.10 zusammengefasst. Am Beispiel der Messung 18 sind außerdem die Simulationsverläufe in der Abbildung 5.20 aufgetragen. Alle vier Modelle beschreiben den Verlauf sehr gut. Zu beachten ist die sehr hohe Auflösung der Ordinate, durch die die Abweichungen relativ groß erscheinen. Mit Ausnahme der Sprungstellen, wo größere Abweichungen auftreten können, betragen die Abweichungen beispielsweise nach dem Sprung 7 weniger als ein Prozent der normierten mittleren Zellspannung. Bei hohen Sprüngen, beispielsweise bei Sprung 7 zwischen 6000 s und 7000 s, bilden die beiden Modelle ohne Übertragungsfunktion für die Sauerstoffstöchiometrie den gemessenen Verlauf etwas besser nach. Bei niedrigen Sprüngen ist es genau umgekehrt, wie beispielsweise bei Sprung 4 zwischen 3000 s und 4000 s und in den hoch aufgelösten Daten von Sprung 1 zu sehen ist. Bei diesen vier Modellen schneiden jeweils die beiden Modelle mit dem Kennfeld von der Güte etwas besser ab als ihre Pendanten mit MLP. Dennoch kann hier keine generelle Empfehlung ausgesprochen werden. Die leicht geringere Güte kann durchaus in Kauf genommen werden, wenn nicht genügend Speicherplatz für das Kennfeld zur Verfügung steht. Auch muss ein MLP nicht zwangsläufig mit Daten aus einem Gitter trainiert werden, wie es zur Erstellung des Kennfelds für gängige Interpolationsverfahren notwendig ist.

Für diese vier Modelle wurde zusätzlich eine Validation durchgeführt. Bei der Validation ist zu berücksichtigen, dass nur 64.4% des gesamten Validationsdatensatzes gültige Stöchiometriewerte aufweisen (vgl. auch Tabelle 5.2). Eine Validation der

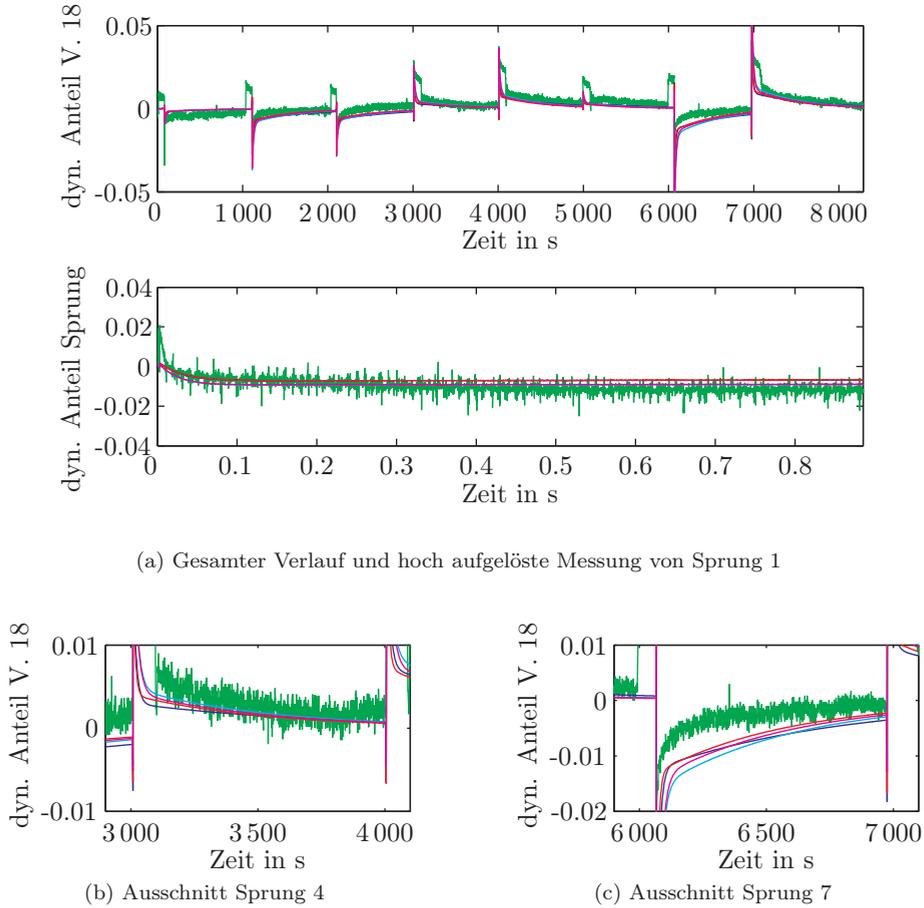


Abbildung 5.20: Simulationsergebnisse für den dynamischen Anteil der Messdaten von Versuch 18 (**grün**) mit Kennfeld und Übertragungsfunktion für die Stromdichte (**blau**), Kennfeld und Übertragungsfunktionen für Stromdichte und O_2 -Stöchiometrie (**cyan**), MLP und Übertragungsfunktion für die Stromdichte (**rot**) sowie MLP und Übertragungsfunktionen für Stromdichte und O_2 -Stöchiometrie (**magenta**), wobei die Verläufe der Modelle in weiten Bereichen nahezu übereinstimmen (nur **magenta** sichtbar)

Modelle ohne Stöchiometriedynamik auch an den Stöchiometriesprüngen ist sinnvoll, um zu untersuchen, wie gut das statische Verhalten mit den gemessenen Daten übereinstimmt und ob die Vernachlässigung dieser Dynamik auch bei den Validationsdaten gerechtfertigt ist.

Die statistischen Kennwerte der Validation sind in der Tabelle 5.11 zusammengefasst. Insgesamt sind die Validationsergebnisse gut, insbesondere die Standardabweichung bleibt im selben Rahmen wie bei der Identifikation. Daher kann das Modell als gültig und auch zur Skalierung auf andere Stackgrößen geeignet angesehen werden. Bei den Mittelwerten der Simulationsfehler für Stromdichtesprünge, die auch bei der Validation noch im einstelligen Promillebereich liegen, tritt eine leichte Verschiebung auf, was vermutlich auf den unterschiedlichen Degradationsgrad der PEMFC-Stacks zurückzuführen ist. Im Gegensatz zum Identifikationsdatensatz haben hier die Modelle mit dem MLP als statisches Teilmodell einen leichten Vorteil. Auch bei der Validation zeigt sich kein Vorteil bei der Verwendung einer zusätzlichen Übertragungsfunktion für die Stöchiometrie, die Simulationsergebnisse hängen hauptsächlich vom statischen Teilmodell ab. Allerdings ist hier aufgrund der geringen Datenbasis für die Stöchiometriedynamik kein abschließendes Urteil möglich.

Modelle für den Datensatz mit $T_A = 1$ s

Betrachtet man nur die langsameren dynamischen Vorgänge, die in den Daten mit einer Abtastzeit von $T_A = 1$ s enthalten sind, so kommen für das dynamische Teilsystem zusätzlich die zeitdiskreten Zustandsraummodelle in Frage. Es werden hierbei die jeweils beste Variante der Zustandsraummodelle aus den Voruntersuchungen zum Vergleich herangezogen. Auf die weitere Betrachtung des Zustandsraummodells aus dem selbst implementierten generischen 4SID-Algorithmus, das deutlich schlechtere Ergebnisse geliefert hat, wird aus Gründen der Übersichtlichkeit jedoch verzichtet.

Auch wenn diese schon in den Voruntersuchungen nicht so gut wie die Zustandsraummodelle abgeschnitten haben, kommen zum Vergleich auch Übertragungsfunktionen zum Einsatz. Hier werden eine alleinige Übertragungsfunktion erster Ordnung für die Stromdichte, bei deren Berechnung nur die Punkte mit gültigem λ_{O_2} ins Gütemaß eingegangen sind, und je eine Übertragungsfunktion erster Ordnung für Stromdichte und Sauerstoffstöchiometrie mit den Zustandsraummodellen verglichen. Das beste mit der Funktion `n4sid` berechnete Modell hat die Ordnung zwei, mit `ADAPTx` wurden die besten Ergebnisse mit einer Zustandsraumdarstellung erster Ordnung erzielt. Beide Modelle haben einen Durchgriff.

Die statistischen Kenndaten des Simulationsfehlers dieser acht Modelle für die Daten mit $T_A = 1$ s des Identifikationsdatensatzes fasst die Tabelle 5.12 zusammen. Bei allen Varianten liefert das künstliche neuronale Netz im direkten Vergleich mit dem

stat. Modell	Ordnung		Stromdichtesprünge		λ_{O_2} -Sprünge	
	G_j	$G_{\lambda_{O_2}}$	Mittelwert	Standardabw.	Mittelwert	Standardabw.
KF	3	–	$6.64 \cdot 10^{-3}$	$11.48 \cdot 10^{-3}$	$4.67 \cdot 10^{-3}$	$16.45 \cdot 10^{-3}$
MLP	3	–	$4.83 \cdot 10^{-3}$	$11.12 \cdot 10^{-3}$	$4.69 \cdot 10^{-3}$	$17.77 \cdot 10^{-3}$
KF	3	1	$7.00 \cdot 10^{-3}$	$11.71 \cdot 10^{-3}$	$4.69 \cdot 10^{-3}$	$16.49 \cdot 10^{-3}$
MLP	3	1	$5.43 \cdot 10^{-3}$	$11.51 \cdot 10^{-3}$	$4.71 \cdot 10^{-3}$	$17.80 \cdot 10^{-3}$

(a) Alle Datenpunkte

stat. Modell	Ordnung		Stromdichtesprünge		λ_{O_2} -Sprünge	
	G_j	$G_{\lambda_{O_2}}$	Mittelwert	Standardabw.	Mittelwert	Standardabw.
KF	3	–	$5.17 \cdot 10^{-3}$	$12.23 \cdot 10^{-3}$	$13.98 \cdot 10^{-3}$	$7.61 \cdot 10^{-3}$
MLP	3	–	$3.37 \cdot 10^{-3}$	$11.98 \cdot 10^{-3}$	$14.59 \cdot 10^{-3}$	$9.69 \cdot 10^{-3}$
KF	3	1	$7.67 \cdot 10^{-3}$	$12.80 \cdot 10^{-3}$	$13.94 \cdot 10^{-3}$	$7.63 \cdot 10^{-3}$
MLP	3	1	$6.88 \cdot 10^{-3}$	$12.66 \cdot 10^{-3}$	$14.54 \cdot 10^{-3}$	$9.71 \cdot 10^{-3}$

(b) Punkte mit gültigem λ_{O_2} **Tabelle 5.11:** Statistische Daten der Validation der Modelle mit hoch aufgelösten Daten (KF steht für Kennfeld)

stat. Modell	Ordnung		alle Datenpunkte		Punkte mit gültigem λ_{O_2}	
	G_j	$G_{\lambda_{O_2}}$	Mittelwert	Standardabw.	Mittelwert	Standardabw.
KF	1	–	$-1.67 \cdot 10^{-3}$	$5.04 \cdot 10^{-3}$	$-1.88 \cdot 10^{-3}$	$5.30 \cdot 10^{-3}$
MLP	1	–	$-1.18 \cdot 10^{-3}$	$4.83 \cdot 10^{-3}$	$-1.33 \cdot 10^{-3}$	$5.10 \cdot 10^{-3}$
KF	1	1	$-2.17 \cdot 10^{-3}$	$5.59 \cdot 10^{-3}$	$-1.98 \cdot 10^{-3}$	$5.29 \cdot 10^{-3}$
MLP	1	1	$-1.59 \cdot 10^{-3}$	$5.41 \cdot 10^{-3}$	$-1.43 \cdot 10^{-3}$	$5.10 \cdot 10^{-3}$

stat. Modell	ZRM	alle Datenpunkte		Punkte mit gültigem λ_{O_2}	
		Mittelwert	Standardabw.	Mittelwert	Standardabw.
KF	n4sid	$0.30 \cdot 10^{-3}$	$6.06 \cdot 10^{-3}$	$-0.03 \cdot 10^{-3}$	$5.80 \cdot 10^{-3}$
MLP	n4sid	$0.12 \cdot 10^{-3}$	$5.82 \cdot 10^{-3}$	$-0.15 \cdot 10^{-3}$	$5.53 \cdot 10^{-3}$
KF	ADAPT _X	$0.37 \cdot 10^{-3}$	$6.59 \cdot 10^{-3}$	$-0.00 \cdot 10^{-3}$	$6.21 \cdot 10^{-3}$
MLP	ADAPT _X	$0.18 \cdot 10^{-3}$	$6.29 \cdot 10^{-3}$	$-0.14 \cdot 10^{-3}$	$5.88 \cdot 10^{-3}$

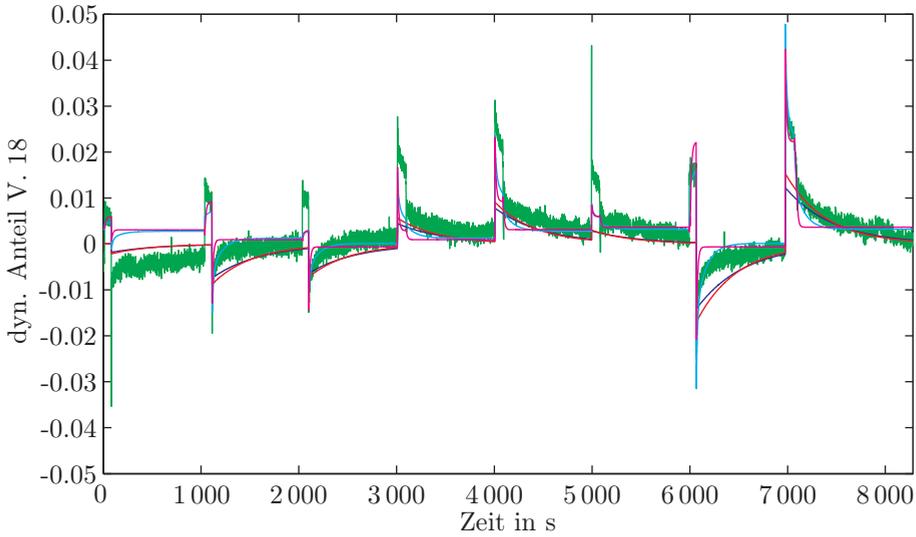
Tabelle 5.12: Statistische Daten des Simulationsfehlers für die ausgewählten Kombinationen der Teilmodelle für die Daten mit $T_A = 1$ s des Identifikationsdatensatzes (KF steht für Kennfeld, ZRM steht für Zustandsraummodell)

Kennfeld die besseren Ergebnisse. Für eine bessere Übersicht sind daher in der Abbildung 5.21 am Beispiel der Messung 18 die Simulationsverläufe nur für die Varianten mit MLP aufgetragen. Auch hier liefern wieder alle Modelle sehr gute Ergebnisse. Nur sehr geringe Unterschiede sind jeweils zwischen den beiden Zustandsraummodellen untereinander und zwischen den beiden Varianten mit Übertragungsfunktionen untereinander festzustellen. Die beiden Varianten mit dem Zustandsraummodell als dynamischem Anteil bilden die Phasen nach Stöchiometriesprüngen besser nach als die Übertragungsfunktionen. Dafür haben sie eine deutlich kleinere Zeitkonstante als die Übertragungsfunktionen und schwingen daher sehr viel schneller auf die stationären Werte ein. Dadurch kommen Fehler im statischen Anteil stärker zum Tragen und werden nicht ausgeglichen, wie beispielsweise nach dem ersten oder dem siebten Sprung. Die Verläufe nach Stromdichtesprüngen werden etwas besser durch die Modelle mit Übertragungsfunktionen nachgebildet, die durch die größeren Zeitkonstanten im Einschwingvorgang diese Fehler ausgleichen. Im Vergleich zu den Modellen für den kompletten Datensatz treten bei den Verläufen hier keine extremen Spitzen an den Sprungstellen auf, die dort durch die Modellierung der sehr schnellen Dynamik resultieren.

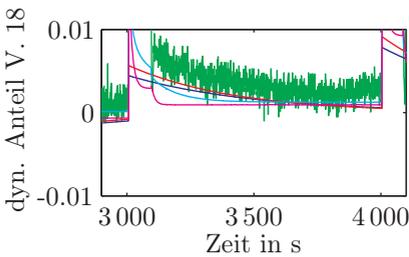
Für diese acht Modelle wurde ebenfalls eine Validation mit den Daten mit $T_A = 1$ s des Validationsdatensatzes durchgeführt. Die Ergebnisse sind in der Tabelle 5.13 zusammengefasst. Auch hier liefert die Validation insgesamt gute Ergebnisse, womit auch diese Modelle als gültig angesehen werden können. Im Gegensatz zu den Modellen zuvor verdoppelt sich bei diesen Modellen die Standardabweichung knapp bei den Stromdichtesprüngen der Validationsdaten, allerdings von einem halb so großen Ausgangswert im Vergleich zu den vorigen Modellen. Bei diesen Modellen hier fällt die Nachbildung der Stöchiometriesprünge in den Validationsdaten etwas schlechter aus als bei den Modellen zuvor, da hier das Fehlen von entsprechenden Identifikationsdaten durch die geringere Datenbasis noch stärker ins Gewicht fällt. Im Vergleich sind, wie schon bei der Identifikation, die Ergebnisse der Zustandsraummodelle besser als die der Modelle mit Übertragungsfunktionen. Innerhalb dieser Gruppen sind die Ergebnisse sehr ähnlich. Wie schon bei den Modellen mit hoher zeitlicher Auflösung kann durch die Hinzunahme der Übertragungsfunktion $G_{\lambda_{O_2}}$ keine Verbesserung erzielt werden, die diesen Aufwand rechtfertigt, zumindest solange keine zusätzlichen Identifikationsdaten zur Verfügung stehen.

5.2.5 Bewertung des Modellansatzes

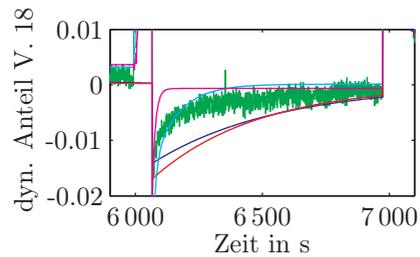
Die Untersuchung der verschiedenen Modellvarianten hat gezeigt, dass sich bereits mit sehr einfachen dynamischen Teilmodellen in Kombination mit einer statischen Repräsentation der stationären Betriebspunkte eine sehr hohe Genauigkeit bei der Nachbildung des dynamischen Verhaltens eines PEMFC-Stacks erzielen lässt. Auch



(a) Gesamter Verlauf



(b) Ausschnitt Sprung 4



(c) Ausschnitt Sprung 7

Abbildung 5.21: Simulationsergebnisse mit $T_A = 1$ s für den dynamischen Anteil der Messdaten von Versuch 18 (grün) bei Verwendung des MLP als statischem Anteil und Übertragungsfunktion für die Stromdichte (blau), Übertragungsfunktionen für Stromdichte und O_2 -Stöchiometrie (rot), `n4sid`-Zustandsraummodell zweiter Ordnung (cyan) sowie `ADAPTx`-Zustandsraummodell erster Ordnung (magenta)

stat. Modell	Ordnung		Stromdichtesprünge		λ_{O_2} -Sprünge	
	G_j	$G_{\lambda_{\text{O}_2}}$	Mittelwert	Standardabw.	Mittelwert	Standardabw.
KF	1	–	$6.07 \cdot 10^{-3}$	$10.38 \cdot 10^{-3}$	$4.67 \cdot 10^{-3}$	$16.45 \cdot 10^{-3}$
MLP	1	–	$6.39 \cdot 10^{-3}$	$10.58 \cdot 10^{-3}$	$3.89 \cdot 10^{-3}$	$20.14 \cdot 10^{-3}$
KF	1	1	$7.67 \cdot 10^{-3}$	$10.70 \cdot 10^{-3}$	$3.87 \cdot 10^{-3}$	$19.06 \cdot 10^{-3}$
MLP	1	1	$6.05 \cdot 10^{-3}$	$10.09 \cdot 10^{-3}$	$4.03 \cdot 10^{-3}$	$19.69 \cdot 10^{-3}$
stat. Modell	ZRM	alle Datenpunkte		Punkte mit gültigem λ_{O_2}		
		Mittelwert	Standardabw.	Mittelwert	Standardabw.	
KF	n4sid	$2.72 \cdot 10^{-3}$	$10.53 \cdot 10^{-3}$	$1.77 \cdot 10^{-3}$	$18.48 \cdot 10^{-3}$	
MLP	n4sid	$2.00 \cdot 10^{-3}$	$9.94 \cdot 10^{-3}$	$2.38 \cdot 10^{-3}$	$19.36 \cdot 10^{-3}$	
KF	ADAPT _x	$2.60 \cdot 10^{-3}$	$10.98 \cdot 10^{-3}$	$1.79 \cdot 10^{-3}$	$19.13 \cdot 10^{-3}$	
MLP	ADAPT _x	$1.89 \cdot 10^{-3}$	$10.25 \cdot 10^{-3}$	$2.40 \cdot 10^{-3}$	$19.88 \cdot 10^{-3}$	

(a) Alle Datenpunkte

stat. Modell	Ordnung		Stromdichtesprünge		λ_{O_2} -Sprünge	
	G_j	$G_{\lambda_{\text{O}_2}}$	Mittelwert	Standardabw.	Mittelwert	Standardabw.
KF	1	–	$3.08 \cdot 10^{-3}$	$8.93 \cdot 10^{-3}$	$13.98 \cdot 10^{-3}$	$7.61 \cdot 10^{-3}$
MLP	1	–	$7.63 \cdot 10^{-3}$	$11.06 \cdot 10^{-3}$	$16.63 \cdot 10^{-3}$	$10.19 \cdot 10^{-3}$
KF	1	1	$7.83 \cdot 10^{-3}$	$10.93 \cdot 10^{-3}$	$16.03 \cdot 10^{-3}$	$8.47 \cdot 10^{-3}$
MLP	1	1	$6.53 \cdot 10^{-3}$	$10.43 \cdot 10^{-3}$	$16.28 \cdot 10^{-3}$	$10.08 \cdot 10^{-3}$
stat. Modell	ZRM	alle Datenpunkte		Punkte mit gültigem λ_{O_2}		
		Mittelwert	Standardabw.	Mittelwert	Standardabw.	
KF	n4sid	$-0.30 \cdot 10^{-3}$	$9.05 \cdot 10^{-3}$	$13.42 \cdot 10^{-3}$	$7.93 \cdot 10^{-3}$	
MLP	n4sid	$-0.31 \cdot 10^{-3}$	$9.17 \cdot 10^{-3}$	$14.30 \cdot 10^{-3}$	$10.02 \cdot 10^{-3}$	
KF	ADAPT _x	$-0.74 \cdot 10^{-3}$	$9.29 \cdot 10^{-3}$	$14.15 \cdot 10^{-3}$	$8.11 \cdot 10^{-3}$	
MLP	ADAPT _x	$-0.68 \cdot 10^{-3}$	$9.35 \cdot 10^{-3}$	$14.94 \cdot 10^{-3}$	$10.18 \cdot 10^{-3}$	

(b) Punkte mit gültigem λ_{O_2}

Tabelle 5.13: Statistische Daten der Validation für die Modelle mit $T_A = 1$ s (KF steht für Kennfeld, ZRM steht für Zustandsraummodell)

die Skalierung des Modells zur Validation an einem Stack mit zweieinhalb mal so vielen Zellen zeigte bei der Validation gute Ergebnisse.

Allerdings stellt insbesondere die messtechnische Erfassung einer genügenden Anzahl von stationären Betriebspunkten für den statischen Modellanteil einen Nachteil dieses Modellansatzes dar. Diese Anzahl wächst exponentiell mit der Zahl der betrachteten Eingangsgrößen und entsprechend steigt damit die benötigte Messzeit an. Können für das Training des neuronalen Netzes auch im Betrieb auszuschließende Kombinationen an Betriebsbedingungen weggelassen werden, so erfordert die Interpolation des Kennfelds in MATLAB ein vollständiges Punktraster. Es können dann nur Stützstellen in den Eingangsgrößen gewählt werden, für die auch in jeder Kombination ein stationärer Betriebspunkt messtechnisch ermittelt werden kann, ohne dabei den Stack zu schädigen.

Nimmt man diesen hohen Messaufwand in Kauf, so erhält man ein Modell, welches die Zielsetzung einer genauen Simulation im normalen Betriebsbereich bei geringem Rechenaufwand erfüllt. Mit Simulationszeiten um die 20 ms für 1 000 Datenpunkte erfolgt die Berechnung des Modellausgangs unter MATLAB bei einer Abtastzeit von $T_A = 1$ s fünf Größenordnungen schneller als in Echtzeit. Damit eignet es sich beispielsweise sehr gut für den Einsatz in einer Simulationsumgebung für den kompletten Antriebsstrang eines Brennstoffzellenfahrzeugs.

Bei einer Anwendung im Fahrzeug, z. B. für eine modellprädiktive Regelung des PEMFC-Stacks (vgl. auch [Nie09]), muss das Modell stets den aktuellen Zustand des Stack repräsentieren. Eine regelmäßige Neuberechnung des Kennfelds, die das Modell an den aktuellen Degradationsgrad des Stack anpasst, ist aufgrund des hohen messtechnischen Aufwands nicht möglich. Aufgrund des modularen Konzepts dieses Grey-Box-Ansatzes wäre jedoch eine Integration geeigneter Degradationsmodelle sehr einfach zusätzlich oder anstelle des aktuellen statischen Anteils in das Modell möglich. Um den Messaufwand zu verringern, könnten dazu auch physikalische oder empirische statische Modelle des PEMFC-Stacks herangezogen werden, bei denen ggf. weniger Messungen zur Identifikation der Modellparameter genügen.

Beim dynamischen Teil sticht im Gegensatz zum hohen Identifikationsaufwand der statischen Modelle besonders die 4SID durch ihre sehr schnelle und einfache Berechnung des Modells hervor. Trotz des relativ großen Datensatzes benötigt die Berechnung eines Modells je nach Algorithmus nur ca. 10 bis 30 Sekunden³. Allerdings erlaubt die Methode keine Vorgabe bestimmter Elemente oder Struktureigenschaften des Zustandsraummodells. Letzteres zeigte sich jedoch nicht als Nachteil im Simulationsverhalten der Modelle, sie bildeten alle wie gewünscht das Verhalten sehr gut nach. Für die Daten mit einer Abtastzeit von $T_A = 1$ s stellen insbesondere die mit `n4sid` und `ADAPTx` berechneten Zustandsraummodelle die beste Wahl dar. Bei bei-

³Es wurde dieselbe Rechnerkonfiguration wie bei den Simulationsläufen verwendet.

den Methoden kann jedoch zumindest bei dieser linearen Approximation eines nicht-linearen Systems die automatische Berechnung der Ordnung nur als Anhaltspunkt gesehen werden und es müssen verschiedene Ordnungen getestet werden. Aufgrund der schnellen Rechenzeit bei der Identifikation auch mit großen Datensätzen stellt dies jedoch kein Problem dar.

Im Vergleich der beiden kommerziellen Implementierungen sind die Ergebnisse der Funktion `n4sid` minimal besser als die mit dem `ADAPTx`-Modell erzielten Simulationen. Allerdings ist die Dokumentation dieser MATLAB-Funktion im Hinblick auf den verwendeten Algorithmus sehr ungenau, es wird nur auf eine prinzipielle Erklärung des generischen Algorithmus in [Lju99] verwiesen. Dadurch bleibt unklar, auf Basis welches Verfahrens und mit welchen Erweiterungen die Implementierung erfolgt ist, weshalb eine genaue Bewertung dieser Ergebnisse im Vergleich nicht möglich ist.

Bei den Übertragungsfunktionen überrascht zunächst die Tatsache, dass trotz der in den Messdaten erkennbaren dynamischen Reaktion des Stacks auf Stöchiometriesprünge die Verwendung einer zusätzlichen Übertragungsfunktion für die Eingangsgröße Sauerstoffstöchiometrie keine Verbesserung bringt. Dies ist hauptsächlich auf die Identifikationsdaten zurückzuführen, die nur sehr wenige reine Stöchiometriesprünge umfassen, bei denen die dynamische Antwort nicht mit der auf Stromdichtesprünge überlagert wird. Zusätzlich kommt erschwerend hinzu, dass genau um diese Stöchiometriesprünge aufgrund der Betriebsführung am Teststand die erhöhten Stöchiometriewerte auftreten, die den Bereich der stationären Betriebspunkte bis zum Fünffachen übersteigen. Daher ist dort eine reine Ermittlung des dynamischen Anteils nicht möglich, was zur Verfälschung der Identifikationsbasis dieser Übertragungsfunktion führt und damit das Ergebnis bedeutend beeinflusst.

Je nach Anwendungszweck eines solchen Modells und daraus folgenden Genauigkeitsanforderungen in der Nachbildung der mittleren Zellspannung wäre ggf. erneut zu überprüfen, ob mit geeigneten Messdaten zusätzlich eine Übertragungsfunktion für die Sauerstoffstöchiometrie sinnvoll ist. Wird die am Teststand angewendete Betriebsführung für PEMFC-Stacks auch weiterhin so mit den großen Abständen von einer Minute zwischen Stomdichte- und Gasflussänderungen beibehalten, würde in einem ersten Schritt eine Erweiterung des statischen Anteils auch für sehr hohe Stöchiometriewerte einen deutlich höheren Genauigkeitsvorteil bringen.

Bei einer deutlichen Erweiterung des betrachteten Betriebsbereichs, wie z. B. bei deutlich tieferen Betriebstemperaturen für den Kaltstart, könnte es passieren, dass der dynamische Anteil nicht mehr gut durch lineare dynamische Glieder approximiert werden kann. Als möglichen Schritt in diese Richtung wurden daher auch erste Ansätze mit dynamischen neuronalen Netzen als dynamisches Teilmodell an den Identifikationsdaten untersucht [Wai06]. Dabei stellt die Größe des Datensatzes und die daraus resultierende lange Trainingszeit einen Nachteil dar, dem durch optimier-

te Implementierung und Einsatz geeigneter Rechner und spezialisierter Programme entgegengewirkt werden könnte.

Eine andere Möglichkeit stellt die Modellierung durch lineare Übertragungsfunktionen in Abhängigkeit des aktuellen Betriebspunkts dar. Dieser Ansatz wurde in [Vor06] für die Diagnose untersucht (vgl. auch Abschnitt 6.1). Parallel dazu wurde zur Modellierung einer PEM-Brennstoffzelle der Ansatz des Uryson-Modells in [MSSH08] aufgegriffen und in [MASH09] mit der eben beschriebenen nichtlinearen Abhängigkeit der Parameter der Übertragungsfunktionen erweitert. In [MAP⁺09] wird von denselben Autoren außerdem ein Verfahren zur Versuchsplanung vorgeschlagen, das die Zahl der zu dieser Modellierungsform benötigten Messungen optimiert.

5.3 Lineares Zustandsraummodell

Die Idee zur Modellierung eines PEMFC-Stacks mit einem rein linearen Zustandsraummodell basiert auf den Erfahrungen bei der Identifikation des Uryson-Modells. Zum einen hat sich dort gezeigt, dass in einem beschränkten Betriebsbereich zumindest die Dynamik des PEMFC-Stacks linear approximiert werden kann und dass 4SID-Algorithmen eine schnelle und komfortable Methode zur Identifikation eines zeitdiskreten linearen Zustandsraummodells darstellen. Zum anderen soll der Nachteil des Uryson-Modells vermieden werden, der hauptsächlich in der aufwändigen Gewinnung der notwendigen Messdaten besteht, die so im normalen Betrieb eines PEMFC-Stacks in einem Fahrzeug nicht auftreten.

Ziel dieses Ansatzes ist ein möglichst einfaches und einfach zu gewinnendes Modell, das in einem Fahrzeug zur modellbasierten Diagnose genutzt werden kann. Dabei wird davon ausgegangen, dass der Stack in seinem normalen Betriebsbereich betrieben wird, womit das Modell das Verhalten des Stack auch nur in diesem Bereich repräsentieren muss.

5.3.1 Voruntersuchungen

Um erste Erfahrungswerte mit einem rein linearen Modell zu sammeln, wurde versucht, mit den beiden kommerziellen 4SID-Implementierungen `n4sid` und `ADAPTx` jeweils ein rein lineares Zustandsraummodell unter Verwendung aller vier Eingangsgrößen mit dem Datensatz des Uryson-Modells zu schätzen. Mit derselben Parametrierung der Verfahren wie im vorigen Abschnitt konnte jedoch bis zur maximalen Ordnung 20 kein brauchbares Modell berechnet werden. Die Simulationsergebnisse

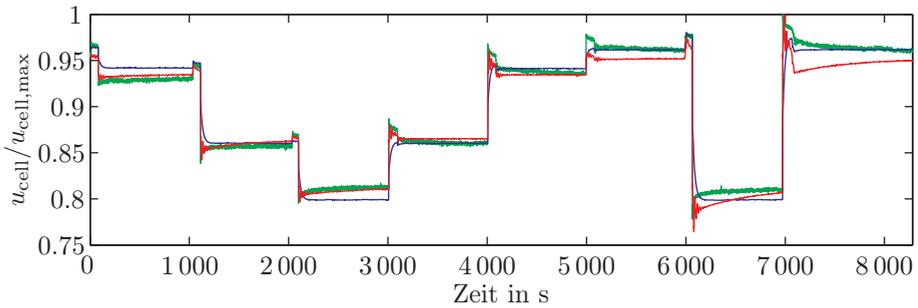


Abbildung 5.22: Simulationsergebnisse mit $T_A = 1$ s für den Versuch 18 (grün) für mit ADAPT_x berechnete rein lineare Zustandsraummodelle erster (blau) und zehnter (rot) Ordnung

wichen stark von den gemessenen Werten ab, teilweise ähnelte jedoch der Verlauf prinzipiell dem der Messungen.

Daher wurde eine in ADAPT_x implementierte Erweiterung genutzt, welche beim Schätzen des HOARX-Modells zusätzlich eine konstante Abweichung der Ausgangsgröße, also eine Nullpunktverschiebung, berücksichtigt. Mit diesem Zusatz gelang die Schätzung von geeigneten Zustandsraummodellen. Die Untersuchungen wurden für maximale Ordnungen bis 20 durchgeführt. Bei der Wahl von 20 als maximale Ordnung ergab die Schätzung mit einem Modell zehnter Ordnung das komplexeste Zustandsraummodell. Doch auch ein Modell erster Ordnung lieferte bereits überraschend gute Ergebnisse. Die Simulationsverläufe dieser beiden Modelle für den Versuch 18 sind in der Abbildung 5.22 dargestellt. Die Ergebnisse reichen nicht an die des Uryson-Modells heran, lassen aber auf gute Ergebnisse in einem kleineren Betriebsbereich um den normalen Arbeitspunkt hoffen.

Für die weiteren Untersuchungen des linearen Zustandsraummodells wie auch für die im folgenden Kapitel beschriebenen Diagnoseansätze wird nur noch ADAPT_x zur Modellerstellung verwendet. Prinzipiell ist der vorgestellte Ansatz jedoch nicht auf diese Implementierung beschränkt. Da sich in den vorigen Untersuchungen herausgestellt hat, dass die Dokumentation der MATLAB-Funktion `n4sid` über den dahinter stehenden Algorithmus nicht mit dem tatsächlich implementierten Algorithmus übereinstimmen kann, wird diese nicht weiter verwendet. Außerdem hat die statistische CVA durch die Verwendung des HOARX-Ansatzes neben der möglichen Berücksichtigung einer Nullpunktverschiebung der Ausgangsgröße den Vorteil, auch mit Daten aus dem geschlossenen Regelkreis zurecht zu kommen, was bei der Funktion `n4sid` zu Problemen führt (vgl. Abschnitt 3.6.1). Daher ist es mit ADAPT_x möglich, Messdaten eines PEMFC-Stacks zu verwenden, die anhand eines Lastzyklus aufgenommen wurden, welcher der Beanspruchung eines PEMFC-Stacks in einem Fahrzeug ähnelt. Damit kann gleichzeitig untersucht werden, inwiefern der Model-

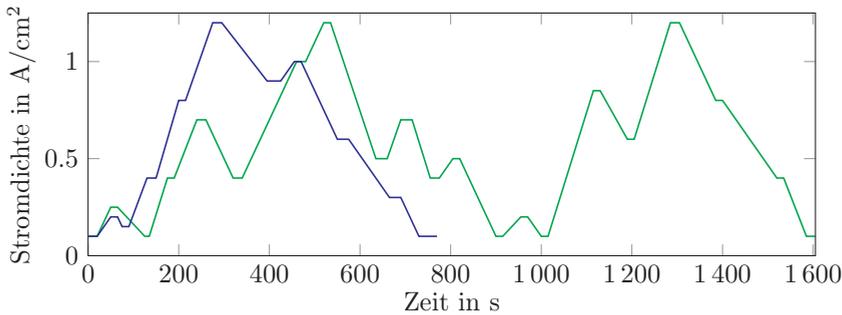


Abbildung 5.23: Identifikationszyklus (grün) und Validationszyklus (blau)

lierungsansatz auch mit realen Daten zurecht kommt. Gelingt dies, so könnte das Modell bei einer Anwendung im Fahrzeug ggf. dem aktuellen Degradationszustand durch erneute Identifikation mit Fahrzeugdaten im Rahmen einer Wartung angepasst werden.

5.3.2 Datensätze

Für diese Arbeit wurden zwei Lastzyklen, je einer zur Identifikation und Validation, entworfen. Typische, im Automobilbereich übliche Fahrzyklen wie der „Neue Europäische Fahrzyklus“ (NEFZ), bei dem ein Geschwindigkeitsprofil für das Fahrzeug vorgegeben ist, konnten nicht verwendet werden, da die zur Verfügung stehenden Stack-Teststände die erforderliche Dynamik bei der Gasversorgung nicht realisieren können. Im späteren Fahrzeugbetrieb werden dynamische Änderungen des Verbrauchs, denen vom PEMFC-System nicht direkt gefolgt werden kann, über die Batterie gepuffert.

Die beiden hier verwendeten Zyklen sind in der Abbildung 5.23 dargestellt. Sie schöpfen die am Teststand realisierbare Dynamik aus und sind an Fahrzyklen angelehnt. Der Identifikationszyklus hat eine Dauer von knapp 30 min, der Validationszyklus ist etwa halb so lang. Die Messungen mit diesen Zyklen wurden an einem PEMFC-Stack des Industriepartners mit 20 Zellen und einer Abtastzeit von $T_A = 1$ s durchgeführt.

Das Schema des linearen PEMFC-Stack-Modells für die Berechnung der mittleren Zellspannung ist mit seinen Eingangsgrößen in der Abbildung 5.24 dargestellt. Bei diesem Ansatz wird der Stack auf dem Teststand entsprechend der zugehörigen optimalen Betriebsstrategie betrieben. Damit sind durch die Wahl der Stromdichte auch alle anderen Eingangsgrößen bestimmt. Der Volumenstrom des Kühlwassers war bei diesen Messungen konstant und wird im Folgenden daher nicht weiter als Eingangsgröße des dynamischen PEMFC-Modells betrachtet.

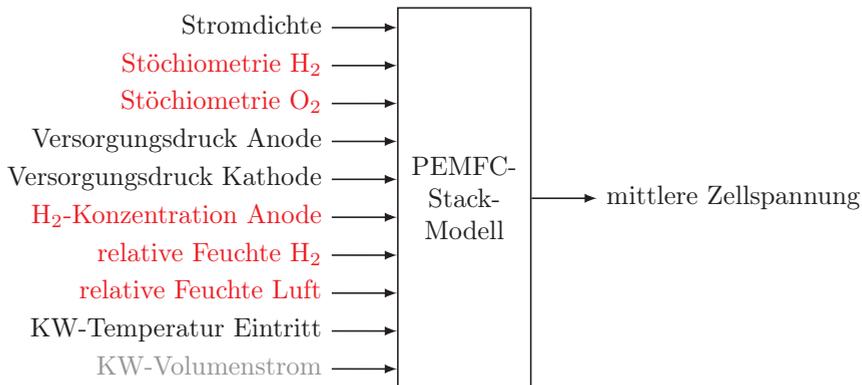


Abbildung 5.24: Schema des linearen PEMFC-Stack-Modells mit Ein- und Ausgangsgrößen, wobei die für die Diagnose variierten Eingangsgrößen rot dargestellt sind (KW steht für Kühlwasser)

Größe	Abweichung in % des Nennwerts nach				
	oben 1	oben 2	unten 1	unten 2	unten 3
Stöchiometrie H ₂	144	-	94	85	-
Stöchiometrie O ₂	182	-	94	85	-
H ₂ -Konzentration Anode	125	-	75	50	-
relative Feuchte H ₂	200	-	40	-	-
relative Feuchte Luft	214	286	86	57	43

Tabelle 5.14: Fehlerstufen der fünf ausgewählten Eingangsgrößen

Im Hinblick auf die Diagnoseansätze, die im folgenden Kapitel vorgestellt werden und die diese Datensätzen ebenfalls nutzen, wurden zusätzlich die Eingangsgrößen, die im Fahrzeug nicht oder nur sehr aufwändig zu messen sind, zusätzlich während einiger Zyklen variiert. Diese fünf Eingangsgrößen sind in der Abbildung 5.24 rot dargestellt. Die Variationen beschränken sich auf den Betriebsbereich, in dem der Stack ohne Schädigungen betrieben werden kann und stellen die später im Rahmen der Diagnose (vgl. Kapitel 6) zu erkennenden Fehler dar.

Bei den Messungen wurden zuerst der Identifikationszyklus und später der Validationszyklus vielfach hintereinander angefahren. Ausgehend vom Normalfall, der im Folgenden auch als Nennbetrieb bezeichnet wird, wurden dann während einiger dieser Zyklen Abweichungen vom optimalen Sollwert in den fünf ausgewählten Eingangsgrößen vorgegeben. Für diese Abweichungen wurden vor den Messungen die in der Tabelle 5.14 zusammengefassten Fehlerstufen für jede der Eingangsgrößen sowohl nach oben als auch nach unten so definiert, dass keine den Stack schädigenden

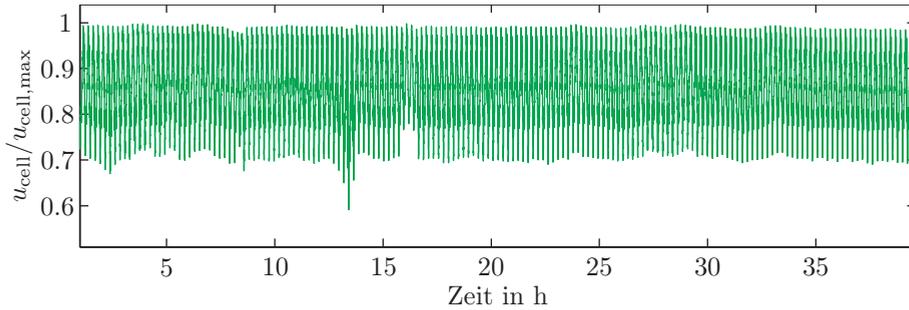


Abbildung 5.25: Gemessene mittlere Zellspannung im Validationsdatensatz. Aufgrund der großen Datenmenge entspricht jede der hochfrequent auftretenden Spitzen im Signalverlauf einem Zyklus.

Betriebszustände auftreten. Mit Ausnahme der beiden Feuchten wurden alle Abweichungen nur einzeln, d. h. getrennt von einander, am Teststand umgesetzt. Bei den beiden Feuchten wurden neben den Abweichungen in einer Eingangsgröße alle möglichen Kombinationen von Abweichungen der beiden Eingangsgrößen betrachtet, da hier aufgrund des Wassertransports über die Membran Quereinflüsse erwartet wurden.

Zwischen den Messungen mit Abweichungen in verschiedenen Eingangsgrößen wurde stets der Zyklus zweimal im Nennbetrieb abgefahren. Bei den Abweichungen wurde zunächst der Wert der entsprechenden Eingangsgröße über die Dauer eines Zyklus vom eigentlichen Nominalwert zu Beginn auf die gewünschte prozentuale Abweichung am Ende linear angepasst, d. h. es wurden schleichend auftretende Fehler betrachtet. Die betrachtete Stufe der Abweichung wurde im Anschluss über einen ganzen Zyklus konstant gehalten und im darauf folgenden Zyklus entweder auf die nächste Stufe verändert oder zurück zum Nennbetrieb gebracht. Insgesamt ergeben sich daraus der Identifikationsdatensatz mit 291 275 Messpunkten (über 80 h) und der Validationsdatensatz mit 142 584 Messpunkten (knapp 40 h). Da die einzelnen Messungen pro Zyklus einzeln abgelegt wurden, ist auch eine getrennte Betrachtung beispielsweise aller Nennbetriebszyklen möglich.

Für die durchgeführten Untersuchungen, insbesondere für die Diagnoseansätze, hat es sich als sinnvoll herausgestellt, die Ein- und Ausgangsgrößen im Datensatz auf den jeweiligen Mittelwert des Identifikationsdatensatzes zu normieren. Zum besseren Vergleich der Simulationsergebnisse wird allerdings in diesem Kapitel die mittlere Zellspannung wie beim Uryson-Modell bezogen auf die maximale aufgetretene Zellspannung dargestellt. In der Abbildung 5.25 ist die mittlere Zellspannung des Validationsdatensatzes aufgetragen, die zugehörigen, stets im Normalbetrieb gehaltenen Eingangsgrößen finden sich auf ihren Mittelwert normiert in der Abbildung 5.26. Die

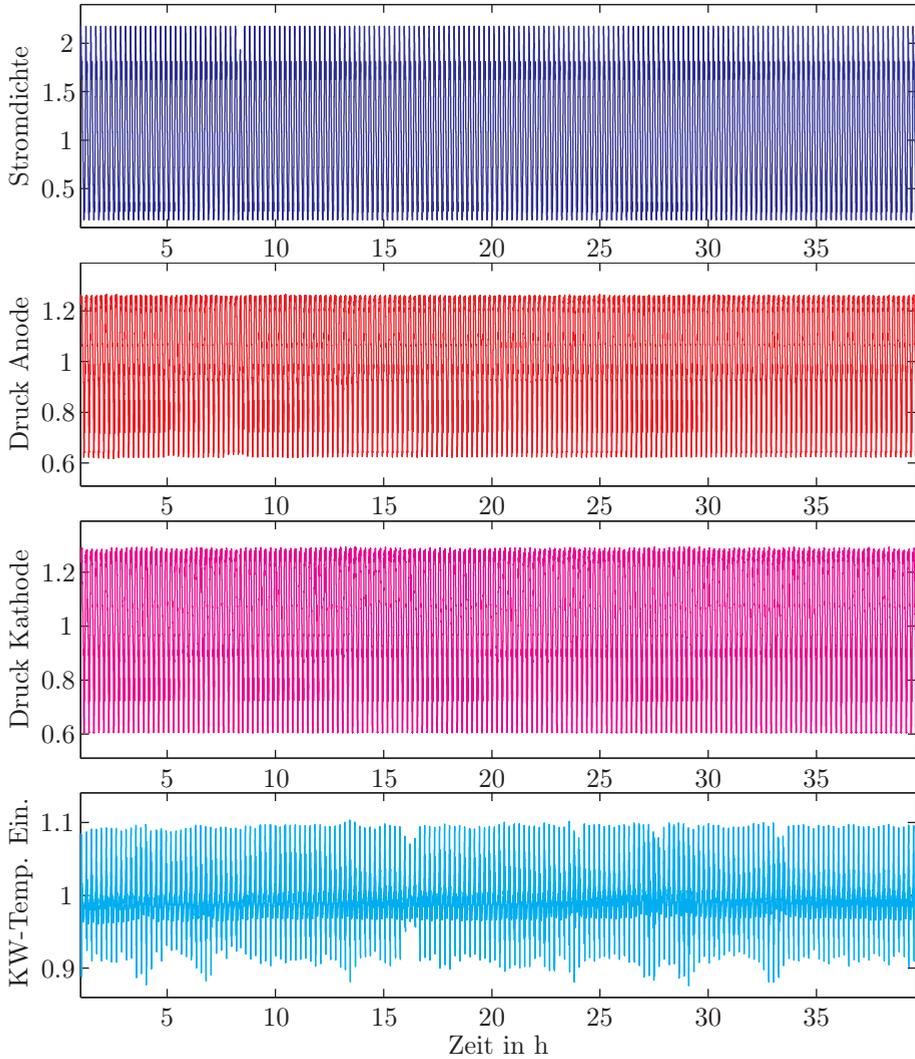


Abbildung 5.26: Normierte Verläufe der vier stets optimal eingestellten Eingangsgrößen für den Validationsdatensatz. Aufgrund der großen Datenmenge entspricht jede der hochfrequent auftretenden Spitzen im Signalverlauf einem Zyklus.

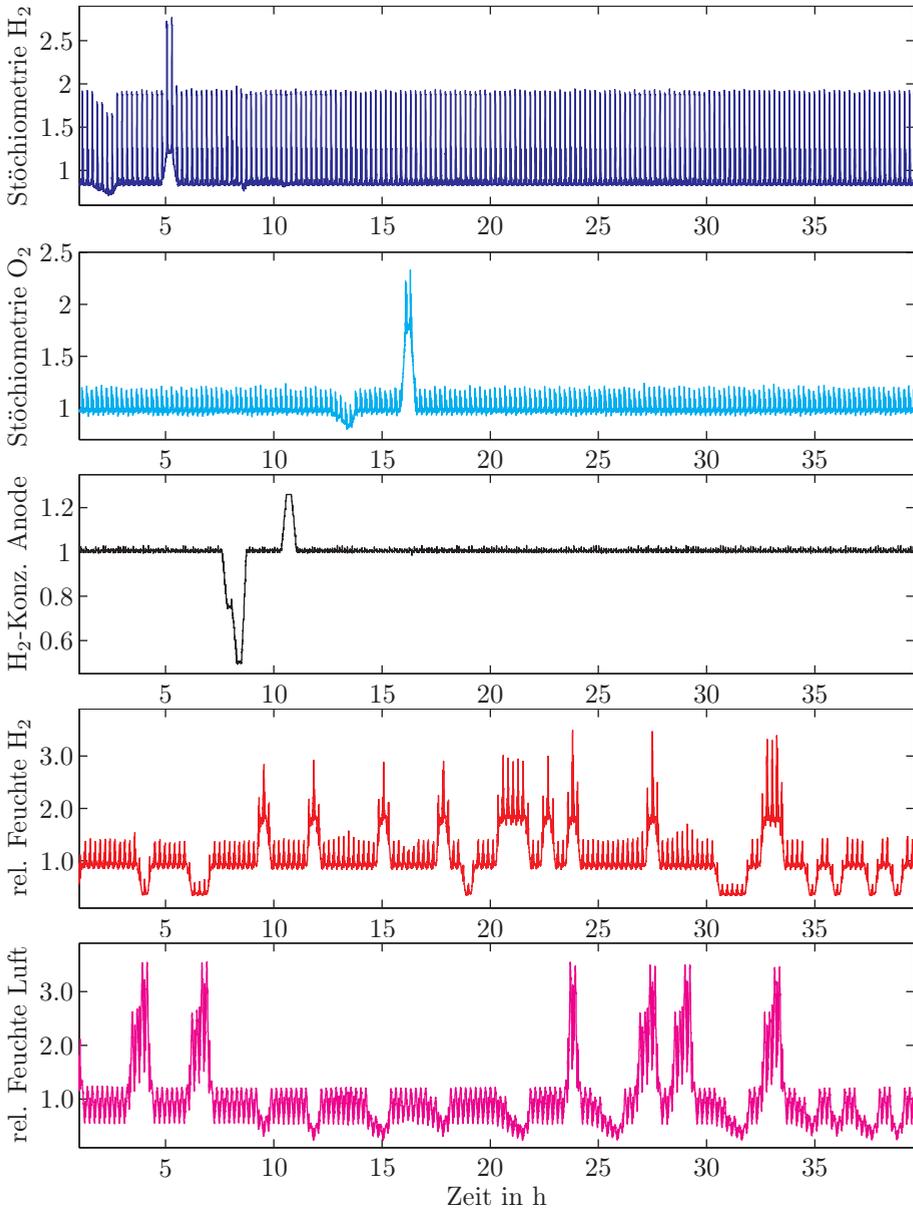


Abbildung 5.27: Normierte Verläufe der fünf vom Nennbetrieb variierten Eingangsgrößen für den Validationsdatensatz. Aufgrund der großen Datenmenge entspricht jede der hochfrequent auftretenden Spitzen im Signalverlauf einem Zyklus.

fünf über den Nennbetrieb hinaus variierten Eingangsgrößen des Validationsdatensatzes sind normiert in der Abbildung 5.27 dargestellt.

Aufgrund der großen Datenmenge sind die einzelnen Zyklen in den Bildern nur noch als Spitzen erkennbar, jedoch sieht man gut die Bereiche, in denen die fünf Eingangsgrößen variiert wurden. Die Messung der mittleren Zellspannung zeigt wenig erkennbaren Einfluss der variierten Betriebsparameter außerhalb des Nennbetriebs, die Leistungsfähigkeit des Stacks wird somit durch die meisten dieser Abweichungen von der optimalen Betriebsstrategie kaum verändert. Ausnahmen sind ein Absinken der minimalen Zellspannungen zwischen 13 und 14 Stunden durch das Absinken der Sauerstoffstöchiometrie sowie das Ansteigen der minimalen Zellspannungen nach etwa 16 Stunden durch die erhöhte Sauerstoffstöchiometrie. Als Detailansicht sind in den Abbildungen 5.28 und 5.29 beispielhaft einige Bereiche mit den Abweichungen in den fünf ausgewählten Eingangsgrößen zusammen mit den jeweils zugehörigen Messdaten der mittleren Zellspannung nochmals dargestellt. Auch hier wird nochmals der im Vergleich zur Stromdichte sehr geringe Einfluss der variierten Eingangsgrößen auf die mittlere Zellspannung deutlich.

5.3.3 Vorgehensweise und Ergebnisse

In einem ersten Schritt wurden nur die Nennbetriebszyklen der beiden Datensätze für die Berechnung und Bewertung eines Simulationsmodells mit `ADAPTx` herangezogen. Da es sich bei der hier gewählten Vorgehensweise um eine Approximation eines nichtlinearen Systems durch ein lineares Modell ohne physikalische Analyse handelt, sind Aussagen über einen Durchgriff im Zustandsraummodell schwierig. Motiviert durch den Uryson-Modellansatz und den dort bereits geschilderten Effekten wird jedoch ein Durchgriff beim PEMFC-Stack erwartet. Trotzdem wurden zum Vergleich bei der Identifikation beide Möglichkeiten in Betracht gezogen. Da die Identifikation trotz des großen Datensatzes nur eine knappe halbe Minute⁴ benötigt, ist die Berechnung verschiedener Varianten problemlos möglich.

Analog zu den Voruntersuchungen mit den Datensätzen des Uryson-Modells wurden maximale HOARX-Ordnungen bis 20 untersucht, wobei für die HOARX-Modelle auch hier stets die maximal möglich Ordnung vom Algorithmus gewählt wurde. In der Abbildung 5.30 sind die zugehörigen als optimal berechneten Ordnungen der Zustandsraummodelle dargestellt. Wie schon beim Uryson-Modell reichen auch hier bereits Modelle sehr geringer Ordnung aus, um die Messdaten genau nachzubilden. In der Tabelle 5.15 sind daher die statistischen Kenndaten des Simulationsfehlers für die Validationsdaten nur für die Modelle erster bis dritter Ordnung zusammengetragen.

⁴Die Berechnungen wurden auf demselben Rechner wie beim Uryson-Modell mit `MATLAB 2007a` und `ADAPTx` Version 3.5.5 für `MATLAB 7` durchgeführt, die Zeit wurde über 30 Durchläufe mit steigender maximaler Ordnung des HOARX-Modells von 1 bis 30 gemittelt.

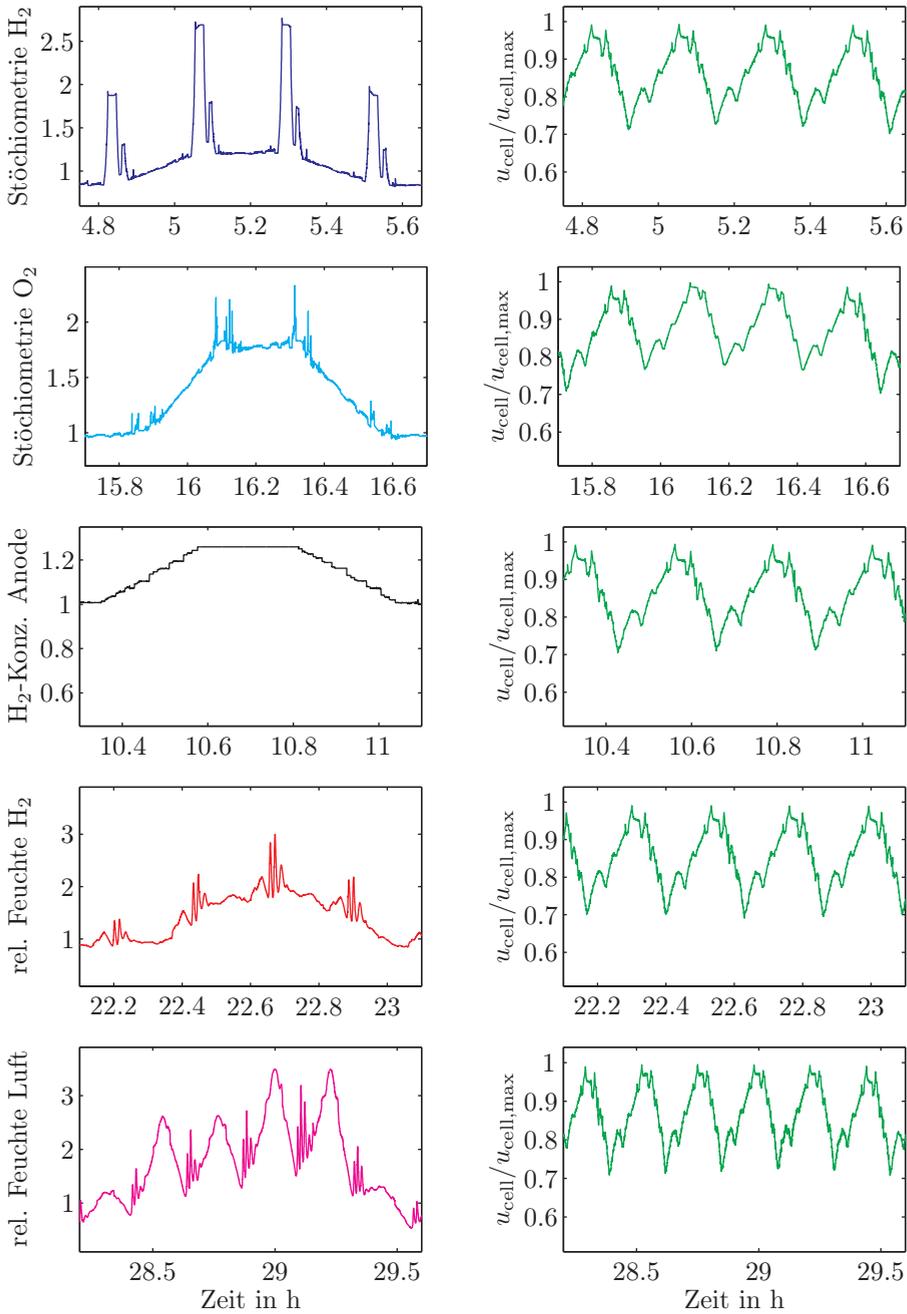


Abbildung 5.28: Detailansichten der normierten variierten Eingangsgrößen für den Validationsdatensatz bei Abweichungen nach oben und zugehörige Messwerte der mittleren Zellspannung

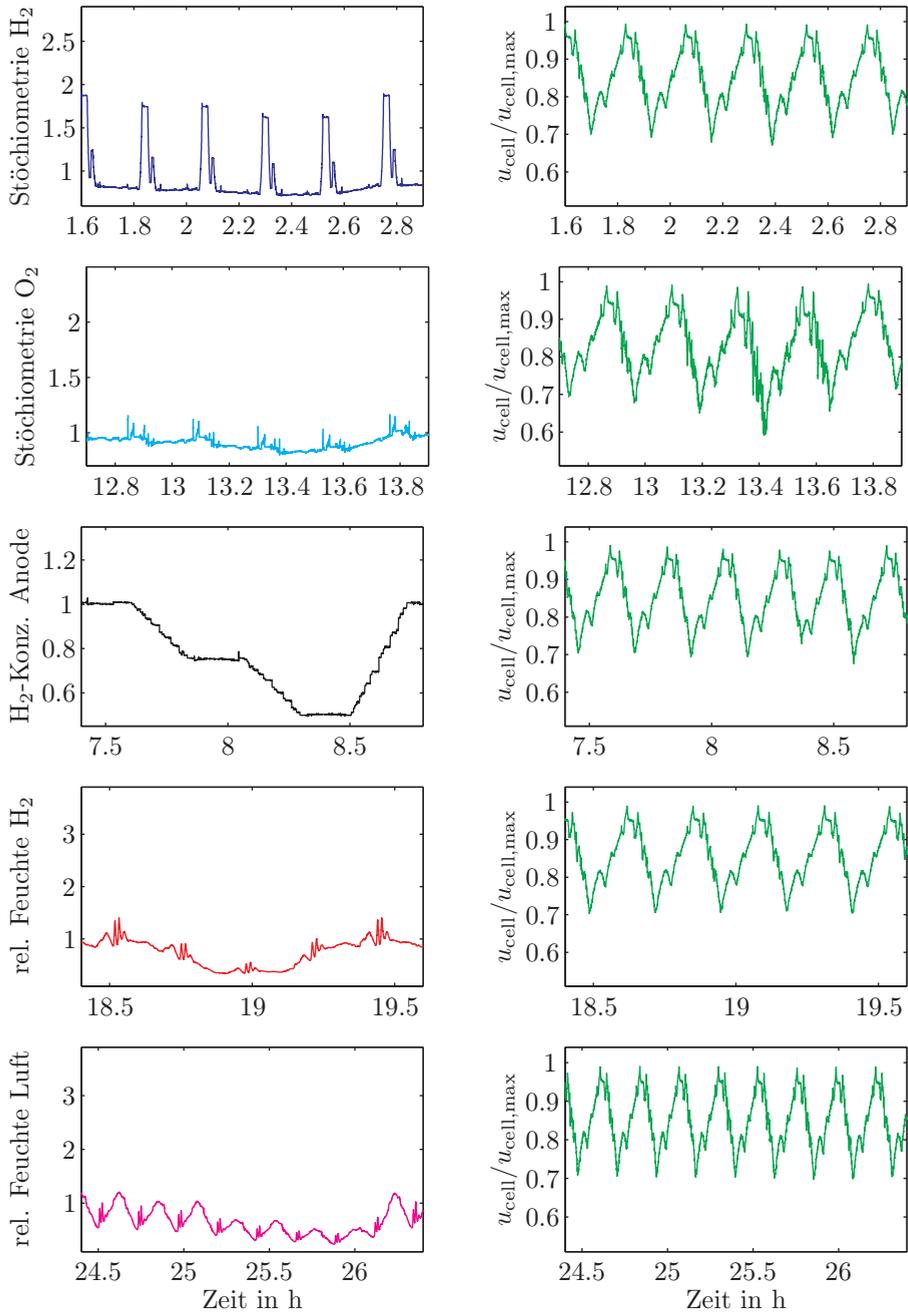


Abbildung 5.29: Detailansichten der normierten variierten Eingangsgrößen für den Validationsdatensatz bei Abweichungen nach unten und zugehörige Messwerte der mittleren Zellspannung

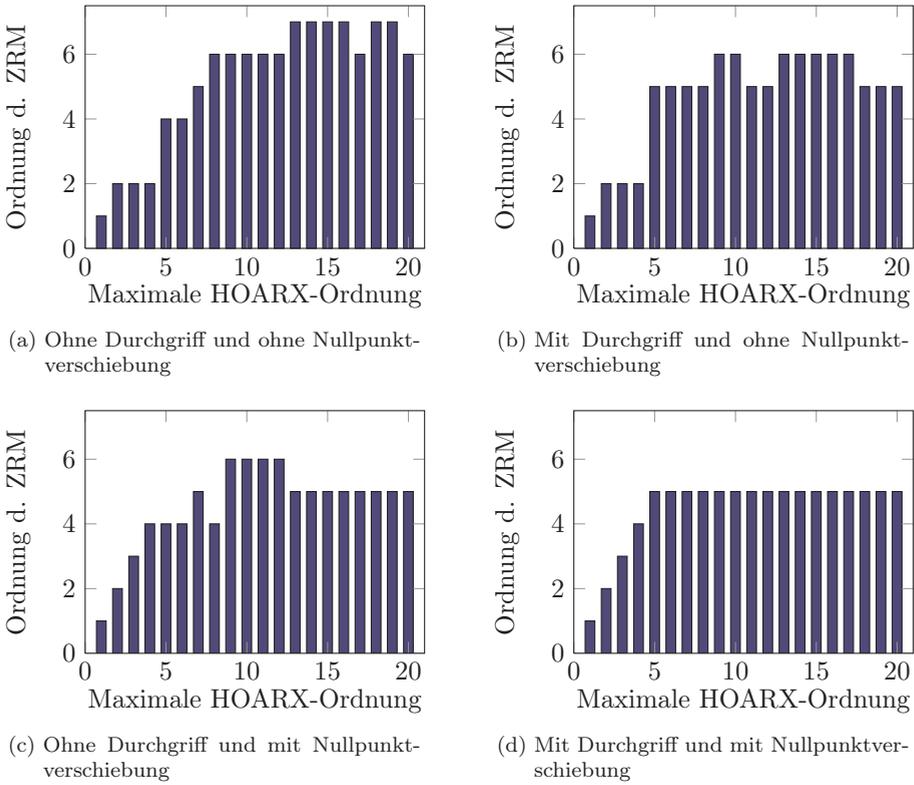


Abbildung 5.30: Mit $ADAPT_x$ berechnete optimale Ordnungen des Zustandsraummodells in Abhängigkeit der maximalen HOARX-Ordnung

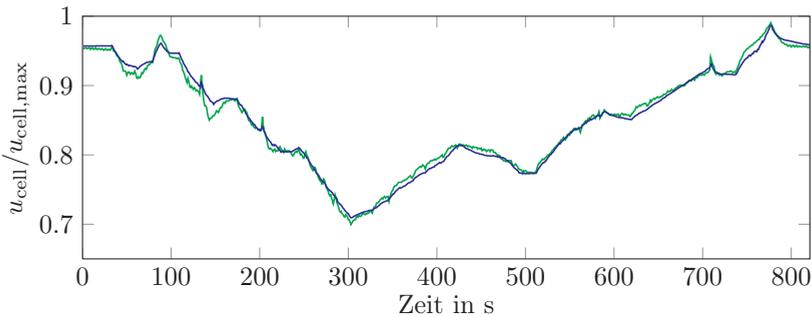


Abbildung 5.31: Simulationsverlauf mit dem Modell erster Ordnung mit Durchgriff und Nullpunktverschiebung (blau) für einen der Nennbetriebszyklen der Validationsdaten (grün)

HOARX- Ordnung	ohne Durchgriff		mit Durchgriff	
	Mittelwert	Standardabw.	Mittelwert	Standardabw.
1	$-1.23 \cdot 10^{-3}$	$13.68 \cdot 10^{-3}$	$0.67 \cdot 10^{-3}$	$9.53 \cdot 10^{-3}$
2	$1.10 \cdot 10^{-3}$	$9.86 \cdot 10^{-3}$	$1.53 \cdot 10^{-3}$	$8.70 \cdot 10^{-3}$
3	$1.91 \cdot 10^{-3}$	$9.88 \cdot 10^{-3}$	$3.58 \cdot 10^{-3}$	$8.53 \cdot 10^{-3}$

(a) Ohne Nullpunktverschiebung

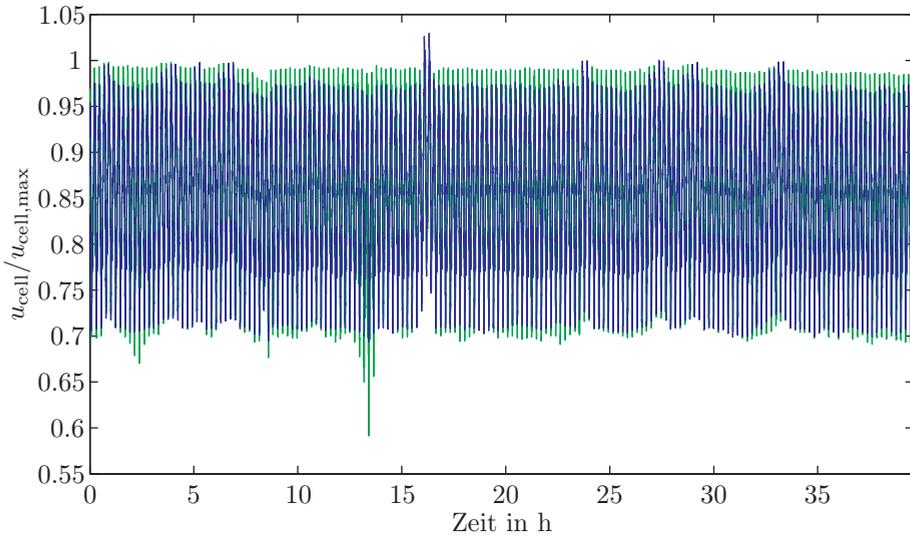
HOARX- Ordnung	ohne Durchgriff		mit Durchgriff	
	Mittelwert	Standardabw.	Mittelwert	Standardabw.
1	$33.63 \cdot 10^{-3}$	$105.63 \cdot 10^{-3}$	$0.39 \cdot 10^{-3}$	$9.37 \cdot 10^{-3}$
2	$1.39 \cdot 10^{-3}$	$10.05 \cdot 10^{-3}$	$1.95 \cdot 10^{-3}$	$8.82 \cdot 10^{-3}$
3	$3.25 \cdot 10^{-3}$	$10.21 \cdot 10^{-3}$	$3.62 \cdot 10^{-3}$	$8.44 \cdot 10^{-3}$

(b) Mit Nullpunktverschiebung

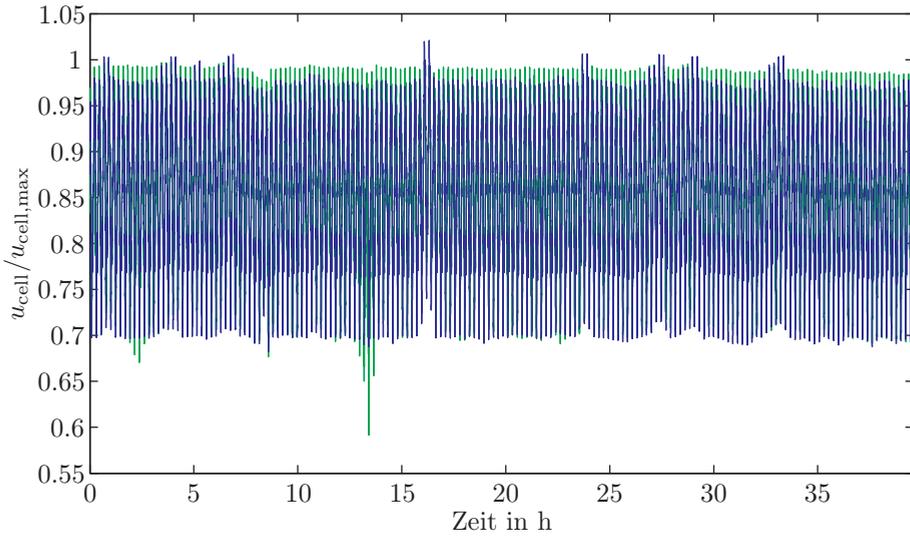
Tabelle 5.15: Statistische Daten der Validationszyklen im Nennbetrieb

Man sieht deutlich, dass die Modelle mit Durchgriff bessere Ergebnisse liefern als die ohne. Das beste Resultat wird mit dem Modell erster Ordnung mit Durchgriff und mit berücksichtigter Nullpunktverschiebung der Ausgangsgröße erzielt. Der mit diesem Modell simulierte Verlauf eines Nennbetriebszyklus aus den Validationsdaten sowie die zugehörigen Messdaten sind in der Abbildung 5.31 zu sehen. Die Messdaten werden durch das Modell sehr gut nachgebildet, womit das Modellierungsziel eines sehr einfachen Modells für den Nennbetrieb erfüllt ist.

Um die Grenzen dieser linearen Näherung für das nichtlineare Verhalten des PEMFC-Stacks zu testen, wurde zusätzlich auch der komplette Identifikationsdatensatz zur Modellgewinnung herangezogen und die Daten anschließend am vollständigen Validationsdatensatz getestet. Die Vorgehensweise war dabei entsprechend der für die Nennbetriebszyklen. Wie zuvor konnten die besten Ergebnisse ebenfalls mit einem Modell mit Nullpunktverschiebung und Durchgriff erzielt werden. Auch hier zeigt ein Modell erster Ordnung bereits gute Ergebnisse, wie in der Abbildung 5.32(a) zu sehen ist. Der Mittelwert des Simulationsfehlers beim Validationsdatensatz beträgt $1.68 \cdot 10^{-3}$, die zugehörige Standardabweichung $11.73 \cdot 10^{-3}$. Die nicht dargestellten Modelle zweiter und dritter Ordnung zeigen vergleichbare Ergebnisse. Eine leichte Verbesserung ist mit einem Modell vierter Ordnung erzielbar, für das sich Mittelwert und Standardabweichung zu $1.98 \cdot 10^{-3}$ bzw. $10.97 \cdot 10^{-3}$ ergeben. Die geringere Varianz schlägt sich in einem leicht besseren Verlauf (vgl. Abbildung 5.32(b)) nieder. Für beide Modelle ist in der Abbildung 5.33 der Simulationsverlauf für denselben Nennbetriebszyklus wie in der Abbildung 5.31 aufgetragen.

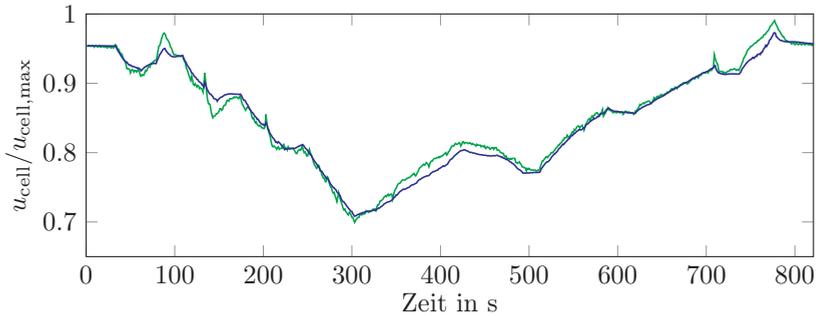


(a) Ordnung 1

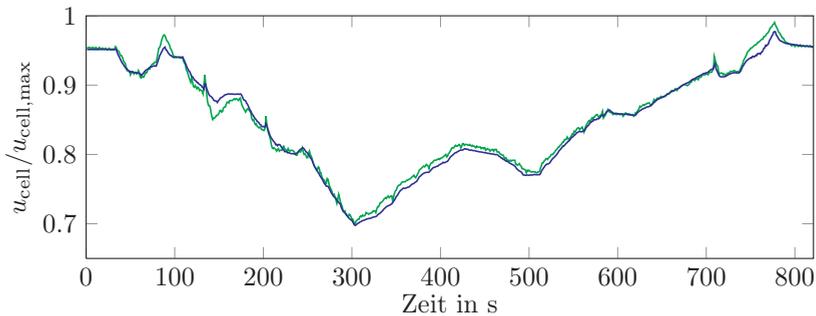


(b) Ordnung 4

Abbildung 5.32: Vergleich der Simulationsverläufe von Modellen erster bzw. vierter Ordnung mit Durchgriff und Nullpunktverschiebung (blau) für den Validationsdatensatz (grün). Aufgrund der großen Datenmenge entspricht jede der hochfrequent auftretenden Spitzen im Signalverlauf einem Zyklus.



(a) Ordnung 1



(b) Ordnung 4

Abbildung 5.33: Vergleich der Simulationsverläufe von Modellen erster bzw. vierter Ordnung mit Durchgriff und Nullpunktverschiebung (blau) für einen der Nennbetriebszyklen der Validationsdaten (grün)

Wie man an den Simulationsverläufen sieht, wird auch hier der Normalbetrieb sehr gut durch die Modelle nachgebildet. Dort, wo durch die Abweichungen der Eingangsgrößen ein Absinken oder Ansteigen der minimalen bzw. maximalen Zellspannung sehr deutlich auftritt, kommen sie jedoch an ihre Grenzen. Als eine mögliche Ursache wurde die relativ geringe Gewichtung dieser Messdatenabschnitte im Vergleich zum kompletten Datensatz vermutet, der sehr stark durch die vielen Kombinationen der Feuchte-Abweichungen dominiert wird (vgl. auch Abbildung 5.27). Daher wurden dieselben Untersuchungen auch mit reduzierten Datensätzen durchgeführt, die nur die einzeln auftretenden Fehler in allen Größen enthalten. Allerdings zeigte sich auch mit diesen Daten dasselbe Bild. Eine Erhöhung der Ordnung schrittweise bis auf 30 brachte ebenfalls keine Verbesserung.

Die Abweichungen müssen daher auf die Nichtlinearität des PEMFC-Stacks zurückgeführt werden, die durch ein lineares Modell nicht mehr dargestellt werden kann. In den meisten Fällen ändert sich die Spannung nur in Randbereichen, d. h. bei sehr

hohen oder sehr niedrigen Stromdichten, für alle anderen Werte liefert der Stack nahezu dieselbe Spannung wie im Nennbetrieb (vgl. auch Abbildungen 5.28 und 5.29). Dieser nichtlineare Effekt kann durch das Modell nur begrenzt nachgebildet werden, weshalb dort größere Fehler entstehen. Diese sind beim Modell vierter Ordnung etwas geringer als beim Modell erster Ordnung. Mit Ausnahme dieser wenigen Stellen ist über weite Bereiche jedoch auch hier bei beiden Modellen eine gute Übereinstimmung zwischen Simulation und Messung gegeben.

5.3.4 Bewertung des Modellansatzes

Aus diesen Untersuchungen lässt sich schließen, dass bereits mit sehr einfachen linearen Modellen der mittlere Zellspannungsverlauf eines PEMFC-Stacks im Betrieb eines Fahrzeugs nachgebildet werden kann. Die Gültigkeit eines solchen Modells ist jedoch auf einen Bereich um den Nennbetrieb beschränkt. Solange der Betrieb im Nennbereich sichergestellt wird, eignet sich ein Modell erster Ordnung aufgrund seiner Einfachheit sehr gut auch zur Simulation bzw. Prädiktion der Spannung des PEMFC-Stacks im Fahrzeug. Mit einem Modell vierter Ordnung wurde eine leichte Verbesserung bei der Reproduktion der Spannung außerhalb des Nennbetriebs erzielt. Für eine Anwendung im Fahrzeug wäre jedoch abzuwägen, ob diese Verbesserungen die höheren Anforderungen an die Rechenleistung rechtfertigen.

Bei den Untersuchungen hat sich dabei die aus dem vorigen Ansatz gewonnene Vermutung bestätigt, dass der PEMFC-Stack am Besten durch ein Modell mit Durchgriff modelliert wird. Außerdem hat auch die Schätzung einer zusätzlichen Nullpunktverschiebung, die als einfacher zusätzlicher Summand in der Ausgangsgleichung des Zustandsraummodells berücksichtigt werden kann, eine Verbesserung der Simulationsgüte gebracht. Aufgrund der sehr einfachen und schnellen Identifikation stellt dieser Ansatz eine sehr gute Möglichkeit der Modellierung dar, die durch die 4SID-Methode vollständig automatisierbar ist. Damit wäre es auch möglich, ein solches Modell in regelmäßigen Abständen aus aufgezeichneten Messdaten, beispielsweise im Rahmen einer Inspektion des Fahrzeugs, neu zu identifizieren. So könnte Alterungseffekten Rechnung getragen werden, die im Rahmen dieser Arbeit nicht betrachtet wurden, ohne dass diese speziell modelliert werden müssten.

5.4 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurden zwei Modellansätze für PEMFC-Stacks vorgeschlagen, die auf einer Identifikation aus Messdaten des zu beschreibenden Stacks basieren. Im Gegensatz zu den meisten in der Literatur vorgeschlagenen Modellen beschränken sich

diese Modelle auf die Nachbildung des Ein-/Ausgangsverhaltens des PEMFC-Stacks. Dadurch sind beide Modelle sehr einfach und beanspruchen wenig Rechenzeit.

Während beim Uryson-Modell der Identifikationsaufwand insbesondere durch die benötigten Messungen der stationären Betriebspunkte sehr hoch ist, kann das lineare Zustandsraummodell auch sehr gut aus Fahrzyklusdaten gewonnen werden. Durch die Verwendung der 4SID-Implementierung ADAPT_x, die auf einem HOARX-Ansatz basiert, ist auch die Verwendung von Messdaten aus dem geschlossenen Regelkreis problemlos möglich. Der höhere Identifikationsaufwand beim Uryson-Modell erlaubt hingegen einen Einsatz dieses Modells in Betriebsbereichen, in denen das rein lineare Zustandsraummodell nicht mehr mit derselben Genauigkeit das Verhalten des Stack nachbilden kann.

Beide Modellansätze sind somit für ihren jeweiligen Aufgabenbereich sehr gut geeignet. Das Uryson-Modell stellt eine gute Wahl dar, wenn ein möglichst einfaches und schnelles Modell des PEMFC-Stacks benötigt wird, um beispielsweise in einer Simulationsumgebung des elektrischen Antriebsstrangs den Stack zu repräsentieren. Das Zustandsraummodell hingegen kann für modellbasierte Verfahren zum Betrieb des Stack im Fahrzeug herangezogen werden, solange dabei die Einhaltung des Nennbetriebs sichergestellt wird. Dies kann beispielsweise mithilfe von Diagnoseansätzen geschehen, wie sie im folgenden Kapitel vorgestellt werden.

Kapitel 6

Diagnoseansätze für PEMFC-Systeme

Je nach Aufbau eines PEMFC-Systems können nicht alle Eingangsgrößen des Stacks gemessen werden. Da der Stack die teuerste Komponente des PEMFC-Systems darstellt, die empfindlich auf Abweichungen vom erlaubten Betriebsbereich reagiert, muss die Einhaltung des Sollbereichs dieser Werte auf andere Weise sichergestellt werden. Dass diese Thematik für die Kommerzialisierung von Brennstoffzellen wichtig ist, zeigt auch das in diesem Jahr veranstaltete „International Symposium on Diagnostic Tools for Fuel Cell Technologies“ [DFC09].

Insbesondere im Automobilbereich, wo aufgrund des beschränkten Platzes und des hohen Kostendrucks so wenig Sensoren wie möglich verbaut werden und auf der anderen Seite der Stack aufgrund der schwankenden Leistungsanforderungen sehr dynamisch betrieben wird, stellt eine solche Überwachung der Stack-Eingangsgrößen eine wichtige Komponente für zukünftige Betriebsführungskonzepte dar. Kann man die Werte dieser messtechnisch nicht erfassbaren Größen schätzen, so kann in zukünftigen Betriebsführungsstrategien in geeigneter Weise auf Abweichungen reagiert werden.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden die relativen Feuchten der Betriebsgase, die Stöchiometrien sowie der Anteil des Wasserstoffs im Anodengas (in der Abbildung 5.24 rot gekennzeichnet) als im Fahrzeug nicht messbar angenommen. Für Feuchten existieren keine Sensoren, die dynamisch die Feuchte messen können und dabei preislich für ein Fahrzeug in Frage kommen. Auch der Partialdruck des Wasserstoffs, aus dem der Anteil des Wasserstoffs im Anodengas bestimmt werden könnte, ist messtechnisch in einem Fahrzeug nicht ermittelbar. Da im Fahrzeug, wie im Schema des PEMFC-Systems in der Abbildung 4.3 bereits gezeigt, auf der Brenngasseite der Wasserstoff rezykliert wird und der Anteil des Wasserstoffs im Anodengas nicht bekannt ist, kann auch die Stöchiometrie des Wasserstoffs nicht gemessen werden,

selbst wenn man den Volumenstrom des Gases durch die Anode messen würde. Aus Kostengründen soll jedoch auf diesen Volumenstromsensor verzichtet werden, ebenso auch auf der Kathodenseite, womit auch dort die Stöchiometrie nicht bekannt ist.

Da eine Implementierung geeigneter Schätzer in einem Fahrzeug nur mit möglichst einfachen Modellen möglich ist, wurden zwei Ansätze auf Basis der linearen Zustandsraummodelle entwickelt. In beiden Fällen wird der Stack in Kombination mit einem geeigneten Modell als Sensor für die messtechnisch nicht erfassbaren Größen verwendet. Die beiden Ansätze werden im Abschnitt 6.3 vorgestellt. Zuvor werden im Abschnitt 6.1 in einem kurzen Überblick existierende Ansätze für die Diagnose bei PEMFC-Stacks und im Abschnitt 6.2 die verwendeten Datensätze vorgestellt. Die auf Basis dieser Datensätze durchgeführten Untersuchungen und die erzielten Ergebnisse werden im Abschnitt 6.4 verglichen und bewertet. Den Abschluss des Kapitels bildet eine kurze Zusammenfassung im Abschnitt 6.5.

6.1 Existierende Ansätze zur PEMFC-Diagnose

Wie schon bei den Simulationsmodellen variiert auch bei den Diagnoseansätzen für PEMFC-Stacks die Bandbreite der Verfahren mit der Zielsetzung des jeweiligen Diagnoseansatzes. Viele Ansätze in der Literatur zielen darauf ab, Schäden, wie beispielsweise Wasserstoffverluste (z. B. [ISM08]), oder unerwünschte Zustände im Stack zu erkennen. Ein häufig untersuchter Fehler ist dabei die Ansammlung von Flüssigwasser in den porösen Elektrodenstrukturen, der z. B. in [HLN03, SLH05] betrachtet wird. Die Ansätze in [BTSM04, FDN⁺06] verwenden die Impedanzspektroskopie, um den aktuellen Befeuchtungszustand einer Brennstoffzelle ermitteln zu können.

Für die technische Anwendung geschickter ist dafür der in [Sch06] vorgestellte Ansatz, der die Leistungselektronik im PEMFC-System dazu nutzt, durch speziell überlagerte Signale den Feuchtezustand der Membran zu beobachten, da dies im normalen Betrieb möglich ist. Einen ähnlichen Ansatz nutzt die sogenannte „total harmonic distortion analysis“¹ (THDA), welche in [RPP⁺06] vorgestellt wird und den Strom mit Schwingungen diskreter Frequenzen überlagert. Der Diagnoseansatz nutzt die Auswertung der durch den Stack erzeugten harmonischen Oberwellen im gemessenen Spannungsverlauf.

Auch der modellbasierte Ansatz in [HPK04] dient zur Detektion von Wasser an der Anode. Zusätzlich wird mit dem dort vorgeschlagenen Fuzzy-Modell-Ansatz auch die Ansammlung von Stickstoff bei der Diagnose berücksichtigt. Im Gegensatz dazu wird in [XTSD06] ein modellbasierter Ansatz dazu verwendet, das Austrocknen der Mem-

¹engl. für vollständige Klirrfaktoranalyse

bran zu detektieren. Desweiteren wird bei diesem auf statistischer Auswertung der Spannungsdifferenz von realem System und Referenzmodellen basierenden Ansatz auch eine Unterversorgung mit Brenngas sowie eine defekte Zellmembran berücksichtigt. Aufgrund der vielfach auszuführenden Simulationsläufe mit verschiedenen Parametrierungen des Referenzmodells ist dieser Ansatz jedoch sehr rechenaufwändig und für eine Anwendung in einem Fahrzeug nicht geeignet.

In [NK04] wird ein Ansatz vorgeschlagen, der eine ähnliche Diagnoseaufgabe verfolgt, wie sie im Folgenden untersucht wird. Dort wird ein Fuzzy-Cluster-Ansatz zur Detektion von verschiedenen Fehlerzuständen einer PEMFC vorgeschlagen. Die Fuzzy-Cluster werden auf Basis von Modellen der Polarisationskurve gebildet. Der nur an Simulationen entwickelte Ansatz wurde in [Pec06, BPNK06, BPNK07] anhand der Messdaten eines Stacks für Abweichungen in verschiedenen Eingangsgrößen optimiert und validiert.

Durch die benötigte Polarisationskurve ist der Ansatz für eine Diagnose im normalen Betrieb einer Brennstoffzelle jedoch nicht geeignet. Daher wurden Untersuchungen durchgeführt, ob der Uryson-Modellansatz aus Abschnitt 5.2 für die Fuzzy-Cluster-Analyse nutzbar ist (vgl. auch [Vor06]). Dazu wurden mit einem ähnlichen Messprogramm wie für die Modellierung Messdaten eines Stacks aufgezeichnet. Allerdings wurde dann nach der Erstellung des Kennfelds nicht eine Übertragungsfunktion pro Eingang für alle Betriebspunkte geschätzt, sondern für jeden Betriebspunkt einzelne Übertragungsfunktionen ermittelt. Die Parameter dieser Übertragungsfunktionen sollten dann als Basis für die Fuzzy-Cluster-Analyse dienen. Allerdings zeigten die Parameter keine direkt für die Diagnose nutzbare Abhängigkeit vom Betriebspunkt. Auch wäre für eine Überwachung im Betrieb eines PEMFC-Stacks eine ständige Neuberechnung der Übertragungsfunktionen notwendig, die einen relativ hohen Rechenaufwand erfordert. Daher wurde dieser Ansatz nicht weiter verfolgt.

6.2 Datensätze

Beide in diesem Kapitel vorgestellten Ansätze wurden mit den im Abschnitt 5.3.2 beschriebenen Datensätzen untersucht, allerdings wurden zusätzlich auch die Druckabfälle über Anode und Kathode sowie die Temperatur des Kühlwasser beim Austritt aus dem Stack als Ausgangsgrößen verwendet. Die Verläufe dieser drei Ausgangsgrößen sind für den Validationsdatensatz in der Abbildung 6.1 dargestellt.

Auch bei diesen Ausgangsgrößen sind, wie schon bei der mittleren Zellspannung, die Auswirkungen der variierten Eingangsgrößen bis auf wenige Ausnahmen nur gering oder sogar überhaupt nicht erkennbar. In den beiden Druckdifferenzen spiegeln sich neben den veränderten Volumenströmen durch erhöhte und verringerte Stöchiometriewerte nur relativ schwach noch die Erhöhungen der jeweiligen Gasfeuchte nieder.

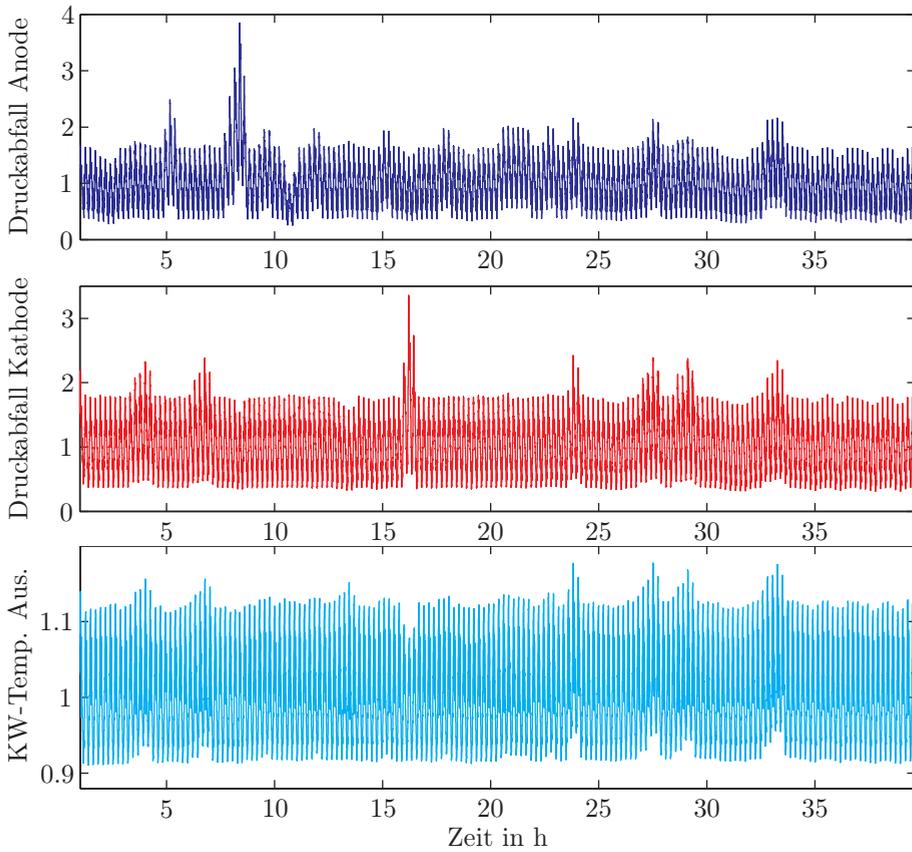


Abbildung 6.1: Normierte Verläufe der drei zusätzlich gemessenen Ausgangsgrößen für den Validationsdatensatz. Aufgrund der großen Datenmenge entspricht jede der hochfrequent auftretenden Spitzen im Signalverlauf einem Zyklus.

Auch in der Temperatur des Kühlwassers am Stack-Austritt sind nur sehr geringe Abweichung bei eben diesen Variationen erkennbar. Hingegen scheinen die verringerten Feuchten der Betriebsgase in keiner der Ausgangsgrößen eine merkliche Rolle zu spielen.

Dennoch soll hier mit den linearen Ansätzen untersucht werden, welche der Abweichungen diagnostiziert und welche Größe ggf. sogar so genau geschätzt werden kann, dass eine Regelung auf Basis dieser Schätzung möglich ist. Es ist jedoch zu erwarten, dass insbesondere bei den Feuchten eine solche Schätzung schwierig wird, da der Einfluss auf das Stackverhalten zumindest teilweise verschwindend gering ist. Eine Veränderung der Fehlerstufen konnte aufgrund mangelnder Teststandskapazität für weitere Messungen nicht durchgeführt werden.

Zusätzlich zu diesen gemessenen Signalen wurden die Datensätze um die von der angenommenen Betriebsstrategie vorgegebenen Sollwerte der zu schätzenden Eingangsgrößen ergänzt. Diese weichen, abgesehen vom Rauschen und kleinen Aktuatordifferenzen, insbesondere bei den Zyklen mit Variationen der Eingangsgrößen von den gemessenen Werten ab, da die Betriebsstrategie stets den Nennbetrieb vorgibt. Auf Basis dieser Sollwerte wurden zusätzlich Abweichungen zwischen Soll- und Istwert berechnet, die als alternative Schätzgrößen untersucht wurden.

6.3 Konzepte der Diagnoseansätze

Beide hier vorgestellten Ansätze verwenden ein lineares Zustandsraummodell, das aus den Messdaten des PEMFC-Stacks mittels einer 4SID-Methode identifiziert wird. Wie im vorigen Kapitel kommt dazu im Folgenden die statistische CVA zum Einsatz, die Ansätze sind jedoch nicht auf diesen Algorithmus beschränkt. Die genutzten Modelle unterschieden sich in den als Ein- und Ausgängen verwendeten Signalen und damit auch in der Interpretation der Modelle. Der erste der beiden Ansätze nutzt ein Simulationsmodell und basiert auf einem Kalman-Filter [Kre80, Has08, Nie09], bei dem die unbekanntes Eingangsgrößen als Zustände geschätzt werden. Der zweite Ansatz löst sich von der physikalischen Vorstellung der Vorgänge und benutzt ein Modell zur Schätzung, das die verfügbaren Messdaten des Stacks als Eingangsgrößen ansieht und die zu schätzenden Größen direkt ausgibt. Dieser Ansatz stellt eine partiell inverse Modellstruktur des PEMFC-Stacks dar.

6.3.1 Kalman-Filter

Die beim Kalman-Filter-Ansatz zum Einsatz kommenden Simulationsmodelle sind sehr ähnlich zu den im Abschnitt 5.3 vorgestellten Modellen. Allerdings werden hier Modelle für alle vier Ausgangsgrößen verwendet, um möglichst viele Informationen über das System auszunutzen. Als Eingangsgrößen der Modelle werden für die Identifikation sowohl die messbaren Eingangsgrößen \mathbf{u}_m als auch die zu schätzenden Eingangsgrößen \mathbf{u}_s herangezogen. Liegt das damit identifizierte Zustandsraummodell

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{A} \mathbf{x} + \begin{bmatrix} \mathbf{B}_m & \mathbf{B}_s \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_m \\ \mathbf{u}_s \end{bmatrix}, \quad (6.1)$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{C} \mathbf{x} + \begin{bmatrix} \mathbf{D}_m & \mathbf{D}_s \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_m \\ \mathbf{u}_s \end{bmatrix} \quad (6.2)$$

vor, muss dieses noch modifiziert werden, da ein Kalman-Filter die Zustandsgrößen eines Systems schätzt. Die in der Anwendung nicht messbaren Zustandsgrößen wer-

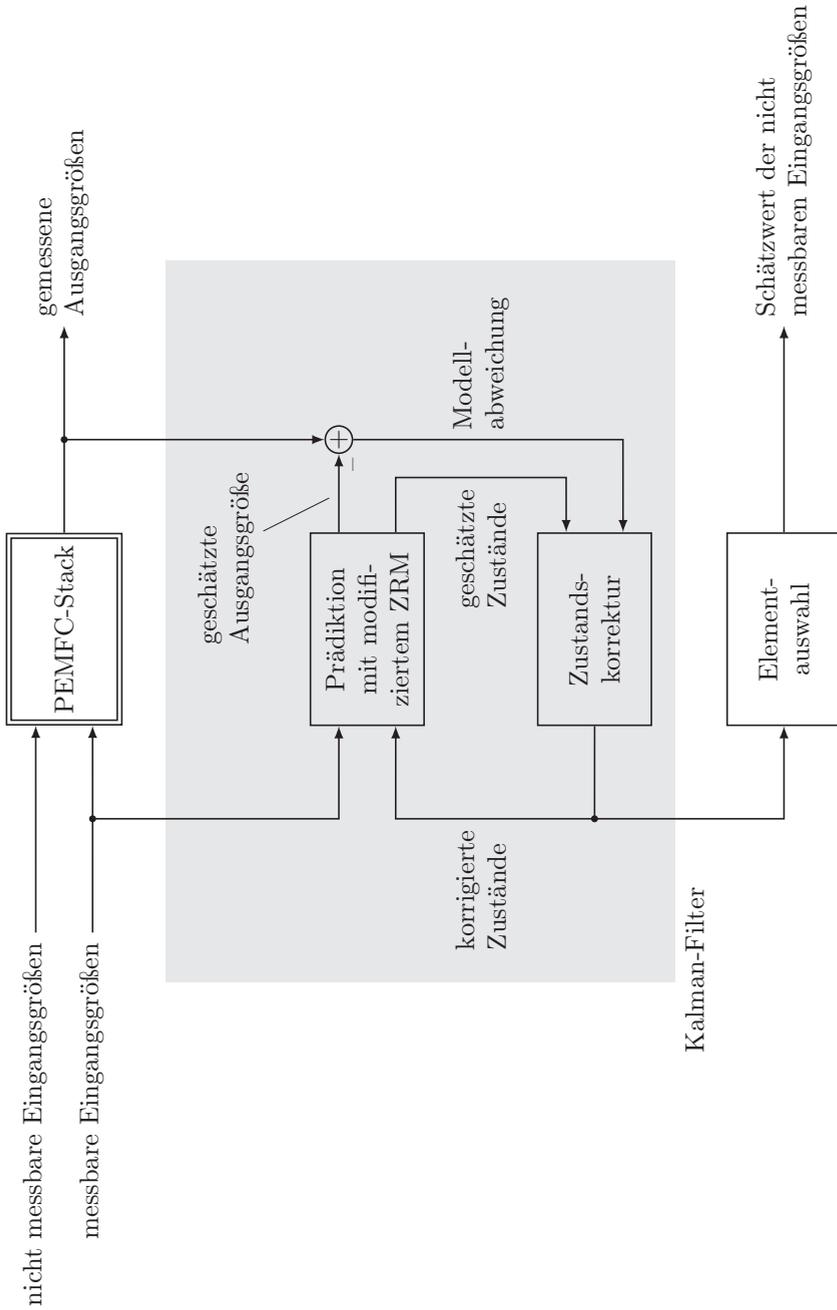


Abbildung 6.2: Schematische Darstellung des Kalman-Filteransatzes für die Diagnose

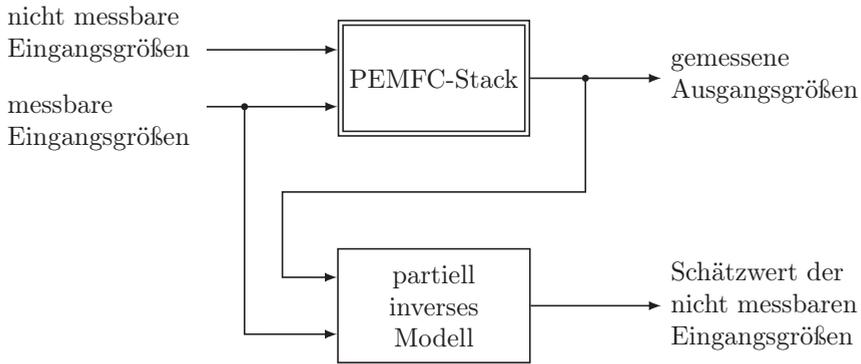


Abbildung 6.3: Schematische Darstellung des partiell inversen Modells als Diagnoseansatz

den daher als konstante Zustandsgrößen dem ursprünglich identifizierten Zustandsvektor hinzugefügt und die Systemmatrizen entsprechend angepasst:

$$\begin{bmatrix} \dot{\mathbf{x}} \\ \dot{\mathbf{u}}_s \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B}_s \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{u}_s \end{bmatrix} + \mathbf{B}_m \mathbf{u}_m, \quad (6.3)$$

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} \mathbf{C} & \mathbf{D}_s \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{u}_s \end{bmatrix} + \mathbf{D}_m \mathbf{u}_m. \quad (6.4)$$

Für dieses modifizierte System wird ein Kalman-Filter entworfen. Die Schätzwerte der nicht messbaren Eingangsgrößen können dem vom Kalman-Filter geschätzten Zustandsvektor entnommen werden. Die Struktur dieses Ansatzes ist schematisch in der Abbildung 6.2 dargestellt.

6.3.2 Partiiell inverses Modell

Da ein Kalman-Filter aufgrund der notwendigen Matrixoperationen, insbesondere der Berechnung inverser Matrizen, Schwierigkeiten bei der Implementierung im Fahrzeug bereiten kann, wurde mit dem partiell inversen Modell zusätzlich ein im Hinblick auf die Anwendung im Fahrzeug einfacherer Ansatz untersucht. Dieser Ansatz nutzt die im Fahrzeug messbaren Ein- und Ausgangssignale am PEMFC-Stack als Eingangsgrößen für ein Modell, welches direkt als Modellausgangsgrößen die gesuchten nicht messbaren Eingangsgrößen des Stacks berechnet. Das Schema dieses Ansatzes ist in der Abbildung 6.3 dargestellt.

Bei der Inversion eines Modells spielt die Kausalität eine wichtige Rolle. Hat die zu schätzende Eingangsgröße nur einen verzögerten Einfluss auf die Ausgangsgröße, so ist aufgrund der Kausalität nur eine verzögerte Schätzung möglich. Es wurde daher

zusätzlich eine zeitliche Verzögerung der Eingangssignale vorgesehen, um bei den Untersuchungen zum partiell inversen Modell auch diesen Aspekt berücksichtigen zu können.

6.4 Untersuchungen und Ergebnisse

Für beide Ansätze wurde für jede der zu schätzenden Eingangsgrößen des PEMFC-Stacks ein eigenes Kalman-Filter bzw. partiell inverses Modell auf Basis der messbaren Signale entworfen, um ggf. auftretende Quereinflüsse bei der Schätzung zu vermeiden und damit die Komplexität der Untersuchungen gering zu halten. Versuche haben gezeigt, dass nicht immer eine Verwendung aller zur Verfügung stehender messbarer Signale zu den besten Ergebnissen führt. Neben der Auswahl der zu verwendenden Messsignale stellen auch die Normierungsart der Messdaten, das Schätzen eines Modells mit oder ohne Durchgriff sowie mit oder ohne Nullpunktverschiebung und die maximale Modellordnung zu wählende Parameter dar. Auch eine mögliche zeitliche Verzögerung der Eingangsgrößen kann beim partiell inversen Modell gewählt werden. Außerdem können anstatt der Stöchiometrien und der Wasserstoffkonzentration auch die physikalisch am Teststand vorgegebenen Volumenströme der drei Gase Wasserstoff, Stickstoff und Luft geschätzt werden. Bei allen Größen besteht zusätzlich die Möglichkeit, nur die Abweichung des aktuellen Werts vom Sollwert zu schätzen, wobei diese Abweichung sowohl absolut (als Differenz) als auch relativ (als Quotient) berechnet werden kann.

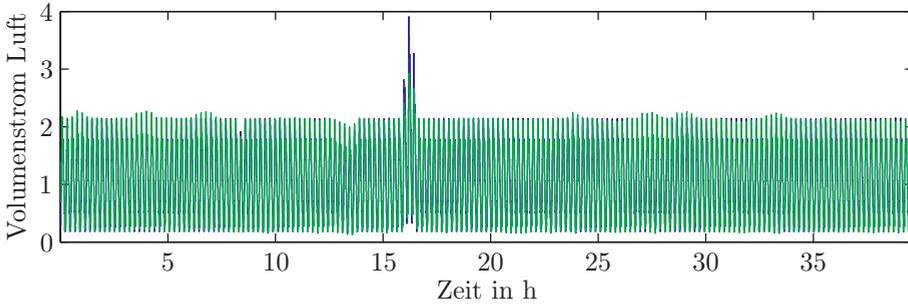
Diese Fülle an freien Parametern beim Entwurf führt dazu, dass eine Berechnung aller möglicher Kombinationen für beide Modellansätze zu viel Rechenzeit in Anspruch nehmen würde. Daher wurden verschiedene Voruntersuchungen (vgl. auch [Esw08, Eid09]) durchgeführt und anhand der Ergebnisse einige dieser Parameter vorab festgelegt. Es hat sich gezeigt, dass die Normierung der Signale auf den jeweiligen Mittelwert im Datensatz in dieser Anwendung bessere Ergebnisse liefert als andere Normierungsarten. Bei den Abweichungssignalen stellte sich das Schätzen der relativen Abweichung als bessere Variante heraus.

Mit einer festen Konfiguration von ADAPT_x wurden bei einer maximalen Ordnung von zwölf jeweils die beste Kombination der zu verwendenden Signale ermittelt. Für diese Konfiguration wurde dann in einem weiteren Schritt bis zur maximalen Ordnung von 30 jeweils mit und ohne Durchgriff sowie mit und ohne Nullpunktverschiebung das optimale Modell ermittelt. Beim partiell inversen Modell wurden zusätzlich Verzögerungen der Eingangsgrößen bis maximal 13 Schritte berücksichtigt. Zur Auswahl der Ergebnisse wurden der mittlere quadratische Fehler sowie die Standardabweichung des Schätzfehlers herangezogen.

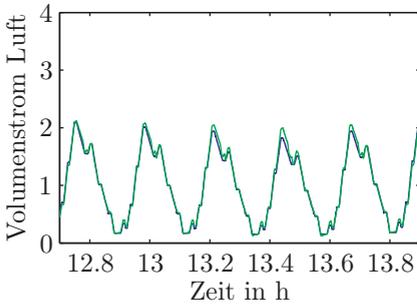
Als wichtigstes Ergebnis dieser Untersuchungen lässt sich festhalten, dass die Ergebnisse des partiell inversen Modells deutlich besser sind als die mit dem Kalman-Filter erzielten Resultate. Die mit dem Kalman-Filter erzielten brauchbaren Ergebnisse benötigen so hohe Modellordnungen (meist um 20), dass eine Implementierung im Fahrzeug nicht realistisch erscheint. Daher wurde bei den weiteren Darstellungen in diesem Kapitel der Schwerpunkt auf die partiell inversen Modelle gelegt. Zudem stellte sich heraus, dass sich die Volumenströme besser schätzen lassen als die entsprechenden Stöchiometrien bzw. die Wasserstoffkonzentration. Bei den partiell inversen Modellen sind die Verbesserungen durch eine Verzögerung der Eingangsgrößen so gering, dass sie den Nachteil der sich dadurch ergebenden Verzögerung der Schätzung nicht aufwiegen und daher nicht zu empfehlen sind. Bei identischer Ordnung liefern die Modelle mit Durchgriff zumeist die besseren Ergebnisse. Die Berücksichtigung einer Nullpunktverschiebung brachte hingegen keine Vorteile.

Die besten Schätzergebnisse lassen sich für den Volumenstrom der Luft an der Kathode erzielen. Dies ist nicht überraschend, da die Abweichungen dieser Eingangsgröße die größten Veränderungen in den Ausgangsgrößen hervorrufen. Es genügt bereits ein partiell inverses Modell erster Ordnung, um sowohl den Verlauf der Größe während der Zyklen als auch die Abweichungen im Fehlerfall sehr gut zu schätzen. Die Validationsergebnisse des Modells erster Ordnung mit Durchgriff und ohne Nullpunktverschiebung sind in der Abbildung 6.4 dargestellt. Bei der relativ großen Abweichung nach oben unterschätzt das Modell den tatsächlichen Fluss zwar, jedoch ist die Abweichung nach oben klar erkennbar und der Fehler wird somit erkannt. Da der Datensatz auch die Abweichung der weiteren vier Größen beinhaltet, kann an dem Ergebnis auch die Robustheit gegenüber diesen Variationen abgelesen werden. Der Schätzer zeigt kaum Querempfindlichkeiten.

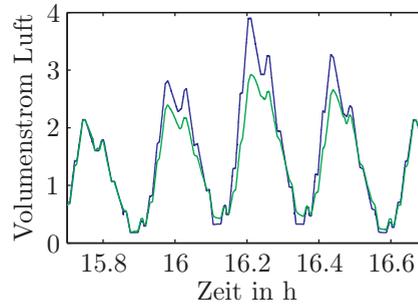
Auf der Anodenseite wird der Verlauf des Volumenstroms von Wasserstoff nahezu gleich gut geschätzt wie bei der Luft auf der Kathodenseite (vgl. Abbildung 6.5). Allerdings folgt hier die Schätzung kaum den Abweichungen und ist somit zur Fehlererkennung nicht geeignet. Da sich diese Abweichungen jedoch kaum in den Ausgangsgrößen bemerkbar machen, ist dieses Ergebnis nicht überraschend. Etwas besser gelingt hingegen die Schätzung des Volumenstroms von Stickstoff (siehe Abbildung 6.6). Hier wird dem Verlauf sowohl im Normalbetrieb als auch bei Abweichungen gefolgt. Allerdings stimmt bei Abweichungen nur die Tendenz und nicht der exakte Wert. Zusätzlich ist die Schätzung dieser Größe empfindlich auf Quereinflüsse durch die abweichenden Befeuchtungswerte der Gase. Diese Querempfindlichkeit auf Feuchteabweichungen kann durch die Verwendung eines Modells höherer Ordnung reduziert werden, wie es in der Abbildung 6.7 zu sehen ist. Allerdings steigt dabei der Quereinfluss des abfallenden Volumenstroms der Luft (bei etwa 13.5 h) an. Dieser könnte jedoch durch eine geeignete Logik zusammen mit der oben gezeigten Schätzung des Luftvolumenstroms bei der Auswertung im Fahrzeug ausgeblendet werden.



(a) Gesamter Validationsdatensatz



(b) Ausschnitt mit Abweichung nach unten

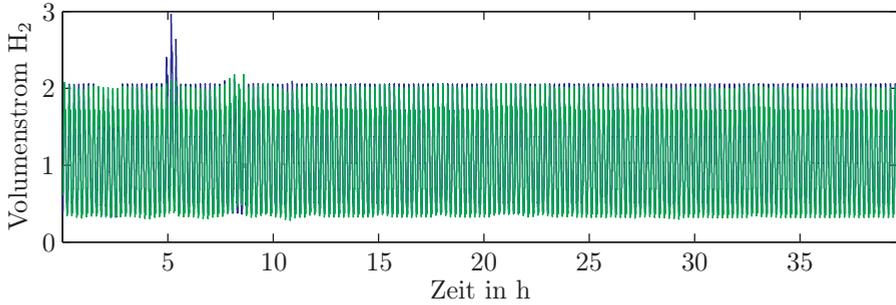


(c) Ausschnitt mit Abweichung nach oben

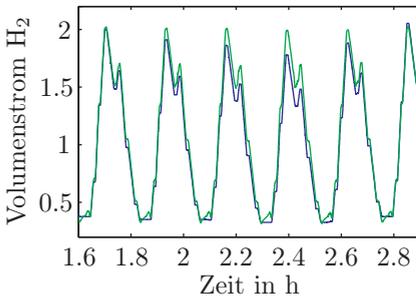
Modelleingänge	Stromdichte Druck Kathode KW-Temperatur Ein KW-Temperatur Aus Druckabfall Kathode Sollwert H ₂ -Stöchiometrie Sollwert rel. Feuchte H ₂
Modellordnung	1
Durchgriff	ja
Nullpunktverschiebung	nein

(d) Modelldaten

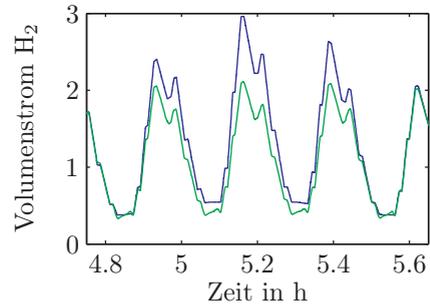
Abbildung 6.4: Schätzergebnisse für den Volumenstrom der Luft an der Kathode des Validationsdatensatzes (blau) mit einem partiell inversen Modell (grün)



(a) Gesamter Validationsdatensatz



(b) Ausschnitt mit Abweichung nach unten

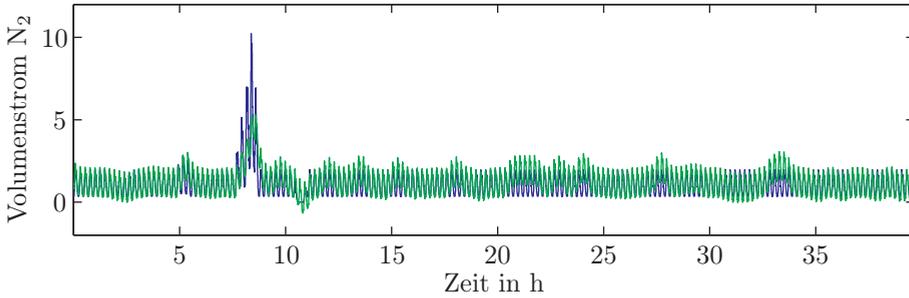


(c) Ausschnitt mit Abweichung nach oben

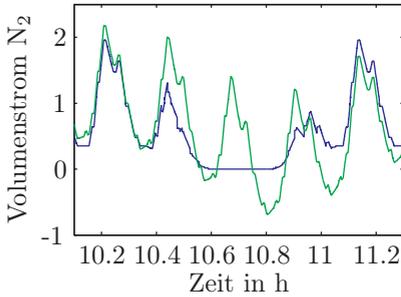
Modelleingänge	Stromdichte Druck Anode KW-Temperatur Ein KW-Temperatur Aus Druckabfall Kathode mittlere Zellspannung Sollwert Volumenstrom H_2 Sollwert O_2 -Stöchiometrie Sollwert Volumenstrom Luft
Modellordnung	1
Durchgriff	ja
Nullpunktverschiebung	nein

(d) Modelldaten

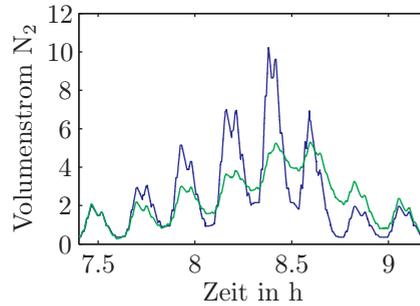
Abbildung 6.5: Schätzergebnisse für den Volumenstrom von Wasserstoff an der Anode des Validationsdatensatzes (blau) mit einem partiell inversen Modell (grün)



(a) Gesamter Validationsdatensatz



(b) Ausschnitt mit Abweichung nach unten



(c) Ausschnitt mit Abweichung nach oben

Modelleingänge	Stromdichte Druck Anode KW-Temperatur Ein Druckabfall Anode Druckabfall Kathode mittlere Zellspannung Sollwert H ₂ -Stöchiometrie Sollwert H ₂ -Konzentration Sollwert relative Feuchte H ₂
Modellordnung	1
Durchgriff	ja
Nullpunktverschiebung	nein

(d) Modelldaten

Abbildung 6.6: Schätzergebnisse für den Volumenstrom von Stickstoff an der Anode des Validationsdatensatzes (blau) mit einem partiell inversen Modell (grün)

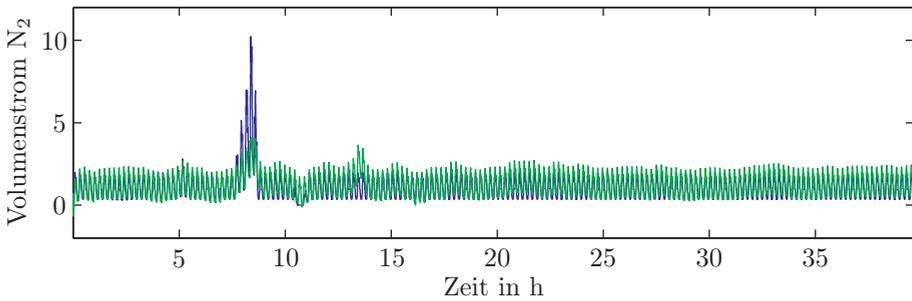


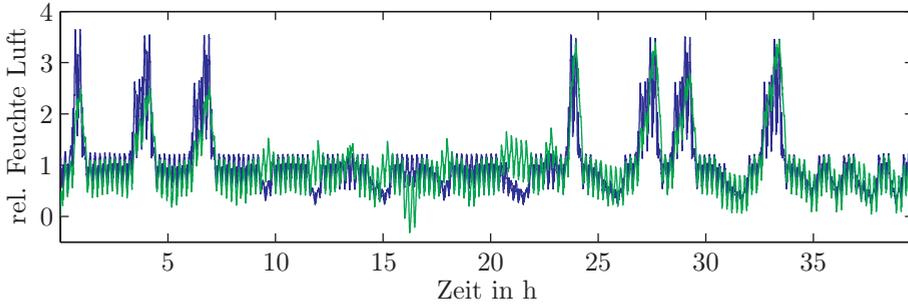
Abbildung 6.7: Schätzergebnisse für den Volumenstrom von Stickstoff an der Anode des Validationsdatensatzes (blau) mit einem partiell inversen Modell zehnter Ordnung (grün)

Noch schwieriger ist die Schätzung bei den relativen Feuchten der Betriebsgase, die ebenfalls mit Ausnahme der zu feuchten Luft keine deutlichen Auswirkungen auf die Ausgangsgrößen haben. Die Schätzung der relativen Feuchte des Anodengases gelingt näherungsweise nur in wenigen Bereichen im Nennbetrieb, ansonsten folgt der geschätzte Wert weder den Abweichungen noch dem relativ stark schwankenden Verlauf. Daher wurde auf eine Darstellung des Ergebnisses verzichtet. Auf der Kathodenseite gelingt die Schätzung besser, wie in der Abbildung 6.8 zu sehen ist. Hier werden der Verlauf im Nennbetrieb, aber auch die Abweichung der Feuchte gut reproduziert. Bei den Abweichungen nach oben wird nur eine Art Mittelwert geschätzt, was zur Erkennung des Fehlers jedoch genügt. Bei den Abweichungen nach unten treten teilweise störende Quereinflüsse der gleichzeitig variierenden relativen Feuchte des Anodengases auf, sodass hier eine sichere Erkennung nicht immer möglich ist. Auch die erhöhte Sauerstoffstöchiometrie sorgt für einen störenden Quereinfluss, der wie oben aber mittels einer geeigneten Logik in Kombination mit der Schätzung des Luftvolumenstroms bei der Auswertung im Fahrzeug ausgeblendet werden kann.

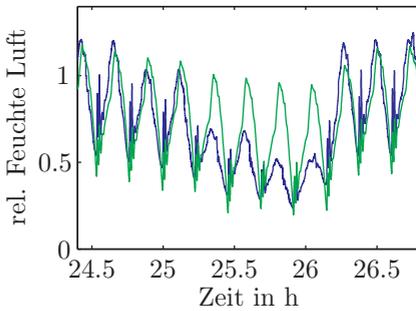
Weitere Untersuchungen wurden an den berechneten Abweichungsgrößen sowie mit einem erweiterten Datensatz vorgenommen. Dieser erweiterte Datensatz enthielt zusätzlich noch Ausgangsdaten eines speziellen Messgeräts, welches die THDA umsetzt (vgl. auch Abschnitt 6.1 und [RPP+06]). In beiden Fällen konnten jedoch sowohl mit dem Kalman-Filter als auch mit dem partiell inversen Modell keine relevanten Verbesserungen der Schätzergebnisse erzielt werden.

6.5 Zusammenfassung

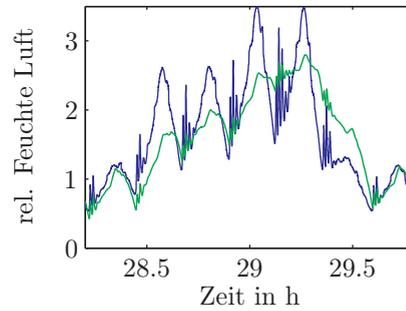
Für eine Überwachung messtechnisch nicht erfasster Größen des PEMFC-Systems in einem Fahrzeug, die alle Eingangsgrößen des Brennstoffzellen-Stacks darstellen, wur-



(a) Gesamter Validationsdatensatz



(b) Ausschnitt mit Abweichung nach unten



(c) Ausschnitt mit Abweichung nach oben

Modelleingänge	Druck Anode KW-Temperatur Ein KW-Temperatur Aus Druckabfall Kathode Sollwert H ₂ -Stöchiometrie Sollwert Volumenstrom N ₂ Sollwert relative Feuchte H ₂
Modellordnung	1
Durchgriff	nein
Nullpunktverschiebung	nein

(d) Modelldaten

Abbildung 6.8: Schätzergebnisse für die relative Feuchte der Luft auf der Kathodenseite des Validationsdatensatzes (blau) mit einem partiell inversen Modell (grün)

den in diesem Kapitel zwei Ansätze präsentiert, die auf linearen Zustandsraummodellen basieren. Diese Modelle wurden für die hier durchgeführten Untersuchungen mit einer Implementierung der statistischen CVA gewonnen. Ziel der Untersuchungen war eine Aussage, ob die in den Messdaten enthaltenen Abweichungen der zu überwachenden Größen mithilfe der Ansätze erkannt werden können. Als Hauptschwierigkeit stellte sich dabei heraus, dass die für die Gewinnung der Messdaten gewählten Abweichungen teilweise noch so nahe am Nennbetriebspunkt liegen, dass diese kaum Auswirkungen auf das Verhalten des Stacks haben.

Beim direkten Vergleich der beiden Ansätze in den durchgeführten Untersuchungen zeigte das partiell inverse Modell die besseren Ergebnisse bei geringeren Modellordnungen. Für eine Implementierung im Fahrzeug auf Basis nur der Messdaten des PEMFC-Stacks ist somit das partiell inverse Modell eindeutig zu bevorzugen. Ein Kalman-Filter könnte jedoch interessant werden, wenn über eine der zu schätzenden Größen auch durch eine andere Komponente Informationen vorliegen und die Schätzungen fusioniert werden sollen.

In den Fällen, in denen die Variation einer Größe merkliche Abweichungen in einer oder mehreren Ausgangsgrößen verursacht, war ein Erkennen der Abweichungen stets möglich. Im Nennbetrieb folgten die Schätzungen jeweils auch gut den zyklischen Veränderungen der Größen, was bei Abweichungen nicht bei allen Größen der Fall war. Dies erlaubt eine Verwendung der Schätzer auch als Beobachter zumindest für den Nennbetrieb. Die partiell inversen Modelle stellen somit eine sehr gute Möglichkeit zur Überwachung der untersuchten Größen dar, die aufgrund der Linearität und der geringen Ordnungen auch im Fahrzeug implementierbar sind.

Kapitel 7

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden erstmals Modellansätze für PEMFC-Stacks vorgeschlagen, die auf Messdaten basieren und das dynamische Verhalten nicht nur in einem festen Betriebspunkt der weiteren Größen beschreiben. Darüber hinaus wurden zwei modellbasierte Diagnoseansätze vorgestellt, deren Ziel die vorbeugende Erkennung von Abweichungen der Betriebsparameter des Stacks ist, bevor eine Beschädigung an dieser teuersten Komponente des PEMFC-Systems auftritt. Die Gewinnung der dynamischen Modelle erfolgte überwiegend mithilfe von 4SID-Verfahren, die nicht-iterativ sowohl die Ordnung als auch die Parameter eines linearen zeitdiskreten Zustandsraummodells aus den Messdaten ermitteln.

Im ersten Teil dieser Arbeit wurde eine ausführliche Analyse und ein Vergleich der verschiedenen in der Literatur beschriebenen modernen 4SID-Verfahren durchgeführt, da bisher nur einzelne Analysen oder Vergleiche existierten. Dazu wurde ein Ablaufschema formuliert, im Rahmen dessen sich alle 4SID-Methoden einheitlich beschreiben und damit auch leicht vergleichen lassen. Neben den in der Literatur zu findenden theoretischen Eigenschaften wurden zusätzlich Vergleiche an einfachen Systemen analysiert, um das Verhalten der Algorithmen zu bewerten.

Als Ergebnis des Vergleichs kann eine klare Empfehlung für die 4SID-Verfahren gegeben werden, deren Datenvorverarbeitungsschritt auf einem HOARX-Modell basiert. Dazu gehören die statistische CVA und die Prädiktor-basierten Verfahren. Diese zeichnen sich neben robustem Verhalten gegenüber Rauschen bei kleineren Datensätzen auch durch die Fähigkeit aus, Modelle mit Daten aus dem geschlossenen Regelkreis verzerrungsfrei schätzen zu können. Zusätzlich können dabei Nullpunktverschiebungen oder Trends in den Daten berücksichtigt werden, um dann das dynamische Modell aus den entsprechend korrigierten Daten zu identifizieren. Vorteile der statistischen CVA gegenüber den Prädiktor-basierten Verfahren liegen in der Verwendung der einfachen Datenmatrizen, wodurch insbesondere bei großen Datensätzen der Speicheraufwand deutlich geringer ist als bei Verwendung der Block-Hankel-Matrizen, und in der Verfügbarkeit einer kommerziellen Implementierung.

Letzteres ermöglicht die Verwendung des Verfahrens auch ohne tief gehende Analyse des Verfahrens, die für eine eigene Implementierung notwendig ist.

Die 4SID-Verfahren wurden im zweiten Teil der Arbeit zur Modellierung von PEM-Brennstoffzellen-Stacks für Simulation und Diagnose herangezogen. Dynamische Modelle des elektrischen Verhaltens von PEMFC-Stacks basierten bisher auf physikalischen und empirischen Gleichungen. Diese in der Literatur beschriebenen Modelle benötigen für Simulationen einen hohen Rechenaufwand. Das fällt besonders dann ins Gewicht, wenn der PEMFC-Stack nur eine von vielen Teilkomponenten eines komplexen technischen Systems ist, dessen Aufbau und Funktionsweise durch eine Vielzahl von Simulationsläufen modellbasiert optimiert werden soll. Für eine Implementierung im Rahmen modellbasierter Betriebsführungs- und Diagnosemethoden auf einem Steuergerät in einem Brennstoffzellenfahrzeug sind diese Modelle ebenfalls nicht geeignet.

Mit den in dieser Arbeit vorgestellten Modellen wurden Ansätze vorgeschlagen, die diese Nachteile der physikalischen Modelle nicht haben. Durch die datenbasierte Herangehensweise wird bei beiden Modellansätzen das Ein-/Ausgangsverhalten des Stacks nachgebildet, ohne die inneren Vorgänge zu modellieren, wodurch sich die deutliche Reduktion der Komplexität gegenüber entsprechender physikalisch hergeleiteter Modelle erklärt. Bei beiden Ansätzen machen die benötigten Messungen den Hauptteil des Modellierungsaufwands aus.

Beim Uryson-Modell repräsentiert ein einfaches statisches Teilmodell die stationären Betriebspunkte und die dynamische Abweichung von diesen Punkten wird linear beschrieben. Nach der Identifikation steht damit ein Modell zur Verfügung, welches nur wenig Rechenzeit benötigt und sich deshalb für Simulationsaufgaben sehr gut eignet, bei denen ein größerer Betriebsbereich abgedeckt werden soll.

Für den statischen Teil wurden ein als Nachschlagetabelle abgelegtes Kennfeld und ein neuronales Netz verglichen. Mit beiden Ansätzen konnten vergleichbar gute Ergebnisse erzielt werden. Das künstliche neuronale Netz erlaubt eine deutliche Reduktion des Speicheraufwands, ohne einen deutlichen Anstieg der Simulationsgeschwindigkeit zu verursachen.

Beim dynamischen Teilsystem wurden Übertragungsfunktionen und Zustandsraummodelle verglichen. Bei den kontinuierlichen Übertragungsfunktionen konnten auch Messdatenfragmente berücksichtigt werden, mit denen sehr schnelle Vorgänge nach Änderungen in den Eingangsgrößen mit sehr geringer Abtastzeit aufgenommen wurden. Beschränkt man sich auf Daten mit einer festen Abtastzeit, so liefern die Zustandsraummodelle erster Ordnung deutlich bessere Ergebnisse. Beim Vergleich verschiedener 4SID-Verfahren zur Identifikation zeigte sich die erwartete Überlegenheit der statistischen CVA gegenüber den geometrischen Verfahren auch in der praktischen Anwendung. Bei diesen Versuchen konnte anhand der Ergebnisse auch festgestellt werden, dass die in MATLAB verfügbare 4SID-Implementierung entge-

gen der Angaben in der Dokumentation keine Umsetzung eines rein geometrischen Verfahrens sein kann, sondern zumindest verschiedene Erweiterungen integriert sein müssen.

Noch schneller und weniger aufwändig als beim Uryson-Modell erfolgt die Simulation mit einem rein linearen Zustandsraummodell. Die Gültigkeit dieses Modells ist jedoch auf einen kleinen Bereich um den Nennbetrieb beschränkt. Der Vorteil dieses Ansatzes ist neben der einfachen Implementierbarkeit eines solchen Modells zwischen erster und vierter Ordnung die Verwendbarkeit von Daten aus dem Fahrbetrieb. So ist mit diesem Ansatz auch eine regelmäßige Adaption des Modells denkbar, beispielsweise im Rahmen der üblichen Servicetermine zur Inspektion des Fahrzeugs.

Solche einfachen linearen Zustandsraummodelle bilden auch die Basis für die beiden in dieser Arbeit vorgeschlagenen Diagnoseansätze für PEMFC-Stacks. Entgegen einer Vielzahl von Methoden in der Literatur, die eine Erkennung von Fehlern im Stack als Ziel haben, werden hierbei die nicht messtechnisch erfassten Eingangsgrößen des Stacks überwacht. Damit können frühzeitig Abweichungen vom vorgegebenen Betriebspunkt erkannt und Beschädigungen des Stacks durch geeignete Gegenmaßnahmen verhindert werden. Die Besonderheit dieser Vorgehensweise ist die Verwendung des Stacks und eines zugehörigen Modells als eine Art Sensor zur Überwachung der peripheren Komponenten des PEMFC-Systems.

Der erste Ansatz basiert auf der Verwendung linearer Simulationsmodelle, bei denen die nicht messbaren Eingangsgrößen als konstante Zustände mittels eines Kalman-Filters geschätzt werden. Beim zweiten Ansatz werden die zur Verfügung stehenden Messinformationen direkt als Eingangsgrößen eines Modells genutzt, unabhängig davon, ob diese physikalisch eine Ein- oder Ausgangsgröße des Stacks darstellen. Dadurch ergibt sich eine partiell inverse Modellstruktur. Bei den für diese Arbeit zur Verfügung stehenden Messdaten lieferte das partiell inverse Modell die deutlich besseren Ergebnisse. Bereits mit Modellen erster Ordnung war in vielen Fällen die Detektion von Fehlern möglich, im Nennbetrieb eignen sich die Modelle meist sogar als Beobachter für die zu überwachenden Größen.

Die Untersuchungen zu den Diagnoseansätzen haben auch die Grenzen von Diagnoseverfahren allgemein aufgezeigt. Bei einigen Abweichungen in den Eingangsgrößen war keine Erkennung möglich, da diese keinen merklichen Einfluss auf die Ausgangsgrößen des Stacks hatten. Da nur auf Basis von Veränderungen auf deren Ursache geschlossen werden kann, kann in solchen Fällen generell keine Diagnose stattfinden. Soll dennoch eine Überwachung realisiert werden, müssen für diese Größen entweder weitere Ausgangsgrößen durch zusätzliche Sensoren messtechnisch erfasst werden, auf die die betrachteten Abweichungen einen Einfluss haben, oder die Grenzen der zu erkennenden Abweichungen müssen weiter vom Nennbetrieb entfernt werden, wenn dann eine Auswirkung auf die Ausgangsgrößen zu erwarten ist. In den

Fällen, in denen bei den hier durchgeführten Untersuchungen solche Auswirkungen messbar waren, haben die identifizierten partiell inversen Modellansätze eine gute Empfindlichkeit gegenüber den zu detektierenden Abweichungen und einen geringen Störeinfluss von Abweichungen in anderen Eingangsgrößen gezeigt.

Anhang A

Ergänzende Berechnungen zur 4SID

Der Inhalt dieses Anhangs ist eine Ergänzung zum Kapitel 3 und zum Grundverständnis der 4SID-Algorithmen nicht notwendig. Er fasst platzintensive Berechnungen und Herleitungen zusammen, bei denen aus Gründen der Übersichtlichkeit im Kapitel 3 nur das Ergebnis angegeben wurde.

A.1 Berechnung der Projektionen mittels LQ-Zerlegung

In diesem Abschnitt wird die Gültigkeit der in Kapitel 3.1.3 eingeführten Berechnungsvorschriften für die Projektionen von Matrizen mittels der LQ-Zerlegung gezeigt. Dabei wird davon ausgegangen, dass die Matrizen $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{(a \times j)}$, $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{(b \times j)}$ und $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{(c \times j)}$ sowie die Matrix $[\mathbf{C}^T \quad \mathbf{B}^T]^T$ vollen Rang haben und dass für die Anzahl der Spalten $j \geq a + b + c$ gilt.

Da der Ausdruck $\mathbf{A}^T(\mathbf{A}\mathbf{A}^T)^\dagger \mathbf{A}$ im Folgenden mehrmals auftritt, soll dieser zunächst allgemein mithilfe der LQ-Zerlegung $\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{Q}^T$ mit $\mathbf{L} \in \mathbb{R}^{(a \times a)}$, $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{(j \times a)}$ und $\mathbf{Q}^T \mathbf{Q} = \mathbf{I}$ vereinfacht werden. Es ist zu beachten, dass aus der Voraussetzung, dass die Matrix \mathbf{A} Höchststrang hat, folgt, dass die Matrix \mathbf{L} ebenfalls Höchststrang hat und damit invertierbar ist. Damit ergibt sich die Vereinfachung des Ausdrucks zu

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^T(\mathbf{A}\mathbf{A}^T)^\dagger \mathbf{A} &= \mathbf{Q}\mathbf{L}^T(\underbrace{\mathbf{L}\mathbf{Q}^T\mathbf{Q}\mathbf{L}^T}_{=\mathbf{I}})^\dagger \mathbf{L}\mathbf{Q}^T = \mathbf{Q}\mathbf{L}^T(\mathbf{L}\mathbf{L}^T)^\dagger \mathbf{L}\mathbf{Q}^T \\ &= \mathbf{Q}\mathbf{L}^T(\mathbf{L}\mathbf{L}^T)^{-1} \mathbf{L}\mathbf{Q}^T = \underbrace{\mathbf{Q}\mathbf{L}^T(\mathbf{L}^T)^{-1}}_{=\mathbf{I}} \underbrace{\mathbf{L}^{-1}\mathbf{L}}_{=\mathbf{I}} \mathbf{Q}^T = \mathbf{Q}\mathbf{Q}^T. \quad (\text{A.1}) \end{aligned}$$

Anmerkung: Es sei an dieser Stelle explizit darauf hingewiesen, dass bei einer in den Spalten orthogonalen Matrix \mathbf{Q} , d. h. einer rechteckigen Matrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{(j \times a)}$ mit $\mathbf{Q}^T \mathbf{Q} = \mathbf{I}$, die Vertauschung der Transposition nicht möglich ist, d. h. $\mathbf{Q} \mathbf{Q}^T \neq \mathbf{I}$.

Für die senkrechten Projektionen ist der Ausgangspunkt die LQ-Zerlegung

$$\begin{bmatrix} \mathbf{B} \\ \mathbf{A} \end{bmatrix} = \mathbf{L} \mathbf{Q}^T = \begin{bmatrix} \mathbf{L}_{11} & \mathbf{0} \\ \mathbf{L}_{21} & \mathbf{L}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_1^T \\ \mathbf{Q}_2^T \end{bmatrix} \quad (\text{A.2})$$

mit $\mathbf{L}_{11} \in \mathbb{R}^{b \times b}$, $\mathbf{L}_{21} \in \mathbb{R}^{a \times b}$, $\mathbf{L}_{22} \in \mathbb{R}^{a \times a}$, $\mathbf{Q}_1 \in \mathbb{R}^{j \times b}$ und $\mathbf{Q}_2 \in \mathbb{R}^{j \times a}$. Daraus folgt für die beiden Matrizen \mathbf{A} und \mathbf{B}

$$\mathbf{B} = \mathbf{L}_{11} \mathbf{Q}_1^T \quad \text{und} \quad \mathbf{A} = \mathbf{L}_{21} \mathbf{Q}_1^T + \mathbf{L}_{22} \mathbf{Q}_2^T \quad (\text{A.3})$$

sowie für die Matrix \mathbf{Q}

$$\begin{bmatrix} \mathbf{Q}_1^T \\ \mathbf{Q}_2^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_1 & \mathbf{Q}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{bmatrix}. \quad (\text{A.4})$$

Zunächst wird die senkrechte Projektion von \mathbf{A} auf den Zeilenraum von \mathbf{B} betrachtet:

Beweis A.1 (Beweis von $\mathbf{A}/\mathbf{B} = \mathbf{L}_{21} \mathbf{Q}_1^T$):

Nach der Definition 3.6 gilt

$$\mathbf{A}/\mathbf{B} = \mathbf{A} \mathbf{B}^T (\mathbf{B} \mathbf{B}^T)^\dagger \mathbf{B}. \quad (\text{A.5})$$

Daraus ergibt sich durch Einsetzen des Zusammenhangs (A.3) und unter der Verwendung von (A.4) bereits das Ergebnis:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}/\mathbf{B} &= \mathbf{A} \mathbf{Q}_1 \mathbf{L}_{11}^T \underbrace{\left(\mathbf{L}_{11} \mathbf{Q}_1^T \mathbf{Q}_1 \mathbf{L}_{11}^T \right)^\dagger}_{= \mathbf{Q}_1 \mathbf{Q}_1^T \text{ nach (A.1)}} \mathbf{L}_{11} \mathbf{Q}_1^T \\ &= \left(\mathbf{L}_{21} \mathbf{Q}_1^T + \mathbf{L}_{22} \mathbf{Q}_2^T \right) \mathbf{Q}_1 \mathbf{Q}_1^T \\ &= \mathbf{L}_{21} \underbrace{\mathbf{Q}_1^T \mathbf{Q}_1}_{=\mathbf{I}} \mathbf{Q}_1^T + \mathbf{L}_{22} \underbrace{\mathbf{Q}_2^T \mathbf{Q}_1}_{=\mathbf{0}} \mathbf{Q}_1^T \\ &= \mathbf{L}_{21} \mathbf{Q}_1^T. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

■

Mit diesem Beweis lässt sich nun auch leicht die Gültigkeit der Berechnungsvorschrift für die Projektion einer Matrix \mathbf{A} auf das orthogonale Komplement des Zeilenraums von \mathbf{B} mittels der LQ-Zerlegung zeigen:

Beweis A.2 (Beweis von $A/B^\perp = L_{22}Q_2^T$):

Nach der Definition 3.7 gilt

$$A/B^\perp = A \left(I - B^T (BB^T)^\dagger B \right). \quad (\text{A.7})$$

Daraus ergibt sich das Ergebnis durch Ausmultiplizieren und unter Verwendung des Zusammenhangs (A.3) sowie des oben geführten Beweises A.1 für die Projektion auf den Zeilenraum von B :

$$\begin{aligned} A/B^\perp &= A - \underbrace{AB^T(BB^T)^\dagger B}_{= A/B} \\ &= L_{21}Q_1^T + L_{22}Q_2^T - L_{21}Q_1^T \\ &= L_{22}Q_2^T. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

■

Für die schiefe Projektion $A/C B$ wird die LQ-Zerlegung

$$\begin{bmatrix} C \\ B \\ A \end{bmatrix} = LQ^T = \begin{bmatrix} L_{11} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ L_{21} & L_{22} & \mathbf{0} \\ L_{31} & L_{32} & L_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_1^T \\ Q_2^T \\ Q_3^T \end{bmatrix} \quad (\text{A.9})$$

mit $L_{11} \in \mathbb{R}^{c \times c}$, $L_{21} \in \mathbb{R}^{b \times c}$, $L_{22} \in \mathbb{R}^{b \times b}$, $L_{31} \in \mathbb{R}^{a \times c}$, $L_{32} \in \mathbb{R}^{a \times b}$, $L_{33} \in \mathbb{R}^{a \times a}$, $Q_1 \in \mathbb{R}^{j \times c}$, $Q_2 \in \mathbb{R}^{j \times b}$ und $Q_3 \in \mathbb{R}^{j \times a}$ betrachtet. Für die einzelnen Matrizen gelten damit die Gleichungen

$$C = L_{11}Q_1^T, \quad B = L_{21}Q_1^T + L_{22}Q_2^T \quad \text{und} \quad A = L_{31}Q_1^T + L_{32}Q_2^T + L_{33}Q_3^T \quad (\text{A.10})$$

sowie für die Matrix Q der Zusammenhang

$$\begin{bmatrix} Q_1^T \\ Q_2^T \\ Q_3^T \end{bmatrix} [Q_1 \quad Q_2 \quad Q_3] = \begin{bmatrix} I & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & I & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & I \end{bmatrix}. \quad (\text{A.11})$$

Beweis A.3 (Beweis von $A/C B = L_{32}L_{22}^{-1}L_{21}Q_1^T + L_{32}Q_2^T$):

Nach der Definition 3.8 gilt

$$A/C B = (A/C^\perp) (B/C^\perp)^\dagger B. \quad (\text{A.12})$$

Zunächst werden die beiden senkrechten Projektionen unter Verwendung der Be-

weise A.1 und A.2 sowie der Zusammenhänge (A.10) und (A.11) betrachtet:

$$\begin{aligned}
 A/C^\perp &= A \left(I - C^T (CC^T)^\dagger C \right) \\
 &= A \left(I - \underbrace{Q_1 L_{11}^T (L_{11} Q_1^T Q_1 L_{11}^T)^\dagger L_{11} Q_1^T}_{= Q_1 Q_1^T \text{ nach (A.1)}} \right) \\
 &= (L_{31} Q_1^T + L_{32} Q_2^T + L_{33} Q_3^T) (I - Q_1 Q_1^T) \\
 &= L_{31} Q_1^T + L_{32} Q_2^T + L_{33} Q_3^T \\
 &\quad - L_{31} \underbrace{Q_1^T Q_1 Q_1^T}_{=I} - L_{32} \underbrace{Q_2^T Q_1 Q_1^T}_{=0} - L_{33} \underbrace{Q_3^T Q_1 Q_1^T}_{=0} \\
 &= L_{32} Q_2^T + L_{33} Q_3^T, \tag{A.13}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 B/C^\perp &= B \left(I - C^T (CC^T)^\dagger C \right) \\
 &= B \left(I - \underbrace{Q_1 L_{11}^T (L_{11} Q_1^T Q_1 L_{11}^T)^\dagger L_{11} Q_1^T}_{= Q_1 Q_1^T \text{ nach (A.1)}} \right) \\
 &= (L_{21} Q_1^T + L_{22} Q_2^T) (I - Q_1 Q_1^T) \\
 &= L_{21} Q_1^T + L_{22} Q_2^T - L_{21} \underbrace{Q_1^T Q_1 Q_1^T}_{=I} - L_{22} \underbrace{Q_2^T Q_1 Q_1^T}_{=0} \\
 &= L_{22} Q_2^T. \tag{A.14}
 \end{aligned}$$

Da $B/C^\perp = L_{22} Q_2^T$ linear unabhängige Zeilen hat, berechnet sich die Pseudoinverse des Ausdrucks nach der Formel $A^\dagger = A^T (AA^T)^{-1}$ [Sto02]. Aus den Voraussetzungen an die Matrizen B und C folgt, dass L_{22} vollen Rang hat, womit sich die Pseudoinverse $(B/C^\perp)^\dagger$ unter Berücksichtigung der Gleichung (A.11) zu

$$(B/C^\perp)^\dagger = Q_2 L_{22}^T \left(L_{22} \underbrace{Q_2 Q_2^T}_{=I} L_{22}^T \right)^{-1} = Q_2 \underbrace{L_{22}^T (L_{22}^T)^{-1}}_{=I} L_{22}^{-1} = Q_2 L_{22}^{-1} \tag{A.15}$$

ergibt.

Insgesamt folgt damit das Ergebnis

$$\begin{aligned}
A/C B &= (A/C^\perp) (B/C^\perp)^\dagger B \\
&= (L_{32} Q_2^\top + L_{33} Q_3^\top) Q_2 L_{22}^{-1} (L_{21} Q_1^\top + L_{22} Q_2^\top) \\
&= (L_{32} \underbrace{Q_2^\top Q_2}_{=I} L_{22}^{-1} + L_{33} \underbrace{Q_3^\top Q_2}_{=0} L_{22}^{-1}) (L_{21} Q_1^\top + L_{22} Q_2^\top) \\
&= L_{32} L_{22}^{-1} (L_{21} Q_1^\top + L_{22} Q_2^\top) \\
&= L_{32} L_{22}^{-1} \begin{bmatrix} L_{21} & L_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_1^\top \\ Q_2^\top \end{bmatrix}. \tag{A.16}
\end{aligned}$$

Für alle drei im Kapitel 3.1.3 vorgestellten Möglichkeiten zur Projektion von Matrizen wurden somit die Gültigkeit der angegebenen Berechnungsmöglichkeiten über die LQ-Zerlegung gezeigt, mit welchen sich diese Projektionen effizient implementieren lassen.

A.2 IV-Schätzung des schiefen Prädiktors mittels LQ-Zerlegung

Hier soll die Gültigkeit der Berechnungsvorschrift

$$\widehat{O}_i^{\text{IV}} = \left(Y_{i+1|2i} / U_{i+1|2i}^\perp \right) Z^\top = L_{32} L_{22}^\top, \tag{A.17}$$

die im Abschnitt 3.2.2 beim Hilfsvariablenansatz ohne Beweis in der Gleichung (3.87) angegeben wurde, gezeigt werden. Grundlage ist die bereits in der Gleichung (3.86) angegebene LQ-Zerlegung

$$\begin{bmatrix} U_{i+1|2i} \\ Z \\ Y_{i+1|2i} \end{bmatrix} = L Q^\top = \begin{bmatrix} L_{11} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ L_{21} & L_{22} & \mathbf{0} \\ L_{31} & L_{32} & L_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_1^\top \\ Q_2^\top \\ Q_3^\top \end{bmatrix}. \tag{A.18}$$

Beweis A.4 (Beweis von $(Y_{i+1|2i} / U_{i+1|2i}^\perp) Z^\top = L_{32} L_{22}^\top$):

Um den Zusammenhang zu beweisen, wird im Ausdruck $(Y_{i+1|2i} / U_{i+1|2i}^\perp) Z^\top$ die Projektion nach der Definition 3.7 ersetzt. Unter Verwendung der den Matrizen entsprechenden Teile der LQ-Zerlegung (A.18) und der Zusammenhän-

ge (A.1) und (A.11) ergibt sich daraus insgesamt

$$\begin{aligned}
\left(\mathbf{Y}_{i+1|2i} / \mathbf{U}_{i+1|2i}^\perp \right) \mathbf{Z}^\top &= \mathbf{Y}_{i+1|2i} \left(\mathbf{I} - \mathbf{U}_{i+1|2i}^\top (\mathbf{U}_{i+1|2i} \mathbf{U}_{i+1|2i}^\top)^\dagger \mathbf{U}_{i+1|2i} \right) \mathbf{Z}^\top \\
&= \mathbf{Y}_{i+1|2i} \left(\mathbf{I} - \mathbf{Q}_1 \mathbf{Q}_1^\top \right) \mathbf{Z}^\top \\
&= \left(\mathbf{L}_{31} \mathbf{Q}_1^\top + \mathbf{L}_{32} \mathbf{Q}_2^\top + \mathbf{L}_{33} \mathbf{Q}_3^\top \right) \left(\mathbf{I} - \mathbf{Q}_1 \mathbf{Q}_1^\top \right) \mathbf{Z}^\top \\
&= \left(\mathbf{L}_{31} \mathbf{Q}_1^\top + \mathbf{L}_{32} \mathbf{Q}_2^\top + \mathbf{L}_{33} \mathbf{Q}_3^\top - \underbrace{\mathbf{L}_{31} \mathbf{Q}_1^\top \mathbf{Q}_1 \mathbf{Q}_1^\top}_{\mathbf{L}_{31} \mathbf{Q}_1} \right. \\
&\quad \left. - \underbrace{\mathbf{L}_{32} \mathbf{Q}_2^\top \mathbf{Q}_1 \mathbf{Q}_1^\top}_{=0} - \underbrace{\mathbf{L}_{33} \mathbf{Q}_3^\top \mathbf{Q}_1 \mathbf{Q}_1^\top}_{=0} \right) \mathbf{Z}^\top \\
&= \left(\mathbf{L}_{32} \mathbf{Q}_2^\top + \mathbf{L}_{33} \mathbf{Q}_3^\top \right) \left(\mathbf{L}_{21} \mathbf{Q}_1^\top + \mathbf{L}_{22} \mathbf{Q}_2^\top \right)^\top \\
&= \underbrace{\mathbf{L}_{32} \mathbf{Q}_2^\top \mathbf{Q}_1 \mathbf{L}_{21}^\top}_{=0} + \mathbf{L}_{32} \underbrace{\mathbf{Q}_2^\top \mathbf{Q}_2}_{=I} \mathbf{L}_{22}^\top \\
&\quad + \underbrace{\mathbf{L}_{33} \mathbf{Q}_3^\top \mathbf{Q}_1 \mathbf{L}_{21}^\top}_{=0} + \underbrace{\mathbf{L}_{33} \mathbf{Q}_3^\top \mathbf{Q}_2 \mathbf{L}_{22}^\top}_{=0} \\
&= \mathbf{L}_{32} \mathbf{L}_{22}^\top.
\end{aligned} \tag{A.19}$$

■

Im Gegensatz zu den Projektionen, bei denen die Matrix \mathbf{Q} bei der Berechnung in den 4SID-Algorithmen wegfällt bzw. als Ähnlichkeitstransformation der Zustandsdarstellung aufgefasst und daher auch weggelassen werden kann, taucht sie beim Hilfsvariablenansatz zur Schätzung des schiefen Prädiktors überhaupt nicht auf.

Anhang B

Parameter der PEMFC-Stack-Modelle

In diesem Anhang sind die Parameter der Simulationsmodelle aus Kapitel 5 und der partiell inversen Modelle aus Kapitel 6 zusammengefasst.

B.1 Uryson-Modell

Es werden jeweils die Parameter der Modelle angegeben, die auch bei der Validation der Gesamtmodelle berücksichtigt wurden.

Zunächst werden im Folgenden die Parameter des MLP angegeben. Die Reihenfolge der Eingangsgrößen entspricht der in der Abbildung 5.1 gezeigten Anordnung. Die Gewichte zwischen den vier Eingangsneuronen und den sechs Neuronen der verdeckten Schicht sind gegeben durch die Matrix \mathbf{W}_h mit

$$\mathbf{W}_h^T = \begin{bmatrix} -3.4131 & 1.5915 & 1.2450 & -3.7936 & 1.5802 & 0.8068 \\ 3.6415 & 0.9334 & -0.1807 & -0.0174 & 14.5886 & -0.5979 \\ -0.6011 & -1.5899 & -0.1312 & 0.2316 & -6.0595 & -11.9759 \\ -0.7700 & -0.0283 & -0.0005 & 0.0010 & 0.2789 & 0.0454 \end{bmatrix}. \quad (\text{B.1})$$

Der Schwellwertvektor der sechs Neuronen in der verdeckten Schicht lautet

$$\vartheta_h^T = [-4.5265 \quad -0.1066 \quad -0.5930 \quad 0.1427 \quad -27.5281 \quad 15.9911]. \quad (\text{B.2})$$

Die Gewichte zwischen den Neuronen der verdeckten Schicht und dem Neuron der Ausgangsschicht sind durch den Vektor

$$\mathbf{w}_o = [0.0540 \quad -0.0867 \quad -0.1414 \quad 0.0564 \quad 0.0046 \quad -0.0094] \quad (\text{B.3})$$

gegeben. Der Schwellwert für das Ausgangsneuron ist $\vartheta_o = 0.7863$.

Für das dynamische Teilmodell werden zunächst die Übertragungsfunktionen zu den Modellen aus den Tabellen 5.10 und 5.11 angegeben, bei denen auch die hoch aufgelösten Daten berücksichtigt wurden. Die Übertragungsfunktion dritter Ordnung für die Stromdichte für den Fall ohne zusätzliche Übertragungsfunktion für die Sauerstoffstöchiometrie lautet mit dem Kennfeld als statischem Teilmodell

$$G_j(s) = \frac{4.778s^3 - 654s^2 - 12.69s}{260.2s^3 + 8973s^2 + 745.4s + 1} \quad (\text{B.4})$$

und mit dem neuronalen Netz als statischem Teilmodell

$$G_j(s) = \frac{2.269s^3 - 307.5s^2 - 9.203s}{126.6s^3 + 4197s^2 + 529.1s + 1}. \quad (\text{B.5})$$

Bei Berücksichtigung einer Übertragungsfunktion erster Ordnung für die Sauerstoffstöchiometrie wurden für das Kennfeld als statisches Teilmodell die Funktionen

$$G_j(s) = \frac{2.151s^3 - 833.1s^2 - 12.22s}{207.8s^3 + 8695s^2 + 553.6s + 1} \quad \text{und} \quad G_{\lambda_{\text{O}_2}}(s) = \frac{-0.02664s}{8.732s + 1} \quad (\text{B.6})$$

sowie für das MLP die Funktionen

$$G_j(s) = \frac{2.697s^3 - 819.7s^2 - 10.99s}{207.9s^3 + 8740s^2 + 550.5s + 1} \quad \text{und} \quad G_{\lambda_{\text{O}_2}}(s) = \frac{-0.0284s}{9.457s + 1} \quad (\text{B.7})$$

berechnet.

Für die Daten mit $T_A = 1$ s werden die Parameter der dynamischen Teilmodelle angegeben, die in den Tabellen 5.12 und 5.13 verwendet wurden. Bei reiner Betrachtung einer Übertragungsfunktion für die Stromdichte lautet diese für das Kennfeld

$$G_j(s) = \frac{-10.38s}{545s + 1} \quad (\text{B.8})$$

und für das MLP

$$G_j(s) = \frac{-8.882s}{490s + 1}. \quad (\text{B.9})$$

Bei Berücksichtigung der Sauerstoffstöchiometrie im dynamischen Teilmodell ergeben sich für das Kennfeld

$$G_j(s) = \frac{-10.35s}{465.9s + 1} \quad \text{und} \quad G_{\lambda_{\text{O}_2}}(s) = \frac{89.99s}{4.674 \cdot 10^4s + 1} \quad (\text{B.10})$$

sowie für das neuronale Netz

$$G_j(s) = \frac{-8.922s}{414.3s + 1} \quad \text{und} \quad G_{\lambda_{\text{O}_2}}(s) = \frac{60.09s}{3.775 \cdot 10^4 s + 1}. \quad (\text{B.11})$$

Für das mit `n4sid` berechnete Zustandsraummodell ergeben sich beim Kennfeld die Parametermatrizen

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0.9718 & -0.0873 \\ -0.0106 & 0.9439 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B} = 10^{-3} \cdot \begin{bmatrix} 0.5796 & 0.0043 \\ 0.2642 & 0.0008 \end{bmatrix}, \quad (\text{B.12})$$

$$\mathbf{c}^T = [3.1798 \quad 0.6583], \quad \mathbf{d}^T = [-0.0514 \quad 0.0010]. \quad (\text{B.13})$$

Für das MLP lauten diese Parameter

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0.9677 & -0.0921 \\ -0.0103 & 0.9474 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B} = 10^{-3} \cdot \begin{bmatrix} 0.5962 & 0.0049 \\ 0.2234 & 0.0010 \end{bmatrix}, \quad (\text{B.14})$$

$$\mathbf{c}^T = [3.0262 \quad 0.6177], \quad \mathbf{d}^T = [-0.0483 \quad 0.0009]. \quad (\text{B.15})$$

Mit `ADAPTx` wurde jeweils ein Zustandsraummodell erster Ordnung verwendet, hier lauten die Parameter für das Kennfeld

$$a = 0.9297, \quad \mathbf{b}^T = [0.0981 \quad 0.0042], \quad (\text{B.16})$$

$$c = 0.0400, \quad \mathbf{d}^T = [-0.0617 \quad -2.5918 \cdot 10^{-4}]. \quad (\text{B.17})$$

und für das MLP

$$a = 0.9235, \quad \mathbf{b}^T = [0.1073 \quad 0.0045], \quad (\text{B.18})$$

$$c = 0.0382, \quad \mathbf{d}^T = [-0.0589 \quad -4.0664 \cdot 10^{-4}]. \quad (\text{B.19})$$

B.2 Lineares Zustandsraummodell

Die Reihenfolge der Eingangsgrößen in den folgenden Zustandsraummodellen entspricht der in Abbildung 5.24.

Zunächst werden die Parameter des Modells erster Ordnung mit Durchgriff und Nullpunktverschiebung y_{bias} angegeben, welches nur mit den Nennbetriebszyklen identifiziert wurde:

$$a = 0.9530, \quad c = 1.3563, \quad y_{\text{bias}} = -0.5610, \quad (\text{B.20})$$

$$\mathbf{b}^T = 10^{-3} \cdot \begin{bmatrix} -0.6533 & -0.1772 & 8.1748 & -5.1051 \\ 6.5500 & 18.2525 & 4.5285 & 0.8264 & 14.8362 \end{bmatrix}, \quad (\text{B.21})$$

$$\mathbf{d}^T = \begin{bmatrix} -0.2078 & 0.0329 & 0.0334 & 0.0445 \\ 0.1471 & -0.1313 & 0.0789 & 0.0019 & 0.2098 \end{bmatrix}. \quad (\text{B.22})$$

Das Modell erster Ordnung, welches mit dem kompletten Datensatz identifiziert wurde, hat die folgenden Parameter:

$$a = 0.9747, \quad c = 0.0324, \quad y_{\text{bias}} = 0.9255, \quad (\text{B.23})$$

$$\mathbf{b}^T = \begin{bmatrix} 0.0476 & 0.0003 & 0.0411 & -0.2233 \\ 0.1756 & 0.1157 & -0.0329 & 0.0111 & -0.1234 \end{bmatrix}, \quad (\text{B.24})$$

$$\mathbf{d}^T = \begin{bmatrix} -0.2198 & 0.0303 & 0.0266 & 0.0377 \\ 0.1446 & -0.1146 & 0.0463 & 0.0007 & 0.1075 \end{bmatrix}. \quad (\text{B.25})$$

Für das Modell vierter Ordnung ergaben sich mit demselben Datensatz die folgenden Parameter:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0.0993 & -0.0621 & 0.0401 & -0.0232 \\ -2.6812 & 0.6514 & 0.2487 & 0.0415 \\ 2.7780 & -1.1122 & 0.2480 & 0.2400 \\ -0.1682 & 2.3387 & -0.4638 & -0.0921 \end{bmatrix}, \quad (\text{B.26})$$

$$\mathbf{c}^T = \begin{bmatrix} -0.1959 & 0.0148 & -0.0088 & 0.0018 \end{bmatrix}, \quad y_{\text{bias}} = 1.0299, \quad (\text{B.27})$$

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} 0.3356 & 0.0015 & -0.0449 & 0.0409 \\ 1.4505 & 0.3266 & -0.1150 & -1.0210 \\ 2.0588 & -0.4325 & -0.0398 & 3.6635 \\ -5.8877 & -2.3868 & 0.0452 & 6.0906 \\ -0.0234 & 0.2699 & 0.0652 & 0.0251 & 0.2105 \\ 1.0713 & 0.5621 & -0.1540 & 0.2824 & 0.2034 \\ -6.2499 & 1.5876 & -0.0339 & -0.7271 & -2.7981 \\ -4.5207 & 0.8649 & 2.6090 & -1.0837 & 4.7669 \end{bmatrix}, \quad (\text{B.28})$$

$$\mathbf{d}^T = \begin{bmatrix} -0.1653 & 0.0256 & 0.0374 & 0.0861 \\ 0.1149 & -0.1231 & 0.0546 & -0.0007 & 0.1337 \end{bmatrix}. \quad (\text{B.29})$$

B.3 Partiiell inverse Modelle

In diesem Abschnitt werden die Parameter der partiell inversen Modelle angegeben, die zu den Abbildungen in Kapitel 6 gehören. Dabei entspricht die Reihenfolge der Modelleingangsgrößen stets der in der jeweiligen Abbildung angegebenen Reihenfolge der Messgrößen.

Das Modell, welches zur in der Abbildung 6.4 gezeigten Schätzung des Luftvolumenstroms an der Kathode verwendet wurde, hat die Parameter

$$a = 0.9902, \quad c = -1.1198, \quad (\text{B.30})$$

$$\mathbf{b}^T = \begin{bmatrix} -0.0048 & 0.0044 & -0.0467 & 0.0577 & -0.0054 & -0.0014 & 0.0060 \end{bmatrix}, \quad (\text{B.31})$$

$$\mathbf{d}^T = 10^3 \cdot \begin{bmatrix} 0.4185 & 0.4242 & -0.5211 & 0.7710 & 0.0423 & -0.0546 & 1.0336 \end{bmatrix}. \quad (\text{B.32})$$

Die Parameter des Modells aus der Abbildung 6.5 zur Schätzung des Wasserstoffvolumenstroms sind

$$a = 0.9915, \quad c = -0.6287, \quad (\text{B.33})$$

$$\mathbf{b}^T = \begin{bmatrix} 0.0060 & -0.0008 & 0.0040 & 0.0255 \\ -0.0014 & 0.0046 & -0.0135 & -0.0203 & 0.0045 \end{bmatrix}, \quad (\text{B.34})$$

$$\mathbf{d}^T = \begin{bmatrix} 0.0744 & 0.2243 & -0.4548 & 0.7967 \\ 0.0433 & 0.2115 & 0.6495 & 0.0064 & 0.0746 \end{bmatrix}. \quad (\text{B.35})$$

Für das Modell erster Ordnung zur Schätzung des Volumenstroms von Stickstoff an der Anode aus der Abbildung 6.6 wurden die folgenden Parameter ermittelt:

$$a = 0.9983, \quad c = -0.7159, \quad (\text{B.36})$$

$$\mathbf{b}^T = \begin{bmatrix} 0.0303 & -0.0435 & 0.0006 & -0.0068 \\ -0.0028 & 0.0323 & -0.0027 & 0.0329 & -0.0389 \end{bmatrix}, \quad (\text{B.37})$$

$$\mathbf{d}^T = \begin{bmatrix} 0.7825 & 0.1527 & -0.2178 & -0.0709 \\ 0.0519 & 0.2434 & 0.0703 & -0.0118 & 0.4962 \end{bmatrix}. \quad (\text{B.38})$$

Für die Parameter des partiell inversen Modells zur Schätzung der Eingangsgröße „relative Feuchte der Luft“ aus der Abbildung 6.8 wurden die folgenden Werte bestimmt:

$$a = 0.9960, \quad c = 1.1527, \quad (\text{B.39})$$

$$\mathbf{b}^T = \begin{bmatrix} -0.0080 & -0.2214 & 0.2535 & 0.0014 & 0.0052 & -0.0145 & -0.0126 \end{bmatrix}. \quad (\text{B.40})$$

Anhang C

Betreute Studien- und Diplomarbeiten

C.1 Studienarbeiten

Gao, Xinrong: *Identifikationsbasierte Modellierung eines Erdgasreformers*. Studienarbeit 191, Institut für Regelungs- und Steuerungssysteme, Universität Karlsruhe (TH), 2006.

Waibel, Patrick: *Modellierung des Betriebsverhaltens eines PEM-Brennstoffzellenstacks mittels Neuronaler Netze*. Studienarbeit 202, Institut für Regelungs- und Steuerungssysteme, Universität Karlsruhe (TH), 2006.

Nickl, Stephanie: *Modellierung eines PEM-Brennstoffzellenstacks mittels Canonical Variate Analysis für lineare Systeme*. Studienarbeit 207, Institut für Regelungs- und Steuerungssysteme, Universität Karlsruhe (TH), 2007.

Eswein, Mathias: *Schätzung nicht messbarer Eingangsgrößen eines PEM-Brennstoffzellen-Stacks*. Studienarbeit 216, Institut für Regelungs- und Steuerungssysteme, Universität Karlsruhe (TH), 2008.

Gičans, Olga: *Herleitung der linearen Canonical Variate Analysis (CVA) auf Basis der multivariaten statistischen Analyse*. Studienarbeit 219, Institut für Regelungs- und Steuerungssysteme, Universität Karlsruhe (TH), 2009.

Eidam, Alexander: *Verbesserte Schätzung nicht messbarer Eingangsgrößen eines PEMFC-Stacks im dynamischen Betrieb*. Studienarbeit 225, Institut für Regelungs- und Steuerungssysteme, Universität Karlsruhe (TH), 2009.

C.2 Diplomarbeiten

Ganser, Michael: *Identifikationsgestützte Modellierung eines PEM-Brennstoffzellenstacks*. Diplomarbeit 783, Institut für Regelungs- und Steuerungssysteme, Universität Karlsruhe (TH), 2005.

Pecheur, Gwendaëlle: *Verifikation und Erweiterung eines Diagnoseansatzes für PEM-Brennstoffzellen mittels Cluster-Analyse*. Diplomarbeit 787, Institut für Regelungs- und Steuerungssysteme, Universität Karlsruhe (TH), 2006.

Vornberger, Christian: *Identifikationsgestützte Modellierung eines PEM-Brennstoffzellenstacks in verschiedenen Betriebsbereichen*. Diplomarbeit 790, Institut für Regelungs- und Steuerungssysteme, Universität Karlsruhe (TH), 2006.

Krutina, Patrick: *Vergleich von Informationskriterien zur Bewertung der Güte von Black-Box-Identifikationsmodellen*. Diplomarbeit 811, Institut für Regelungs- und Steuerungssysteme, Universität Karlsruhe (TH), 2008.

Seeliger, Florian: *Untersuchung der Prädiktor-basierten Subspace-Identification im Vergleich zu geometrischen und statistischen Algorithmen*. Diplomarbeit 813, Institut für Regelungs- und Steuerungssysteme, Universität Karlsruhe (TH), 2009.

Anhang D

Veröffentlichungen und Tagungsbeiträge

Buchholz, Michael; Krebs, Volker: *Black-Box Modelling of PEMFC Stacks by Canonical Variate Analysis (CVA)*. In: *6th Symposium on Fuel Cell Modelling and Experimental Validation*, Bad Herrenalb, 2009.

Buchholz, Michael; Krebs, Volker: *Subspace-Identification-Methoden zur dynamischen Modellierung von PEM-Brennstoffzellen*. In: *Workshop des GMA-Fachausschusses 1.30*, Seiten 79–89, Technische Universität Wien, ACIN, Salzburg-Anif, 2008.

Buchholz, Michael; Eswein, Mathias; Krebs, Volker: *Modelling PEM Fuel Cell Stacks for FDI Using Linear Subspace Identification*. In: *Proceedings of the 17th IEEE International Conference on Control Applications, Part of 2008 IEEE Multi-conference on Systems and Control*, Seiten 341–346, San Antonio, 2008.

Buchholz, Michael; Krebs, Volker: *A Modular Non-linear Dynamic Model for PEMFC Stacks Based on System Identification*. In: *5th Symposium on Fuel Cell Modelling and Experimental Validation*, Winterthur, 2008.

Buchholz, Michael; Pecheur, Gwendaëlle; Niemeyer, Jens; Krebs, Volker: *Fault Detection and Isolation for PEM Fuel Cell Stacks Using Fuzzy Clusters*. In: *Proceedings of the European Control Conference*, Seiten 971–977, Kos, 2007.

Buchholz, Michael; Krebs, Volker: *Dynamic Modelling of a Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell Stack by Nonlinear System Identification*. In: *Fuel Cells*, Band 07, Nr. 5, Seiten 392–401, 2007.

Buchholz, Michael; Pecheur, Gwendaëlle; Niemeyer, Jens; Krebs, Volker: *PEMFC fault diagnosis based on fuzzy cluster analysis*. In: *Fuel Cells Science & Technology - Scientific Advances in Fuel Cell Systems*, Turin, 2006.

Nomenklatur

Matrizen und Vektoren sind in dieser Arbeit gegenüber skalaren Größen durch Fettschrift abgesetzt. Rein stochastische Größen werden mit griechischen Buchstaben bezeichnet.

Produktnamen sind durch Kapitälchen hervorgehoben.

Symbole und Formelzeichen

PEM-Brennstoffzelle

u_{cell}	mittlere Zellspannung
$u_{\text{cell,max}}$	maximale mittlere Zellspannung
j	Stromdichte
λ_{O_2}	Sauerstoffstöchiometrie an der Kathode
$G_j(s)$	Übertragungsfunktion für die Eingangsgröße Stromdichte
$G_{\lambda_{\text{O}_2}}(s)$	Übertragungsfunktion für die Eingangsgröße Sauerstoffstöchiometrie

Allgemein

$\mathbf{0}$	Nullvektor bzw. Nullmatrix
$\mathbf{G}_{\mathcal{L}}(s)$	Matrix von Übertragungsfunktionen im Laplace-Bereich
$\mathbf{G}_3(z)$	Matrix von Übertragungsfunktionen im z-Bereich
\mathbf{I}	Einheitsmatrix
N	Gesamtzahl der Datenpunkte im Datensatz
t	Zeit
T_A	Abtastzeit
$k \in \mathbb{Z}$	Abtastschritt
μ_{ξ}	Erwartungswert von ξ
$\Sigma_{\xi\xi}$	Kovarianzmatrix von ξ

Operatoren

$\ \mathbf{A}\ _2$	2-Norm der Matrix \mathbf{A}
$\ \mathbf{A}\ _F$	Frobenius-Norm der Matrix \mathbf{A}
\mathbf{A}^T	Transponierte der Matrix \mathbf{A}
\mathbf{A}^\dagger	Pseudoinverse der Matrix \mathbf{A}
\mathbf{A}^\perp	orthogonales Komplement des Zeilenraums von \mathbf{A}
$\mathbf{A}/\mathbf{B} = \mathbf{A}\Pi_{\mathbf{B}}$	senkrechte Projektion des Zeilenraums von \mathbf{A} auf den Zeilenraum von \mathbf{B}
$\mathbf{A}/\mathbf{B}^\perp = \mathbf{A}\Pi_{\mathbf{B}^\perp}$	senkrechte Projektion des Zeilenraums von \mathbf{A} auf das orthogonale Komplement des Zeilenraums von \mathbf{B}
$\text{def}(\mathbf{A})$	Defekt der Matrix \mathbf{A}
$\text{im}(\mathbf{A})$	Spaltenraum der Matrix \mathbf{A}
$\text{ker}(\mathbf{A}) = \text{null}(\mathbf{A})$	Kern / Nullraum der Matrix \mathbf{A}
$\text{spur}(\mathbf{A})$	Spur der Matrix \mathbf{A}
$\text{rg}(\mathbf{A})$	Rang der Matrix \mathbf{A}
$\text{diag}(a_1, \dots, a_n)$	Diagonalmatrix mit a_1 bis a_n auf der Hauptdiagonalen
$\text{vec}(\mathbf{A})$	Vektor, der aus den von links nach rechts untereinander angeordneten Spalten der Matrix \mathbf{A} zusammengesetzt ist

Schätzverfahren

\hat{a}	Schätzwert von a
e	Fehler zwischen Messung und Schätzung
J	Gütemaß
\mathcal{L}	Likelihood-Funktion
P	Parametermatrix
W	Gewichtungsmatrix
Z	Hilfsvariablen
$\hat{\mu}$	Stichprobenmittelwert
$\hat{\Sigma}$	Stichprobenkovarianzmatrix

Matrixzerlegungen

L	untere Dreiecksmatrix bei der (reduzierten) LQ-Zerlegung
Q	in den Spalten orthogonale Transformationsmatrix bei der (reduzierten) LQ- und QR-Zerlegung

M	orthogonale Matrix der linken Singulärvektoren bei der SVD
N	orthogonale Matrix der rechten Singulärvektoren bei der SVD
S	Diagonalmatrix der Singulärwerte bei der SVD
\widetilde{M}	Matrix der linken Singulärvektoren bei der reduzierten GSVD
\widetilde{N}	Matrix der rechten Singulärvektoren bei der reduzierten GSVD
\widetilde{S}	Diagonalmatrix der Singulärwerte bei der reduzierten GSVD
$W_{\widetilde{M}}$	Gewichtungsmatrix mit den Bedingungen an die Zeilen der zerlegten Matrix bei der reduzierten GSVD
$W_{\widetilde{N}}$	Gewichtungsmatrix mit den Bedingungen an die Spalten der zerlegten Matrix bei der reduzierten GSVD

Zustandsraumdarstellungen

$\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^n$	Zustandsraum (Definitionsbereich der Zustandsgröße)
$\mathcal{U} \subseteq \mathbb{R}^p$	Eingangsraum (Definitionsbereich der Eingangsgröße)
$\mathcal{Y} \subseteq \mathbb{R}^q$	Ausgangsraum (Definitionsbereich der Ausgangsgröße)
n	Dimension des Zustandsraums, Ordnung des Systems
p	Dimension des Eingangsraums
q	Dimension des Ausgangsraums
$\mathbf{x}(t)$ bzw. $\mathbf{x}(k)$	Zustandsvektor zum Zeitpunkt t bzw. $k \cdot T_A$
$\mathbf{u}(t)$ bzw. $\mathbf{u}(k)$	Eingangsvektor zum Zeitpunkt t bzw. $k \cdot T_A$
$\mathbf{y}(t)$ bzw. $\mathbf{y}(k)$	Ausgangsvektor zum Zeitpunkt t bzw. $k \cdot T_A$
$\mathbf{z}(t)$ bzw. $\mathbf{z}(k)$	Störgröße zum Zeitpunkt t bzw. $k \cdot T_A$
$\boldsymbol{\xi}(t)$ bzw. $\boldsymbol{\xi}(k)$	Messrauschen zum Zeitpunkt t bzw. $k \cdot T_A$
$\boldsymbol{\psi}(t)$ bzw. $\boldsymbol{\psi}(k)$	Systemrauschen zum Zeitpunkt t bzw. $k \cdot T_A$
$\mathbf{e}(t)$ bzw. $\mathbf{e}(k)$	Ausgangsfehler (Innovation) zum Zeitpunkt t bzw. $k \cdot T_A$
A	Dynamikmatrix oder Systemmatrix, Transitionsmatrix
A_K	Systemmatrix in der Prädiktorform
B	Eingangsmatrix
B_K	Eingangsmatrix in der Prädiktorform
C	Ausgangsmatrix

D	Durchgriffsmatrix oder Durchgangsmatrix
E	Einflussmatrix der Störgröße in der Systemgleichung
F	Einflussmatrix der Störgröße in der Ausgangsgleichung
K	Kalman-Matrix
$f(\cdot)$	Systemfunktion
$g(\cdot)$	Ausgangsfunktion

4SID-Verfahren

ℓ_f	Zukunftshorizont (HOARX)
ℓ_p	Vergangenheitshorizont (HOARX)
$U_f(k), Y_f(k)$	einfache Datenmatrizen der Zukunft für den Zeitpunkt $k \cdot T_A$
$U_p(k), Y_p(k)$	einfache Datenmatrizen der Vergangenheit für den Zeitpunkt $k \cdot T_A$
$X_p(k), X_f(k)$	Zustandsfolge der Vergangenheit bzw. der Zukunft für den Zeitpunkt $k \cdot T_A$
i	halbe Anzahl der Blockzeilen (Horizont) der Block-Hankel-Datenmatrizen
j	Anzahl der Spalten der Block-Hankel-Datenmatrizen
$U_{1 i}, Y_{1 i}, E_{1 i}$	Block-Hankel-Datenmatrizen der Vergangenheit
$U_{i+1 2i}, Y_{i+1 2i}, E_{i+1 2i}$	Block-Hankel-Datenmatrizen der Zukunft
X_i	Zustandsfolge für die Block-Hankel-Matrizen
$Q_{B,i}$ bzw. $Q_{B,K,i}$	erweiterte Beobachtbarkeitsmatrix für die Innovations- bzw. Prädiktorform
$Q_{S,i}^{\text{determ}}$ bzw. $Q_{S,K,i}^{\text{determ}}$	umgekehrte erweiterte Steuerbarkeitsmatrix für die Innovations- bzw. Prädiktorform
$Q_{S,i}^{\text{stoch}}$	analog zur umgekehrten erweiterten Steuerbarkeitsmatrix und Innovationsform aufgebaute Parametermatrix für die Innovationen in den Subspace-Gleichungen der Innovationsform
H_i^{determ} bzw. $H_{K,i}^{\text{determ}}$	Blockparametermatrix für die Eingangsgrößen in den Subspace-Gleichungen in Innovations- bzw. Prädiktorform
H_i^{stoch}	Blockparametermatrix für die Innovationen in den Subspace-Gleichungen in Innovationsform
O_i bzw. $O_{K,i}$	schiefer Prädiktor für die Innovations- bzw. Prädiktorform

Abkürzungen

4SID	Subspace-based State-Space System Identification
AIC	Akaike Information Criterion (Informationskriterium nach Akaike)
AIC	corrected Akaike Information Criterion (für kleine Stichproben korrigiertes Informationskriterium nach Akaike)
AFC	alkaline fuel cell (alkalische Brennstoffzelle)
AR	autoregressive (autoregressiv)
ARMA	autoregressive moving average (autoregressiv und mit gleitendem Mittelwert)
ARMAX	autoregressive moving average with exogenous inputs (autoregressiv, mit gleitendem Mittelwert und Eingangsgrößen)
ARX	autoregressive with exogenous inputs (autoregressiv und mit Eingangsgrößen)
BHKW	Blockheizkraftwerk
BLUE	best linear unbiased estimator (minimalvarianter linearer erwartungstreuer Schätzer)
CCA	canonical correlation analysis (kanonische Korrelationsanalyse)
CVA	canonical variate analysis (kanonische Variatenanalyse)
DC	direct current (Gleichstrom)
DMFC	direct methanol fuel cell (Direkt-Methanol-Brennstoffzelle)
GLS	generalized least squares (verallgemeinerte kleinste Quadrate)
GSVD	generalized singular value decomposition (verallgemeinerte Singulärwertzerlegung)
HOARX	high-order ARX (ARX mit hoher Ordnung)
HT-PEMFC	high temperature PEMFC (Hochtemperatur-PEMFC)
IV	instrumental variables (Hilfsvariablen)
KF	Kennfeld
KNN	künstliches neuronales Netz
KW	Kühlwasser
LS	least squares (kleinste Quadrate)
LTI	linear time-invariant (linear und zeitinvariant)
LPV	linear parameter-varying (linear mit variierenden Parametern)
MCFC	molten carbonate fuel cell (Schmelzkarbonat-Brennstoffzelle)
MIMO	multiple input multiple output (Mehrgrößenfall)

MLP	multi-layer perceptron (mehrlagiges Perzeptron)
MOESP	Multivariable Output Error State Space Identification (Ausgangsfehler-basierte Mehrgrößen-Systemidentifikation im Zustandsraum)
MSE	mean squared error (mittlerer quadratischer Fehler)
N4SID	Numerical Algorithm(s) for Subspace State Space System Identification (numerischer Algorithmus / numerische Algorithmen zur Unterraum-basierten Systemidentifikation im Zustandsraum)
NASA	National Aeronautics and Space Administration (zivile Bundesbehörde der USA für Luft- und Raumfahrt)
NEFZ	Neuer Europäischer Fahrzyklus
NLS	nichtlinearer LS-Schätzer
OLS	gewöhnliche LS-Schätzung
PAFC	phosphoric acid fuel cell (Phosphorsäure-Brennstoffzelle)
PBSID	Predictor-based Subspace Identification (Prädiktor-basierte Unterraum-Identifikation)
PBSIDopt	optimized PBSID (optimierte PBSID)
PCA	principal component analysis (Hauptkomponentenanalyse)
PEM	Polymerelektrolytmembran
PEMFC	PEM fuel cell (PEM-Brennstoffzelle)
PI-MOESP	past input MOESP (MOESP mit vergangenen Eingängen als Hilfsvariablen)
PO-MOESP	past output MOESP (MOESP mit vergangenen Ein- und Ausgängen als Hilfsvariablen)
RBFN	Radial-Basisfunktionen-Netzwerk
SISO	single input single output (Eingrößenfall)
SOFC	solid oxid fuel cell (Festelektrolyt-Brennstoffzelle)
SSE	sum of squared errors (Summe der quadratischen Fehler)
SVD	singular value decomposition (Singulärwertzerlegung)
THDA	total harmonic distortion analysis (vollständige Klirrfaktoranalyse)
WLS	weighted least squares (gewichtete kleinste Quadrate)
ZRM	Zustandsraummodell

Literaturverzeichnis

- [Abd07] Abdi, Hervé: *Singular and Generalized Singular Value Decomposition*. In: Salkind, Neil (Herausgeber): *Encyclopedia of Measurement and Statistics*, Band 3, Seiten 907–912, Sage, Thousand Oaks, 2007.
- [Ada09] Adaptics, Inc.: *Bezugsquelle für ADAPT_X und ADAPT_{NL}*. <http://www.adaptics.com>, zuletzt besucht im August 2009.
- [AHK⁺09] Arens, Tilo; Hettlich, Frank; Karpfinger, Christian; Kockelkorn, Ulrich; Lichtenegger, Klaus; Stachel, Hellmuth: *Mathematik*. Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, korrigierter Nachdruck der 1. Auflage, 2009.
- [Ait35] Aitken, Alexander Craig: *On least squares and linear combinations of observations*. In: *Proceedings of the Royal Society of Edinburgh*, Band 55, Seiten 42–48, 1935.
- [Aka73] Akaike, Hirotugu: *Information theory and an extension of the maximum likelihood principle*. In: Nikolaevič, Petrov Boris; Frigyes, Csáki (Herausgeber): *Proceedings of the 2nd International Symposium on Information Theory*, Seiten 267–281, Akademia Kiadó, Budapest, 1973.
- [Aka74] Akaike, Hirotugu: *Stochastic theory of minimal realization*. In: *IEEE Transactions on Automatic Control*, Band 19, Nr. 6, Seiten 667–674, 1974.
- [Aka75] Akaike, Hirotugu: *Markovian Representation of Stochastic Processes by Canonical Variables*. In: *SIAM Journal on Control*, Band 13, Nr. 1, Seiten 162–173, 1975.
- [Aka76] Akaike, Hirotugu: *Canonical correlation analysis of time series and the use of an information criterion*. In: Mehra, Raman K.; Lainiotis, Dimitri G. (Herausgeber): *System Identification: Advances and Case Studies*, Band 126 der Reihe *Mathematics in science and engineering*, Academic Press Inc, New York, 1976.
- [And03] Anderson, Theodore W.: *An introduction to multivariate statistical analysis*. Wiley series in probability and statistics, Wiley, Hoboken, 3. Auflage, 2003.

- [Bac06] Back, Michael: *Prädiktive Antriebsregelung zum Energieoptimalen Betrieb von Hybridfahrzeugen*, Band 02 der Reihe *Schriften des Instituts für Regelungs- und Steuerungssysteme*, Universität Karlsruhe (TH). Universitätsverlag Karlsruhe, Karlsruhe, 2006.
- [Bau98] Bauer, Dietmar: *Some Asymptotic Theory for the Estimation of Linear Systems Using Maximum Likelihood Methods or Subspace Algorithms*. Dissertation, Technische Universität Wien, 1998.
- [Bau01] Bauer, Dietmar: *Order estimation for subspace methods*. In: *Automatica*, Band 37, Nr. 10, Seiten 1561–1573, 2001.
- [BEK08] Buchholz, Michael; Eswein, Mathias; Krebs, Volker: *Modelling PEM Fuel Cell Stacks for FDI Using Linear Subspace Identification*. In: *Proceedings of the 17th IEEE International Conference on Control Applications, Part of 2008 IEEE Multi-conference on Systems and Control*, Seiten 341–346, San Antonio, 2008.
- [BH94] Brown, Martin; Harris, Chris: *Neurofuzzy adaptive modelling and control*. Prentice Hall, New York, 1994.
- [BHS93] Bojanov, Borislav D.; Hakopian, Hakop A.; Sahakian, Artur A.: *Spline Functions and Multivariate Interpolations*, Band 248 der Reihe *Mathematics and Its Applications*. Kluwer Academic, Dordrecht, 1993.
- [BJ00] Bauer, Dietmar; Jansson, Magnus: *Analysis of the asymptotic properties of the MOESP type of subspace algorithms*. In: *Automatica*, Band 36, Nr. 4, Seiten 497–509, 2000.
- [BK07] Buchholz, Michael; Krebs, Volker: *Dynamic Modelling of a Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell Stack by Nonlinear System Identification*. In: *Fuel Cells*, Band 07, Nr. 5, Seiten 392–401, 2007.
- [BK08a] Buchholz, Michael; Krebs, Volker: *A Modular Non-linear Dynamic Model for PEMFC Stacks Based on System Identification*. In: *5th Symposium on Fuel Cell Modelling and Experimental Validation*, Winterthur, 2008.
- [BK08b] Buchholz, Michael; Krebs, Volker: *Subspace-Identification-Methoden zur dynamischen Modellierung von PEM-Brennstoffzellen*. In: *Workshop des GMA-Fachausschusses 1.30*, Seiten 79–89, Technische Universität Wien, ACIN, Salzburg-Anif, 2008.
- [BK09] Buchholz, Michael; Krebs, Volker: *Black-Box Modelling of PEMFC Stacks by Canonical Variate Analysis (CVA)*. In: *6th Symposium on Fuel Cell Modelling and Experimental Validation*, Bad Herrenalb, 2009.
- [BL02] Bauer, Dietmar; Ljung, Lennart: *Some facts about the choice of the weighting matrices in Larimore type of subspace algorithms*. In: *Automatica*, Band 38, Nr. 5, Seiten 763–773, 2002.

- [BM99] Bemporad, Alberto; Morari, Manfred: *Control of Systems Integrating Logic, Dynamics, and Constraints*. In: *Automatica*, Band 35, Nr. 3, Seiten 407–427, 1999.
- [Boo01] de Boor, Carl: *A Practical Guide to Splines*, Band 27 der Reihe *Applied Mathematical Sciences*. Springer, New York, überarbeitete Auflage, 2001.
- [Bos04] Bossel, Hartmut: *Systeme, Dynamik, Simulation: Modellbildung, Analyse und Simulation komplexer Systeme*. Books on Demand, Norderstedt, 2004.
- [BPNK06] Buchholz, Michael; Pecheur, Gwendaëlle; Niemeyer, Jens; Krebs, Volker: *PEMFC fault diagnosis based on fuzzy cluster analysis*. In: *Fuel Cells Science & Technology - Scientific Advances in Fuel Cell Systems*, Turin, 2006.
- [BPNK07] Buchholz, Michael; Pecheur, Gwendaëlle; Niemeyer, Jens; Krebs, Volker: *Fault Detection and Isolation for PEM Fuel Cell Stacks Using Fuzzy Clusters*. In: *Proceedings of the European Control Conference*, Seiten 971–977, Kos, 2007.
- [BTSM04] Brunetto, C.; Tina, G.; Squadrito, G.; Moschetto, A.: *PEMFC diagnostics and modelling by electrochemical impedance spectroscopy*. In: *Proceedings of the 12th IEEE Mediterranean Electrotechnical Conference*, Band 3, Seiten 1045–1050, Dubrovnik, 2004.
- [CBW79] Candy, J. V.; Bullock, T. E.; Warren, M. E.: *Invariant system description of the stochastic realization*. In: *Automatica*, Band 15, Nr. 4, Seiten 493–495, 1979.
- [Chi06] Chiuso, Alessandro: *Asymptotic equivalence of certain closed-loop subspace identification methods*. In: *Proceedings of the 14th IFAC Symposium on System Identification*, Newcastle, 2006.
- [Chi07a] Chiuso, Alessandro: *On the Relation Between CCA and Predictor-Based Subspace Identification*. In: *IEEE Transactions on Automatic Control*, Band 52, Nr. 10, Seiten 1795–1812, 2007.
- [Chi07b] Chiuso, Alessandro: *The role of vector autoregressive modeling in predictor-based subspace identification*. In: *Automatica*, Band 43, Nr. 6, Seiten 1034–1048, 2007.
- [Chi09a] Chiuso, Alessandro: *On the asymptotic properties of closed-loop CCA-type Subspace Algorithms: Equivalence results and choice of the future horizon*. In: *IEEE Transactions on Automatic Control*, 2009. Zur Veröffentlichung angenommen, Vorabversion erhältlich unter <http://www.dei.unipd.it/~chiuso/>.

- [Chi09b] Chiuso, Alessandro: *Sourcecode einer Implementierung der PBSI-Dopt für MATLAB*. <http://www.dei.unipd.it/~chiuso/DOWNLOAD/Dottorato.zip>, zuletzt besucht im August 2009.
- [CM96] Chui, Nelson Loong Chik; Maciejowski, Jan M.: *Realization of stable models with subspace methods*. In: *Automatica*, Band 32, Nr. 11, Seiten 1587–1595, 1996.
- [CM00] Chen, Huixin; Maciejowski, Jan: *An improved subspace identification method for bilinear systems*. In: *Proceedings of the 39th IEEE Conference on Decision and Control*, Band 2, Seiten 1573–1578, Sydney, 2000.
- [CM03] de Cock, Katrien; de Moor, Bart: *Subspace identification methods*. In: *UNESCO Encyclopedia of Life Support Systems EOLSS*, Band 1, Kapitel 5.5: Control Systems, Robotics, and Automation, Seiten 933–979, EOLSS, Oxford, 2003.
- [CMM09] Chiuso, Alessandro; Muradore, Riccardo; Marchetti, Enrico: *Dynamic calibration of adaptive optics systems: A system identification approach*. In: *IEEE Transactions on Control Systems Technology*, 2009. Zur Veröffentlichung angenommen, Vorabversion erhältlich unter <http://www.dei.unipd.it/~chiuso/>.
- [CP03] Chiuso, Alessandro; Picci, Giorgio: *Geometry of Oblique Splitting Subspaces, Minimality and Hankel Operators*. In: Rantzer, Anders; Byrnes, Christopher I. (Herausgeber): *Directions in Mathematical Systems Theory and Optimization*, Band 286 der Reihe *Lecture Notes in Control and Information Sciences*, Seiten 85–126, Springer, Berlin, 2003.
- [CP04] Chiuso, Alessandro; Picci, Giorgio: *On the ill-conditioning of subspace identification with inputs*. In: *Automatica*, Band 40, Nr. 4, Seiten 575–589, 2004.
- [CP05] Chiuso, Alessandro; Picci, Giorgio: *Consistency analysis of some closed-loop subspace identification methods*. In: *Automatica*, Band 41, Nr. 3, Seiten 377–391, 2005.
- [Dan09] Danzer, Michael A.: *Dynamik und Effizienz von Polymer-Elektrolyt-Brennstoffzellen*. Der Andere Verlag, Tönning, 2009.
- [Dav93] Davis, Paul: *Levenberg-Marquart Methods and Nonlinear Estimation*. In: *SIAM News*, Band 26, Nr. 6, Seiten 1 & 8, 1993.
- [DFC09] *International Symposium on Diagnostic Tools for Fuel Cell Technologies*. <http://www.sintef.no/Projectweb/Diagnostics-Tools-For-Fuel-Cell-Technologies/>, zuletzt besucht im Oktober 2009.

- [DFPB96] Duchesne, Laurent; Feron, Eric; Paduano, James D.; Brenner, Marty: *Subspace identification with multiple data sets*. In: *Proceedings of the AIAA Guidance, Navigation and Control Conference*, San Diego, 1996.
- [DP04] Dittmar, Rainer; Pfeiffer, Bernd-Markus: *Modellbasierte prädiktive Regelung*. Oldenbourg, München, 2004.
- [Eid09] Eidam, Alexander: *Verbesserte Schätzung nicht messbarer Eingangsgrößen eines PEMFC-Stacks im dynamischen Betrieb*. Studienarbeit 225, Institut für Regelungs- und Steuerungssysteme, Universität Karlsruhe (TH), 2009.
- [Esw08] Eswein, Mathias: *Schätzung nicht messbarer Eingangsgrößen eines PEM-Brennstoffzellen-Stacks*. Studienarbeit 216, Institut für Regelungs- und Steuerungssysteme, Universität Karlsruhe (TH), 2008.
- [FDN⁺06] Fouquet, N.; Doulet, C.; Nouillant, C.; Dauphin-Tanguy, G.; Ould-Bouamama, B.: *Model based PEM fuel cell state-of-health monitoring via ac impedance measurements*. In: *Journal of Power Sources*, Band 159, Nr. 2, Seiten 905–913, 2006.
- [Föl93] Föllinger, Otto: *Lineare Abtastsysteme*. Oldenbourg, München, 5., durchgesehene Auflage, 1993.
- [Föl94] Föllinger, Otto: *Regelungstechnik*. Hüthig, Heidelberg, 8., überarbeitete Auflage, 1994.
- [Föl07] Föllinger, Otto: *Laplace-, Fourier- und z-Transformation*. Hüthig, Heidelberg, 9., überarbeitete Auflage, 2007.
- [FMO99] Favoreel, Wouter; de Moor, Bart; van Overschee, Peter: *Subspace identification of bilinear systems subject to white inputs*. In: *IEEE Transactions on Automatic Control*, Band 44, Nr. 6, Seiten 1157–1165, 1999.
- [Gan05] Ganser, Michael: *Identifikationsgestützte Modellierung eines PEM-Brennstoffzellenstacks*. Diplomarbeit 783, Institut für Regelungs- und Steuerungssysteme, Universität Karlsruhe (TH), 2005.
- [Gao06] Gao, Xinrong: *Identifikationsbasierte Modellierung eines Erdgasreformers*. Studienarbeit 191, Institut für Regelungs- und Steuerungssysteme, Universität Karlsruhe (TH), 2006.
- [GEVD09] Guétaz, Laure; Escribano, Sylvie; Vion-Dury, Benoît: *PEMFC degradation mechanism studied by Transmission Electron Microscopy*. In: *International Symposium on Diagnostic Tools for Fuel Cell Technologies*, Trondheim, 2009, <http://www.sintef.no/project/fc-tools/dokumenter/presentation/2a/Guetaz.pdf>.
- [Gič09] Gičans, Olga: *Herleitung der linearen Canonical Variate Analysis (CVA) auf Basis der multivariaten statistischen Analyse*. Studienar-

- beit 219, Institut für Regelungs- und Steuerungssysteme, Universität Karlsruhe (TH), 2009.
- [GL96] Golub, Gene H.; van Loan, Charles F.: *Matrix computations*. Johns Hopkins University Press, Baltimore, 3. Auflage, 1996.
- [Gro39] Grove, William Robert: *On Voltaic Series and the Combination of Gases by Platinum*. In: *The London and Edinburgh Philosophical Magazine and Journal of Science*, Band XIV, Nr. LXXXVI, Seiten 127–130, Februar 1839.
- [Gro42] Grove, William Robert: *On a Gaseous Voltaic Battery*. In: *The London, Edinburgh and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, Band XXI, Nr. CXL, Seiten 417–420, Dezember 1842.
- [GSDM01] van Gestel, Tony; Suykens, Johan A. K.; van Dooren, Paul; de Moor, Bart: *Identification of stable models in subspace identification by using regularization*. In: *IEEE Transactions on Automatic Control*, Band 46, Nr. 9, Seiten 1416–1420, 2001.
- [Hah95] Hahn, Gerald J.: *A Conversation with Donald Marquardt*. In: *Statistical Science*, Band 10, Nr. 4, Seiten 377–393, 1995.
- [Has08] Haschka, Markus Stephan: *Online-Identifikation fraktionaler Impedanzmodelle für die Hochtemperaturbrennstoffzelle SOFC*, Band 04 der Reihe *Schriften des Instituts für Regelungs- und Steuerungssysteme, Universität Karlsruhe (TH)*. Universitätsverlag Karlsruhe, Karlsruhe, 2008.
- [HAW03] Hazenberg, Martijn; Astrid, Patricia; Weiland, Siep: *Low order modeling and optimal control design of a heated plate*. In: *Proceedings of the European Control Conference*, Cambridge, 2003.
- [HHSD96] de Hoon, M. J. L.; van der Hagen, T. H. J. J.; Schoonewelle, H.; van Dam, H.: *Why Yule-Walker should not be used for autoregressive modeling*. In: *Annals of Nuclear Energy*, Band 23, Nr. 15, Seiten 1219–1228, 1996.
- [HK66] Ho, B.L.; Kalman, Rudolf E.: *Effective construction of linear state-variable models from input/output functions*. In: *Regelungstechnik*, Band 14, Nr. 12, Seiten 545–548, 1966.
- [HK08] Huang, Biao; Kadali, Ramesh: *Dynamic Modeling, Predictive Control and Performance Monitoring: A Data-driven Subspace Approach*, Band 374 der Reihe *Lecture Notes in Control and Information Sciences*. Springer, London, 2008.
- [HLN03] He, W.; Lin, G.; van Nguyen, T.: *Diagnostic Tool to Detect Electrode Flooding in Proton-Exchange-Membrane Fuel Cells*. In: *American Institute of Chemical Engineers Journal*, Band 49, Nr. 12, Seiten 3221–3228, 2003.

- [Hod07] Hodrus, Thomas Erhard: *Prozessführungsstrategien für hybride Systeme*, Band 03 der Reihe *Schriften des Instituts für Regelungs- und Steuerungssysteme*, Universität Karlsruhe (TH). Universitätsverlag Karlsruhe, Karlsruhe, 2007.
- [Hot36] Hotelling, Harold: *Relations between two sets of variates*. In: *Biometrika*, Band 28, Nr. 3-4, Seiten 321–377, 1936.
- [HPK04] Hissel, D.; Pera, M. C.; Kauffmann, J. M.: *Diagnosis of automotive fuel cell power generators*. In: *Journal of Power Sources*, Band 128, Seiten 239–246, 2004.
- [HSW89] Hornik, Kurt; Stinchcombe, Maxwell; White, Halbert: *Multilayer feed-forward networks are universal approximators*. In: *Neural Networks*, Band 2, Nr. 5, Seiten 359–366, 1989.
- [HT89] Hurvich, Clifford M.; Tsai, Chih-Ling: *Regression and time series model selection in small samples*. In: *Biometrika*, Band 76, Nr. 2, Seiten 297–307, 1989.
- [HWK⁺04] Haschka, Markus; Weickert, Thomas; Krebs, Volker; Schäfer, Sven; Ivers-Tiffée, Ellen: *Identification of a Nonlinear Model for the Electrical Behavior of a Solid Oxide Fuel Cell*. In: *Proceedings of the 2. France-Deutschland Fuel Cell Conference*, Belfort, 2004.
- [HWK⁺06] Haschka, Markus; Weickert, Thomas; Krebs, Volker; Schäfer, Sven; Ivers-Tiffée, Ellen: *Identification of a nonlinear model for the electrical behavior of a solid oxide fuel cell*. In: *Journal of Power Sources*, Band 156, Nr. 1, Seiten 71–77, 2006.
- [Ioc82] Iochvidov, I. S.: *Hankel and Toeplitz matrices and forms*. Birkhäuser, Boston, 1982.
- [Ise92a] Isermann, Rolf: *Identifikation dynamischer Systeme*, Band 1: Grundlegende Methoden. Springer, Berlin, 2., neubearbeitete und erweiterte Auflage, 1992.
- [Ise92b] Isermann, Rolf: *Identifikation dynamischer Systeme*, Band 2: Besondere Methoden, Anwendungen. Springer, Berlin, 2., neubearbeitete und erweiterte Auflage, 1992.
- [ISM08] Ingimundarson, A.; Stefanopoulou, A.; McKay, D. A.: *Model-Based Detection of Hydrogen Leaks in a Fuel Cell Stack*. In: *IEEE Transactions on Control Systems Technology*, Band 16, Nr. 5, Seiten 1004–1012, 2008.
- [IT01] Ivers-Tiffée, Ellen: *Brennstoffzellen und Batterien*. Skriptum zur Vorlesung im Wintersemester 2001/2002, Institut für Werkstoffe der Elektrotechnik, Universität Karlsruhe (TH), 2001.

- [Jan03] Jansson, Magnus: *Subspace Identification and ARX Modeling*. In: *Proceedings of the 13th IFAC SYSID Symposium*, Seiten 887–892, Rotterdam, 2003.
- [Jan05] Jansson, Magnus: *A New Subspace Identification Method for Open and Closed Loop Data*. In: *Proceedings of the IFAC World Congress*, Prag, 2005.
- [JHF⁺05] Jemei, S.; Harel, F.; Francois, X.; Candusso, D.; Hissel, D.; Pera, M. C.; Kauffmann, J. M.: *PEM fuel cell modelization including durability considerations*. In: *Proceedings of the IEEE International Symposium on Industrial Electronics*, Band 2, Seiten 933–937, Dubrovnik, 2005.
- [JKT⁺09] Jungmann, Thomas; Kurz, Timo; Tian, Xiaohui; Alink, Robert; Georg, Anneke; Hebling, Christopher: *Methods for investigations on fuel cell degradation processes at Fraunhofer ISE*. In: *International Symposium on Diagnostic Tools for Fuel Cell Technologies*, Trondheim, 2009, http://www.sintef.no/project/fc-tools/dokumenter/presentation/posters/PosterTrondheim_final_jungmann.pdf.
- [JSL01] Juricek, Ben C.; Seborg, Dale E.; Larimore, Wallace E.: *Identification of the Tennessee Eastman Challenge Process with Subspace Methods*. In: *Control Engineering Practice*, Band 9, Nr. 12, Seiten 1337–1351, 2001.
- [JW00] Jondral, Friedrich; Wiesler, Anne: *Grundlagen der Wahrscheinlichkeitsrechnung und stochastischer Prozesse für Ingenieure*. B. G. Teubner, Stuttgart, 2000.
- [Kat05] Katayama, Tohru: *Subspace Methods for System Identification*. Springer, London, 2005.
- [KJ02] Kiencke, Uwe; Jäkel, Holger: *Signale und Systeme*. Oldenbourg, München, 2., überarbeitete und erweiterte Auflage, 2002.
- [KKE01] Kiencke, Uwe; Kronmüller, Heinz; Eger, Ralf: *Messtechnik*. Springer, Berlin, 5. Auflage, 2001.
- [KKP05] Katayama, Tohru; Kawauchi, Hidetoshi; Picci, Giorgio: *Subspace identification of closed loop systems by the orthogonal decomposition method*. In: *Automatica*, Band 41, Nr. 5, Seiten 863–872, 2005.
- [Klu08] Kluwe, Mathias: *Beiblätter zur Vorlesung „Regelung linearer Mehrgrößensysteme“ im Wintersemester 2008/2009*. Institut für Regelungs- und Steuerungssysteme, Universität Karlsruhe (TH), 2008.
- [Kön07] König, Patrick: *Modellgestützte Analyse und Simulation von stationären Brennstoffzellensystemen*, Band 12 der Reihe *Schriftenreihe des Instituts für Werkstoffe der Elektrotechnik der Universität Karlsruhe*. Verlag Mainz, Aachen, 2007.

- [Knu01] Knudsen, Torben: *Consistency analysis of subspace identification methods based on a linear regression approach*. In: *Automatica*, Band 37, Nr. 1, Seiten 81–89, 2001.
- [Kre80] Krebs, Volker: *Nichtlineare Filterung*. Methoden der Regelungstechnik, Oldenbourg, München, 1980.
- [Kru08] Krutina, Patrick: *Vergleich von Informationskriterien zur Bewertung der Güte von Black-Box-Identifikationsmodellen*. Diplomarbeit 811, Institut für Regelungs- und Steuerungssysteme, Universität Karlsruhe (TH), 2008.
- [KSW08] Kiencke, Uwe; Schwarz, Michael; Weickert, Thomas: *Signalverarbeitung: Zeit-Frequenz-Analyse und Schätzverfahren*. Oldenbourg, München, 2008.
- [KT07] Katayama, Tohru; Tanaka, Hideyuki: *An approach to closed-loop subspace identification by orthogonal decomposition*. In: *Automatica*, Band 43, Nr. 9, Seiten 1623–1630, 2007.
- [Lar83] Larimore, Wallace E.: *System Identification, Reduced-Order Filtering and Modeling Via Canonical Variate Analysis*. In: *Proceedings of the American Control Conference*, Seiten 175–181, San Francisco, 1983.
- [Lar89] Larimore, Wallace E.: *System Identification and Filtering of Nonlinear Controlled Markov Processes by Canonical Variate Analysis*. Final report for air force office of scientific research, Computational Engineering, Inc., 14504 Greenview Drive, Suite 500, Laurel, MD 20708, 1989.
- [Lar90a] Larimore, Wallace E.: *Canonical Variate Analysis in Identification, Filtering, and Adaptive Control*. In: *Proceedings of the 29th Conference on Decision and Control*, Seiten 596–604, Honolulu, 1990.
- [Lar90b] Larimore, Wallace E.: *Identification and Filtering of Nonlinear Systems Using Canonical Variate Analysis*. In: Casdagli, Martin; Eubank, Stephen (Herausgeber): *Nonlinear Modeling and Forecasting, Proceedings of the Workshop on Nonlinear Modeling and Forecasting*, Seiten 283–303, Addison-Wesley, Redwood City, 1992, Santa Fe, 1990.
- [Lar96] Larimore, Wallace E.: *Optimal Order Selection and Efficiency of Canonical Variate Analysis System Identification*. In: *Proceedings of the IFAC World Congress*, Seiten 151–156, San Francisco, 1996.
- [Lar97a] Larimore, Wallace E.: *Canonical Variate Analysis in Control and Signal Processing*. In: Katayama, Tohru; Sugimoto, Sueo (Herausgeber): *Statistical methods in control and signal processing*, Seiten 83–119, Marcel Dekker, Inc., New York, 1997.
- [Lar97b] Larimore, Wallace E.: *Optimal Reduced Rank Modeling, Prediction, Monitoring and Control Using Canonical Variate Analysis*. In: *Procee-*

- dings of the Symposium on Advanced Control of Chemical Processes*, Seiten 61–66, Banff, 1997.
- [Lar99a] Larimore, Wallace E.: *ADAPT_x: Automated Multivariable System Identification and Time Series Analysis Software. User Manual, Version 3.5*. Adaptics, Inc., McLean, 1999.
- [Lar99b] Larimore, Wallace E.: *Automated Multivariable System Identification and Industrial Applications*. In: *Proceedings of the American Control Conference*, Seiten 1148–1162, San Diego, 1999.
- [Lar04] Larimore, Wallace E.: *Large Sample Efficiency for ADAPT_x Subspace System Identification With Unknown Feedback*. In: Shah, Sirish; MacGregor, John F. (Herausgeber): *Dynamics and Control of Process Systems 2004, A proceedings volume of the 7th IFAC Symposium*, Seiten 293–298, Elsevier, Cambridge, 2004.
- [Lar05] Larimore, Wallace E.: *Maximum Likelihood Subspace Identification for Linear, Nonlinear, and Closed-Loop Systems*. In: *Proceedings of the American Control Conference*, Seiten 2305–2319, Portland, 2005.
- [LB03] Lacy, Seth L.; Bernstein, Dennis S.: *Subspace identification with guaranteed stability using constrained optimization*. In: *IEEE Transactions on Automatic Control*, Band 48, Nr. 7, Seiten 1259–1263, 2003.
- [LD03] Larminie, J.; Dicks, A.: *Fuel Cell Systems Explained*. John Wiley & Sons, New York, 2. Auflage, 2003.
- [Lev44] Levenberg, Kenneth: *A Method for the Solution of Certain Non-Linear Problems in Least Squares*. In: *The Quarterly of Applied Mathematics*, Band 2, Nr. 2, Seiten 164–168, 1944.
- [Li07] Li, Pu: *Prozessoptimierung unter Unsicherheiten*. Oldenbourg, München, 2007.
- [Lju99] Ljung, Lennart: *System Identification: Theory for the User*. Prentice Hall, Upper Saddle River, 2. Auflage, 1999.
- [LM96] Ljung, Lennart; McKelvey, Tomas: *Subspace identification from closed loop data*. In: *Signal Processing*, Band 52, Nr. 2, Seiten 209–215, 1996.
- [Loa76] van Loan, Charles F.: *Generalizing the Singular Value Decomposition*. In: *SIAM Journal on Numerical Analysis*, Band 13, Nr. 1, Seiten 76–83, 1976.
- [Lun08a] Lunze, Jan: *Regelungstechnik*, Band 1. Springer, Berlin, 7., neu bearbeitete Auflage, 2008.
- [Lun08b] Lunze, Jan: *Regelungstechnik*, Band 2. Springer, Berlin, 5., neu bearbeitete Auflage, 2008.

- [Mac95] Maciejowski, Jan M.: *Guaranteed stability with subspace methods*. In: *System & Control Letters*, Band 26, Nr. 2, Seiten 153–156, 1995.
- [MAL96] McKelvey, Tomas; Akçay, Hüseyin H.; Ljung, Lennart: *Subspace-based multivariable system identification from frequency response data*. In: *IEEE Transactions on Automatic Control*, Band 41, Nr. 7, Seiten 960–979, 1996.
- [MAP⁺09] Meiler, Markus; Andre, D.; Pérez, Á.; Schmid, Ottmar; Hofer, Eberhard P.: *Nonlinear D-optimal design of experiments for polymer-electrolyte-membrane fuel cells*. In: *Journal of Power Sources*, Band 190, Nr. 1, Seiten 48–55, 2009.
- [Mar63] Marquardt, Donald W.: *An Algorithm for Least-Squares Estimation of Nonlinear Parameters*. In: *SIAM Journal on Applied Mathematics*, Band 11, Nr. 2, Seiten 431–441, 1963.
- [MASH09] Meiler, Markus; Andre, D.; Schmid, Ottmar; Hofer, Eberhard P.: *Nonlinear empirical model of gas humidity-related voltage dynamics of a polymer-electrolyte-membrane fuel cell stack*. In: *Journal of Power Sources*, Band 190, Nr. 1, Seiten 56–63, 2009.
- [Mat09] MathWorks, The: *MATLAB Documentation*. Online-Resource, <http://www.mathworks.de/access/helpdesk/help/techdoc/index.html>, zuletzt besucht im August 2009.
- [MBB03] Morari, Manfred; Baotić, Mato; Borrelli, Francesco: *Hybrid Systems Modeling and Control*. In: *European Journal of Control*, Band 9, Nr. 2–3, Seiten 177–189, 2003.
- [McK04] McKelvey, Tomas: *Subspace methods for frequency domain data*. In: *Proceedings of the American Control Conference*, Band 1, Seiten 673–678, Boston, 2004.
- [Möl07] Möller, Dietmar P. F.: *Modellbildung, Simulation und Identifikation dynamischer Systeme*. Springer, Berlin, 3. Auflage, 2007.
- [MMW07] Mohd-Mokhtar, Rosmiwati; Wang, Liuping: *Continuous time system identification using subspace methods*. In: Stacey, Andrew; Blyth, Bill; Shepherd, John; Roberts, A. J. (Herausgeber): *Proceedings of the 7th Biennial Engineering Mathematics and Applications Conference 2005*, Band 47 der Reihe *Australian and New Zealand Industrial and Applied Mathematics Journal*, Seiten C712–C732, 2007.
- [Mün06] Münz, Eberhard: *Identifikation und Diagnose hybrider dynamischer Systeme*, Band 01 der Reihe *Schriften des Instituts für Regelungs- und Steuerungssysteme, Universität Karlsruhe (TH)*. Universitätsverlag Karlsruhe, Karlsruhe, 2006.
- [MP90] Minsky, Marvin Lee; Papert, Seymour: *Perceptrons*. MIT Press, Cambridge, 4. Druck, erweiterte Auflage, 1990.

- [MSSH08] Meiler, Markus; Schmid, Ottmar; Schudy, Markus; Hofer, Eberhard P.: *Dynamic fuel cell stack model for real-time simulation based on system identification*. In: *Journal of Power Sources*, Band 176, Seiten 523–528, 2008.
- [Nel01] Nelles, Oliver: *Nonlinear System Identification*. Springer, Berlin, 2001.
- [Nic07] Nickl, Stephanie: *Modellierung eines PEM-Brennstoffzellenstacks mittels Canonical Variate Analysis für lineare Systeme*. Studienarbeit 207, Institut für Regelungs- und Steuerungssysteme, Universität Karlsruhe (TH), 2007.
- [Nie09] Niemeyer, Jens: *Modellprädiktive Regelung eines PEM-Brennstoffzellensystems*, Band 05 der Reihe *Schriften des Instituts für Regelungs- und Steuerungssysteme, Universität Karlsruhe (TH)*. Universitätsverlag Karlsruhe, Karlsruhe, 2009.
- [NK04] Niemeyer, Jens; Krebs, Volker: *A Diagnostic Tool for Static PEMFC Overvoltage Models*. In: *Proceedings of the 2. France-Deutschland Fuel Cell Conference*, Belfort, 2004.
- [OM93] van Overschee, Peter; de Moor, Bart: *N4SID: Numerical Algorithms for State Space Subspace System Identification*. In: *Proceedings of the IFAC World Congress*, Band 7, Seiten 361–364, Sydney, 1993.
- [OM94] van Overschee, Peter; de Moor, Bart: *N4SID: Subspace algorithms for the identification of combined deterministic-stochastic systems*. In: *Automatica*, Band 30, Nr. 1, Seiten 75–93, 1994.
- [OM95] van Overschee, Peter; de Moor, Bart: *A Unifying Theorem for Three Subspace System Identification Algorithms*. In: *Automatica*, Band 31, Nr. 12, Seiten 1853–1864, 1995.
- [OM96] van Overschee, Peter; de Moor, Bart: *Subspace Identification for Linear Systems: Theory — Implementation — Applications*. Kluwer Academic, Boston, 1996.
- [Pea99] Pearson, Ronald K.: *Discrete-time dynamic models*. Topics in chemical engineering, Oxford University Press, New York, 1999.
- [Pec06] Pecheur, Gwendaëlle: *Verifikation und Erweiterung eines Diagnoseansatzes für PEM-Brennstoffzellen mittels Cluster-Analyse*. Diplomarbeit 787, Institut für Regelungs- und Steuerungssysteme, Universität Karlsruhe (TH), 2006.
- [PMLHB05] Palanhandalam-Madapusi, Harish J.; Lacy, Seth; Hoagg, Jesse B.; Bernstein, Dennis S.: *Subspace-based Identification for Linear and Non-linear Systems*. In: *Proceedings of the American Control Conference*, Seiten 2320–2334, Portland, 2005.

- [PPS02] Pukrushpan, Jay T.; Peng, Huei; Stefanopoulou, Anna G.: *Simulation and Analysis of Transient Fuel Cell System Performance Based on a Dynamic Reactant Flow Model*. In: *Proceedings of the ASME International Mechanical Engineering Congress & Exposition*, New Orleans, 2002.
- [PSD96] Peternell, Klaus; Scherrer, Wolfgang; Deistler, Manfred: *Statistical analysis of novel subspace identification methods*. In: *Signal Processing*, Band 52, Nr. 2, Seiten 161–177, 1996.
- [Qin06] Qin, S. Joe: *An overview of subspace identification*. In: *Computers & Chemical Engineering*, Band 30, Nr. 10-12, Seiten 1502–1513, 2006.
- [QL03] Qin, S. Joe; Ljung, Lennart: *Parallel QR-implementation of Subspace Identification with Parsimonious Models*. In: *Proceedings of the 13th IFAC SYSID Symposium*, Seiten 1631–1636, Rotterdam, 2003.
- [QLL05] Qin, S. Joe; Lin, Weilu; Ljung, Lennart: *A novel subspace identification approach with enforced causal models*. In: *Automatica*, Band 41, Nr. 12, Seiten 2043–2053, 2005.
- [Rén79] Rényi, Alfréd: *Wahrscheinlichkeitsrechnung mit einem Anhang über Informationstheorie*, Band 54 der Reihe *Hochschulbücher für Mathematik*. VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 6. Auflage, 1979.
- [Ros58] Rosenblatt, Frank: *The perceptron: a probabilistic model for information storage and organization in the brain*. In: *Psychological Review*, Band 65, Nr. 9, Seiten 386–408, 1958.
- [RPP+06] Ramschak, Erich; Peinecke, Volker; Prenninger, Peter; Schaffer, Thomas; Hacker, Viktor: *Detection of fuel cell critical status by stack voltage analysis*. In: *Journal of Power Sources*, Band 157, Nr. 2, Seiten 837–840, 2006.
- [SAM+01a] Simoglou, A.; Argyropoulos, P.; Martin, E. B.; Scott, K.; Morris, A. J.; Taama, W. M.: *Dynamic Modelling of the Voltage Response of Direct Methanol Fuel Cells and Stacks Part I: Model Development and Validation*. In: *Chemical Engineering Science*, Band 56, Seiten 6761–6772, 2001.
- [SAM+01b] Simoglou, A.; Argyropoulos, P.; Martin, E. B.; Scott, K.; Morris, A. J.; Taama, W. M.: *Dynamic Modelling of the Voltage Response of Direct Methanol Fuel Cells and Stacks Part II: Feasibility Study of Model-based Scale-up and Scale-down*. In: *Chemical Engineering Science*, Band 56, Seiten 6773–6779, 2001.
- [Sch39] Schönbein, Christian Friedrich: *On the Voltaic Polarization of certain Solid and Fluid Substances*. In: *The London and Edinburgh Philosophical Magazine and Journal of Science*, Band XIV, Nr. LXXXV, Seiten 43–45, Januar 1839.

- [Sch91] Schwarz, Helmut: *Nichtlineare Regelungssysteme*. Oldenbourg, München, 1991.
- [Sch06] Schindele, Lothar: *Einsatz eines leistungselektronischen Stellglieds zur Parameteridentifikation und optimalen Betriebsführung von PEM-Brennstoffzellensystemen*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH), Elektrotechnisches Institut, Karlsruhe, 2006.
- [Sch07] Scherf, Helmut E.: *Modellbildung und Simulation dynamischer Systeme*. Oldenbourg, München, 3. Auflage, 2007.
- [See09] Seeliger, Florian: *Untersuchung der Prädiktor-basierten Subspace-Identification im Vergleich zu geometrischen und statistischen Algorithmen*. Diplomarbeit 813, Institut für Regelungs- und Steuerungssysteme, Universität Karlsruhe (TH), 2009.
- [SLH05] Stumper, J.; Löhr, M.; Hamada, S.: *Diagnostic tools for liquid water in PEM fuel cells*. In: *Journal of Power Sources*, Band 143, Seiten 150–157, 2005.
- [SM01] Shi, R.; MacGregor, J. F.: *A framework for subspace identification methods*. In: *Proceedings of the 2001 American Control Conference*, Band 5, Seiten 3678–3683, Arlington, USA, 2001.
- [SS89] Söderström, Torsten; Stoica, Petre G.: *System Identification*. Prentice Hall, New York, 1989.
- [Sto02] Stoer, Josef: *Numerische Mathematik 1*. Springer, Berlin, 1. korrigierter Nachdruck der 8. Auflage, 2002.
- [Str93] Strang, Gilbert: *The Fundamental Theorem of Linear Algebra*. In: *The American Mathematical Monthly*, Band 100, Nr. 9, Seiten 848–855, 1993.
- [Str04] Ströhle, Christian: *Reduktion des Speicheraufwands eines mehrdimensionalen Kennfelds*. Studienarbeit 181, Institut für Regelungs- und Steuerungssysteme, Universität Karlsruhe (TH), 2004.
- [Sug78] Sugiura, Nariaki: *Further analysts of the data by akaike's information criterion and the finite corrections*. In: *Communications in Statistics - Theory and Methods*, Band 7, Nr. 1, Seiten 13–26, 1978.
- [Tso81] Tso, M. K.-S.: *Reduced-Rank Regression and Canonical Analysis*. In: *Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological)*, Band 43, Nr. 2, Seiten 183–189, 1981.
- [VD92a] Verhaegen, Michel; Dewilde, Patrick: *Subspace model identification Part 1. The output-error state-space model identification class of algorithms*. In: *International Journal of Control*, Band 56, Nr. 5, Seiten 1187–1210, 1992.

- [VD92b] Verhaegen, Michel; Dewilde, Patrick: *Subspace model identification Part 2. Analysis of the elementary output-error state-space model identification algorithm*. In: *International Journal of Control*, Band 56, Nr. 5, Seiten 1211–1241, 1992.
- [Ver93] Verhaegen, Michel: *Subspace model identification Part 3. Analysis of the ordinary output-error state-space model identification algorithm*. In: *International Journal of Control*, Band 58, Nr. 3, Seiten 555–586, 1993.
- [Ver94] Verhaegen, Michel: *Identification of the deterministic part of MIMO state space models given in innovations form from input-output data*. In: *Automatica*, Band 30, Nr. 1, Seiten 61–74, 1994.
- [Ver02] Verdult, Vincent: *Nonlinear system identification: A state-space approach*. Dissertation, University of Twente, Enschede, 2002.
- [Vet05] Vetter, Matthias: *Modellbildung und Regelstrategien für erdgasbetriebene Brennstoffzellen-Systeme*. Fraunhofer IRB Verlag, Stuttgart, 2005.
- [Vib95] Viberg, Mats: *Subspace-based methods for the identification of linear time-invariant systems*. In: *Automatica*, Band 31, Nr. 12, Seiten 1835–1851, 1995.
- [Vor06] Vornberger, Christian: *Identifikationsgestützte Modellierung eines PEM-Brennstoffzellenstacks in verschiedenen Betriebsbereichen*. Diplomarbeit 790, Institut für Regelungs- und Steuerungssysteme, Universität Karlsruhe (TH), 2006.
- [VV02] Verdult, Vincent; Verhaegen, Michel: *Subspace identification of multivariable linear parameter-varying systems*. In: *Automatica*, Band 38, Nr. 5, Seiten 805–814, 2002.
- [VV07] Verhaegen, Michel; Verdult, Vincent: *Filtering and System Identification – A Least Squares Approach*. Cambridge University Press, Cambridge, 2007.
- [VW95] Verhaegen, Michel; Westwick, David: *Identifying MIMO Wiener systems using subspace model identification methods*. In: *Proceedings of the 34th IEEE Conference on Decision and Control*, Band 4, Seiten 4206–4211, New Orleans, 1995.
- [VW96] Verhaegen, Michel; Westwick, David: *Identifying MIMO Hammerstein systems in the context of subspace model identification methods*. In: *International Journal of Control*, Band 63, Nr. 2, Seiten 331–349, 1996.
- [Wai06] Waibel, Patrick: *Modellierung des Betriebsverhaltens eines PEM-Brennstoffzellenstacks mittels Neuronaler Netze*. Studienarbeit 202, Institut für Regelungs- und Steuerungssysteme, Universität Karlsruhe (TH), 2006.

- [Wik09] *Wikipedia - Die freie Enzyklopädie / Wikipedia - The Free Encyclopedia*. <http://www.wikipedia.org>, zuletzt besucht im August 2009.
- [Win08] van Wingerden, Jan-Willem: *Control of Wind Turbines with 'Smart' Rotors: Proof of Concept & LPV Subspace Identification*. Dissertation, Technische Universiteit Delft, 2008.
- [XTSD06] Xue, X.; Tang, J.; Sammes, N.; Ding, Y.: *Model-based condition monitoring of PEM fuel cell using Hotelling T^2 control limit*. In: *Journal of Power Sources*, Band 162, Seiten 388–399, 2006.
- [ZF92] Zurmühl, Rudolf; Falk, Sigurd: *Matrizen 1: Grundlagen*. Springer, Berlin, 6. Auflage, 1992.

Schriften des Instituts für
Regelungs- und Steuerungssysteme
Karlsruher Institut für Technologie



Band 07

Der theoretische Schwerpunkt dieser Arbeit liegt in einem Vergleich und einer einheitlichen Beschreibung der in der Literatur existierenden Subspace-Identification-Verfahren. Bei diesen handelt es sich um so genannte Black-Box-Identifikationsverfahren, welche aus den Messdaten eines linearen Systems sowohl die Ordnung als auch die Parameter nicht-iterativ gewinnen.

Im Anwendungsteil kommen diese Verfahren zum Einsatz, um PEM-Brennstoffzellen-Stacks in einem Betriebsbereich nachbilden, der für Anwendungen im Automobilbereich relevant ist. Aufgrund der sehr einfachen und damit wenig Rechenzeit erfordernden Modelle sind diese sehr gut für schnelle Simulationen in komplexen Gesamtsystemmodellen oder modellbasierten Verfahren zur Betriebsführung geeignet.

Es werden außerdem zwei Ansätze vorgestellt, wie solche einfachen Modelle für die Überwachung von Eingangsgrößen des Brennstoffzellen-Stacks verwendet werden können, die im Automobil nicht messbar sind.

Alle erzielten Ergebnisse basieren auf Messdaten und sind mit weiteren Datensätzen validiert.

ISSN 1862-6688

ISBN 978-3-86644-477-5

