

**BMBF-Programm**  
**„Strukturierte Hybridmodelle“**  
**Abschlussbericht, 2004**

Prof. Dr. B. Fiedler

Dr. S. Liebscher

unter Mitwirkung von

A. Azouani

J. Blanca

S. Chen

V. Gelfreich

M. Georgi

N. Jangle

T. Marxen

M. Marodi

Ch. Pfrang

24. August 2004

Institut für Mathematik I  
Freie Universität Berlin  
Arnimallee 2-6  
14195 Berlin

# Inhalt

<b>0</b>	<b>Problemstellung</b>	<b>1</b>
<b>1</b>	<b>Grundsätzliche Hindernisse bei der Identifikation von Hybridstrukturen</b>	<b>4</b>
1.1	Kalibrierungen . . . . .	4
1.2	Numerische Stabilität und Kalibrierungen . . . . .	6
1.3	Instabilität gegen Störungen der White-Boxes . . . . .	8
<b>2</b>	<b>Normalformen</b>	<b>9</b>
2.1	Vorbemerkungen . . . . .	9
2.1.1	Vollständige lokale Identifikation von $\mathbf{h} = \boldsymbol{\psi}(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ . . . . .	9
2.1.2	Vollständige lokale Identifikation von $\mathbf{h} = \mathbf{w}(\boldsymbol{\psi}(\mathbf{u}, \mathbf{v}))$ . . . . .	10
2.2	Lokale Normalformen . . . . .	12
2.3	Semilokale Formen . . . . .	16
2.4	Mehrdeutigkeiten bei nicht-monotonen White-Boxes . . . . .	18
2.5	Konsistenztests . . . . .	37
<b>3</b>	<b>Generizität und Eindeutigkeit</b>	<b>39</b>
<b>4</b>	<b>Baumstrukturen</b>	<b>41</b>
4.1	Rekursive Identifikation aller Baumstrukturen . . . . .	41
4.2	Lokale Normalform skalarer Baumstrukturen . . . . .	43
4.3	Lokale Normalform vektorieller Baumstrukturen . . . . .	46
4.4	Eindeutige Identifikation vektorieller Baumstrukturen . . . . .	53
4.5	Partielle Identifikation unverzweigter Ketten . . . . .	58
<b>5</b>	<b>Vorwärts verzweigte Hybridstrukturen</b>	<b>60</b>
5.1	Kalibrierung . . . . .	60
5.2	Eindeutige Identifikation . . . . .	61
5.3	Beispiel: Kolmogorov-Netzwerk . . . . .	63
<b>6</b>	<b>Strukturen mit Rückführung</b>	<b>66</b>
6.1	Elementare (nicht überlappende) Rückführungen . . . . .	66
6.2	Äquivalente Strukturen . . . . .	69
6.3	Modellreduktionen . . . . .	73
<b>7</b>	<b>Fallbeispiel 1: Verzweigter Feedback</b>	<b>76</b>
<b>8</b>	<b>Fallbeispiel 2: Allgemeine Rückführung über zwei Boxen</b>	<b>79</b>

## 0 Problemstellung

Im Rahmen der durch das BMBF geförderten Kooperation „Heterogene Hybridmodellierung verfahrenstechnischer Prozesse“ wurden strukturierte Hybridmodelle (SHM) untersucht. Entscheidend für das Einsatzspektrum der strukturierten Hybridmodellierung ist die Identifizierbarkeit des Modells aus wenigen, stark korrelierten Messdaten. Eine solche Datenstruktur tritt in der Praxis häufig auf und stellt einen entscheidenden Engpass für den Einsatz neuronaler Netze und anderer Modellierungs-Tools in der Prozessoptimierung dar.

Ein entscheidender Vorteil strukturierter Hybridmodelle ist die Identifizierbarkeit des Modells auf der Basis statistisch schlechter Datensätze. Für die Identifizierbarkeit kommt es jedoch nicht nur, wie in der konventionellen Prozessmodellierung, darauf an, dass die gemessenen Datensätze gut approximiert werden. Dies lässt sich mit fast allen Modellen erreichen. Der entscheidende Vorteil der strukturierten Hybridmodellierung ist die Extrapolationsfähigkeit des Modells. Das Prozessverhalten kann also auch in solchen Bereichen vorhergesagt werden, in denen keine oder extrem wenige Messungen vorliegen. Erst diese Eigenschaft macht den Modelltyp für den Einsatz in der Prozessoptimierung tauglich. Um die Extrapolationsfähigkeit garantieren zu können, ist jedoch der Nachweis nötig, dass eine gegebene Prozessstruktur auf den vorliegenden Daten so gut identifizierbar ist, dass eine ausreichende Prognosesicherheit garantiert werden kann. Dies kann a priori nicht durch Daten validiert werden. Dieser Punkt muss daher zwingend vor dem Einsatz eines Modells zur Prozessoptimierung in wissenschaftlich einwandfreier Weise nachgewiesen werden.

Unter einem strukturierten Hybridmodell verstehen wir dabei einen gerichteten, endlichen Graphen  $\Gamma = \{1, \dots, N\}$ , dessen Ecken bekannte White-Box-Funktionen  $\psi_k$ ,  $k \in W \subset \Gamma$  bzw. zu identifizierende Black-Box-Funktionen  $u_k$ ,  $k \in B \subset \Gamma$  zugeordnet sind. Die gerichteten Kanten definieren dann die Verkettungen der White- und Black-Boxes zu der globalen Input-Output-Relation  $H(\psi, u)$ ; vergleiche Abb. 2.1 und die nachfolgenden Abbildungen.

Ziel ist es nun, mittels einer gegebenen Datenbasis  $\{(x, h(x)) \mid x \in \mathcal{D}\}$ ,  $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^{d_x}$  die Black-Boxes zu identifizieren, d.h. Lösungen  $u$  von

$$h(x) = H(\psi, u)(x), \quad x \in \mathcal{D} \tag{0.1}$$

zu finden. Dabei stehen die Fragen nach der Eindeutigkeit der Identifikation, nach der benötigten Dimension der Datenbasis sowie nach der algorithmischen Durchführung der Identifikation im Mittelpunkt.

Die von Schuppert [Sch00] aufgestellte allgemeine Hypothese zur Identifikation von Hybridmodellen lautet dabei, dass die benötigte Dimension der Datenbasis durch die

Input-Dimension der größten Black-Box im Modell gegeben ist. Die Dimension der Input-Daten des Gesamtmodells spielt hingegen keine Rolle. Dies ist gerade der entscheidende Vorteil der Hybridmodelle gegenüber reinen Black-Box-Modellen, die bei hochdimensionalen Systemen aufgrund der benötigten Datenmengen scheitern.

Im vorliegenden Abschlussbericht des Projektes werden in den Kapiteln 1–3 zunächst prinzipielle Probleme und Methoden vorgestellt. Anschließend wird die Anwendung dieser Methoden auf die einzelnen Klassen von Strukturen zunehmenden Schwierigkeitsgrades besprochen.

Hinsichtlich des Arbeitsplanes, Tabelle 0.1, ist anzumerken, dass alle Themenkomplexe bearbeitet wurden. Dabei stellen die Abschnitte 4.1–4.2 die Resultate zum ersten Aufgabenkomplex dar. Die Abschnitte 4.3–4.5 sowie Kapitel 5 beschäftigen sich mit dem zweiten Fragenkomplex. Der dritte Komplex wird schließlich in den Kapiteln 6–8 behandelt.



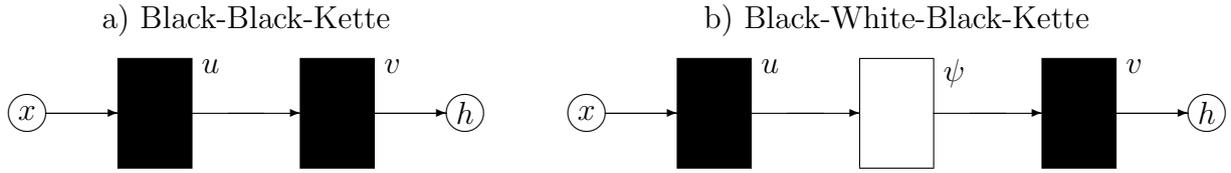


Abbildung 1.1: Strukturen mit trivialen Kalibrierungen.

# 1 Grundsätzliche Hindernisse bei der Identifikation von Hybridstrukturen

## 1.1 Kalibrierungen

Bei bestimmten Hybridstrukturen erzwingt bereits die Struktur des Verknüpfungsgraphen Mehrdeutigkeiten bei der Identifikation. Das einfachste Beispiel sind zwei aufeinanderfolgende Black-Boxes, siehe Abb. 1.1a):

Jede von einer Black-Box  $v$  gefolgte Black-Box  $u$  lässt eine *triviale* Kalibrierung  $\sigma$  zu:

$$v(u(x)) = \tilde{v}(\tilde{u}(x)), \quad (1.1)$$

wenn

$$\tilde{v} := v \circ \sigma^{-1}, \quad \tilde{u} := \sigma \circ u$$

mit einer beliebigen invertierbaren Funktion  $\sigma$ ; vgl. auch [FS03]. Dabei können  $x$ ,  $u$  Vektoren sein; weitere Inputs von  $v$  neben  $u$  sind ebenfalls zulässig.

Ein ähnliches Beispiel liefert jede einfache Black-White-Black Sequenz, Abb. 1.1b):

$$v(\psi(u(x))) = \tilde{v}(\psi(\tilde{u}(x))),$$

wenn

$$\tilde{v} := v \circ \psi \circ \sigma^{-1} \circ \psi^{-1}, \quad \tilde{u} := \sigma \circ u.$$

Hier darf die Black-Box  $v$  weitere vektorielle Eingänge neben  $\psi$  haben. Die White-Box  $\psi$  jedoch muss invertierbar in  $u$  sein und darf zunächst keine weiteren Eingänge haben.

Betrachten wir nun wieder ein allgemeines SHM

$$h = H(\psi, u) \quad (1.2)$$

Dabei bedeutet  $u = (u_i)_{i \in B}$  eine Aufzählung aller vektoriellen Black-Box-Funktionen  $u_i$  im SHM, und  $\psi = (\psi_j)_{j \in W}$  die entsprechende White-Box-Aufzählung. Der Operator  $H$  beschreibt die hybride Komposition der Black- und White-Box-Funktionen, so wie sie das SHM vorgibt.

Unter einer *Kalibrierung* des SHM (1.2) verstehen wir eine (mindestens) einparametrische Familie

$$u^t = u(\psi, u^0; t), \quad t \in \mathbb{R}, \quad (1.3)$$

von Black-Box-Funktionen, so dass gilt

$$\begin{aligned} (i) \quad u^t|_{t=0} &= u(\psi, u^0; 0) &= u^0 \\ (ii) \quad \dot{u}^t &:= \partial_t u(\psi, u^0; t) &\neq 0 \\ (iii) \quad \dot{H}^t &:= \partial_t H(\psi, u(\psi, u^0; t)) &= 0 \end{aligned} \quad (1.4)$$

für alle  $\psi, u^0$  und  $t$ . Einfachstes Beispiel sind die zuvor betrachteten trivialen Kalibrierungen aneinander angrenzender Black-Boxes durch eine nichttriviale Familie von Diffeomorphismen  $\sigma^t$  mit  $\sigma^0 = \text{id}$ . Wir erhalten dann die Familie  $u^t$  aus  $u^0$ , indem wir auf den Output der Vorgänger-Box  $(\sigma^t)^{-1}$  anwenden und zum Ausgleich dem entsprechenden Input der Nachfolger-Box  $\sigma^t$  vorschalten.

**Satz 1.1** *Das SHM (1.2) besitzt eine nichttriviale Kalibrierung (1.4) genau dann, wenn die partiellen Ableitungen  $H_u = H_u(\psi, u)$  eine differenzierbare Familie  $\xi = \xi(\psi, u)$  nicht-trivialer Kern-Vektoren  $\xi \neq 0$  besitzen. Also*

$$H_u \cdot \xi = 0, \quad (1.5)$$

für alle  $\psi, u$ .

**Beweis.** Der Beweis der Notwendigkeit der Bedingung (1.5) folgt sofort mit der Definition

$$\xi(\psi, u^0) := \partial_t u(\psi, u^0; t)|_{t=0} = \dot{u}^t|_{t=0} \neq 0 \quad (1.6)$$

aus (1.4). Dass die Bedingung (1.5) für die Existenz einer Kalibrierung umgekehrt hinreicht, folgt durch Integration der Differentialgleichung

$$\dot{u} = \xi(\psi, u) \quad (1.7)$$

mit der Anfangsbedingung

$$u(0) = u^0. \quad (1.8)$$

Tatsächlich erfüllt die Lösung  $u^t := u(t) = u(\psi, u^0; t)$  dann (1.4): Bedingung (i) gilt per (1.8). Bedingung (ii) folgt, weil  $\xi \neq 0$  für den Kernvektor  $\xi$  von  $H_u$  gilt. Bedingung (iii) schließlich folgt, weil  $\xi$  Kernvektor von  $H_u$  ist:

$$\begin{aligned} \dot{H}^t &= \partial_t H(\psi, u(\psi, u^0; t)) \\ &= H_u \cdot \dot{u} \\ &= H_u(\psi, u(\psi, u^0; t)) \cdot \xi(\psi, u(\psi, u^0; t)) = 0; \end{aligned} \quad (1.9)$$

siehe (1.5) und (1.7). ⊠

Im Fall der einfachen Hybridstruktur

$$h(x, y) = \psi(u(x), v(y)) \quad (1.10)$$

aus Abb. 2.1 impliziert der vorige Satz, dass eine Kalibrierung genau dann vorliegt, wenn die White-Box  $\psi$  eine Lösung der Differentialgleichung

$$\psi_u(u, v)\dot{u}^t(x^t(u)) + \psi_v(u, v)\dot{v}^t(y^t(v))\Big|_{t=0} = 0 \quad (1.11)$$

darstellt. Dies bedeutet,  $\psi$  hat die spezielle Gestalt

$$\psi(u, v) = f(a(u) + b(v)). \quad (1.12)$$

White-Boxes mit Summengestalt sind aus Sicht der Identifizierbarkeit von Hybridmodellen also besonders kritisch, da sie nichttriviale Kalibrierungen nach sich ziehen.

Wir werden im weiteren Verlauf Generalisierungsannahmen machen, die solche spezielle Kalibrierungen wie die eben beschriebene ausschließen. In generischen Baumstrukturen, Kapitel 4, treten dann höchstens noch triviale Kalibrierungen auf. Dagegen wird in Kapitel 8 eine nichttriviale Kalibrierung in einer Hybridstruktur mit Rückführung beschrieben, die sogar für generische White-Boxes auftritt.

## 1.2 Numerische Stabilität und Kalibrierungen

Im April 2002 und im März 2003 wurden im Rahmen zweier Arbeitsbesuche bei der Bayer-AG in Leverkusen numerische Untersuchungen des dort entwickelten Softwarepakets „Hybrid Tool“ durchgeführt. Bei vorgegebener Struktur eines Hybridmodells und einer Datenbasis sowie den zugehörigen Funktionswerten versucht das Hybrid-Tool die Black-Boxes zu identifizieren, indem es neuronale Netze trainiert.

Ziel der Untersuchungen war es zu prüfen, ob die Existenz von Invarianten einen Einfluss auf die Extrapolationsfähigkeit der Modelle bzw. die numerische Stabilität des Programms hat. Ein zweiter Schwerpunkt betraf das Problem nichtmonotoner White-Boxes, siehe Abschnitt 2.4.

Es wurde folgende Hybridmodelle untersucht:

$$\begin{aligned} z(x, y) &= \psi(u(x), v(y)) = u(x) + v(y) + u(x) \cdot v(y) + \varepsilon \cdot (u(x))^2 \cdot v(y), & \text{bzw.} \\ z(x, y) &= \psi(u(x), v(y)) = u(x) + v(y) + u(x) \cdot v(y) + \varepsilon \cdot (u(x))^3 \cdot v(y), \end{aligned}$$

mit Black-Boxes  $u$  und  $v$  und der White-Box  $\psi$ , siehe auch Abb. 2.1. Für  $\varepsilon = 0$  existieren Invarianten für  $u$  und  $v$ . Konkret sind mit

$$u(x) = x^3 \quad \text{und} \quad v(y) = \sin\left(\frac{1}{2}\pi \cdot y\right) \quad (1.13)$$

auch

$$\hat{u}(x) = a \cdot u(x) + a - 1 \quad \text{und} \quad \hat{v}(y) = \frac{1}{a} \cdot v(y) + \frac{1}{a} - 1, \quad (1.14)$$

mit  $a \neq 0$ , Lösungen. Für  $\varepsilon \neq 0$  existieren keine Invarianten.

In den Tests zeigte sich, dass das Hybrid-Tool auch für  $\varepsilon > 0$  eine inexakte Lösung identifiziert, die von der Invarianten-bedingten Lösungsschar im Grenzfall  $\varepsilon = 0$  herrührt. Der dabei ausgeschöpfte Parameterbereich  $a$  schrumpft aber mit wachsendem  $\varepsilon$ . Eine Extrapolation ist weiterhin möglich. Details finden sich in den im Anhang 1 beigefügten Auswertungsbögen. Insbesondere sind folgende Tendenzen erkennbar:

- Für  $\varepsilon = 10$ , d.h. bei einem sehr großen Störterm  $10u^3v$ , werden die Black-Boxes  $u$  und  $v$  gut identifiziert, und damit ist die Outputfunktion  $z$  gut extrapolierbar.
- Im Falle  $\varepsilon = 1$  ist die Identifikation von  $u$  und  $v$  ebenfalls noch relativ gut. Die nichttriviale Kalibrierung bei  $\varepsilon = 0$  macht sich jedoch schon in einer kleinen Abweichung der identifizierten Funktionen in Richtung der Invariante bemerkbar. Die Extrapolation ist geringfügig schlechter als im Falle  $\varepsilon = 10$ . Vor allem ist der Anstieg des Extrapolationsfehlers mit zunehmendem Abstand von der Trainingsdatenkurve deutlicher.
- Bei kleinem Störterm  $\varepsilon = 0, 1$  verstärken sich die zuvor beschriebenen Effekte. Insbesondere wächst der Bereich der möglichen Abweichung in Richtung der bei  $\varepsilon = 0$  auftretenden Invariante erheblich an, wie die deutlich verschiedenen Ergebnisse bei aufeinanderfolgenden Testläufen zeigen. Offenbar reicht der kleine Störterm nicht aus, um in der Nähe der nichttrivialen Kalibrierung eine eindeutige Lösung sicherzustellen.
- Ohne Störterm  $\varepsilon = 0$  manifestiert sich die theoretisch vorhergesagte Kalibrierung. Verschiedene Testläufe liefern eine Vielzahl nahezu perfekt identifizierter Lösungen  $u, v$  zu unterschiedlichen Parametern  $a$ . Insbesondere bleibt der Extrapolationsfehler auf dem gesamten Extrapolationsgebiet von der gleichen Größenordnung.

Neben dem Störterm  $\varepsilon u^3v$  wurde auch der Störterm  $\varepsilon u^2v$  betrachtet. Allerdings ist es uns hier nicht gelungen, einen Referenz-Wert für die Größe der Störung zu finden, der eine gute und eindeutige Identifikation ermöglicht. Bei großen Störungen, die einen hinreichenden Abstand von der Invariante sicherstellen, treten bereits Effekte auf, die von der Nichtmonotonie des Störterms herrühren, siehe auch Abschnitt 2.4. Eine saubere Trennung der entsprechenden Einflüsse ist daher nicht möglich.

### 1.3 Instabilität gegen Störungen der White-Boxes

In diesem Abschnitt beschreiben wir ein einfaches Beispiel, das die Instabilität gegen kleine Störungen zeigt. Wir betrachten Hybridmodell der Form  $h = \psi(u, v)$ , siehe auch Abb. 2.1. Sei also

$$h(x, y) = \psi(u(x), v(y))$$

die „richtige“ Input-Output-Funktion,

$$\begin{aligned} u(x) &= x, \\ v(y) &= y, \\ \psi(u, v) &= (u + 1)^2 + (u + 1)(v + 1) + \varepsilon \sin^2(\omega(u - v)). \end{aligned}$$

Um die numerische Untersuchung durchzuführen, wählen wir

$$\varepsilon = 10^{-3}, \quad \omega = 10.$$

Die Strukturstörung wird durch die Glättung der White-Box-Funktion  $\psi$  modelliert. Wir nutzen

$$\psi_*(u, v) = (u + 1)^2 + (u + 1)(v + 1)$$

statt  $\psi$  zum Zweck der Identifizierung. Der entsprechende Modellfehler ist kleiner als  $\varepsilon = 10^{-3}$ . Als Datenbasis wählen wir

$$D = \{x = y\}.$$

Beide Funktionen  $\psi$  und  $\psi_*$  erlauben die eindeutige punktweise Identifizierung in einer Umgebung der Datenbasis. Wir lösen die Gleichung

$$\psi_*(u_*(x), v_*(y)) = h(x, y)$$

in einer kleinen Umgebung der Datenbasis. Wir erhalten beispielweise

$$\begin{aligned} u(0) &= 0, & u_*(0) &= 0.322876... \\ v(0) &= 0, & v_*(0) &= -0.811018... \\ u(1) &= 1, & u_*(1) &= 1.64575... \\ v(1) &= 1, & v_*(1) &= -0.622036... \end{aligned}$$

für die Punkte  $(x, y) = (0, 0)$  und  $(1, 1)$ . Der Identifizierungsfehler ist offensichtlich ziemlich groß, obwohl die Werte von  $h(x, y)$  und  $h_*(x, y) = \psi_*(u_*(x), v_*(y))$  auf der Datenbasis genau übereinstimmen. Entsprechend schlecht ist die Extrapolationsgüte:

$$h(1, 0) = 7.5 \quad \text{im Gegensatz zu} \quad h_*(1, 0) = 6.0...$$

Dieses Beispiel zeigt, dass die erfolgreiche Hybridmodellierung sehr präzise Modelle des White-Box-Teils erfordert. Tatsächlich bewirkt die rasch oszillierende Modellstörung mit  $\omega = 10$  einen Fehlerbeitrag der Ordnung  $\varepsilon\omega^2$ , weil — wie in den Abschnitten 2.1, 2.2 deutlich werden wird — die Black-Boxes durch Invarianten bestimmt sind, die Terme  $\psi_{uv}$  mit zweiten Ableitungen enthalten.

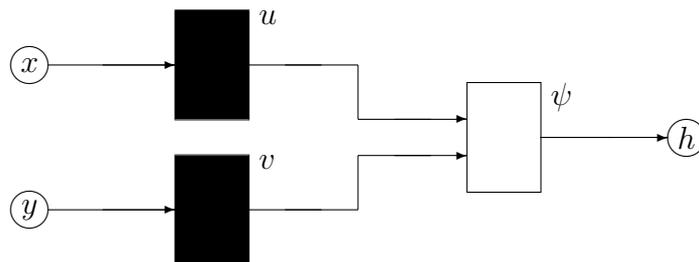


Abbildung 2.1: Einfacher Black-White-Baum.

## 2 Normalformen

### 2.1 Vorbemerkungen

Zum besseren Verständnis der hier dargestellten Methode seien zwei Beispiele vorangestellt.

#### 2.1.1 Vollständige lokale Identifikation von $h = \psi(u, v)$

Wir beschreiben eine mögliche Identifizierung der Baumstruktur

$$h(x, y) = \psi(u(x), v(y)), \quad (2.1)$$

siehe Abb. 2.1. Durch zweimalige Differentiation nach  $x, y$  ergibt sich

$$\begin{aligned} h_x &= \psi_u \cdot u_x \\ h_y &= \psi_v \cdot v_y \\ h_{xy} &= \psi_{uv} \cdot u_x v_y. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Dabei bedeuten Indices jeweils partielle Ableitungen in den entsprechenden Argumenten  $x, y$  bzw.  $u(x), v(y)$ . Aus (2.2) folgt sofort

$$\frac{\psi_u \psi_v}{\psi_{uv}} = \frac{h_x h_y}{h_{xy}}. \quad (2.3)$$

In (2.1), (2.3) sind  $x, y$  sowie die Funktionen  $h, \psi$  gegeben. Genauer gesagt ist die White-Box-Funktion  $\psi$  gegeben, sowie, entlang einer eindimensionalen Datenbasis  $(x, y) \in \mathcal{D} \subset \mathbb{R}^2$  auch der Funktionskeim  $h$ .

Aus (2.1), (2.3) lässt sich dann im allgemeinen  $u(x), v(y)$  bestimmen. Dazu definieren wir, zunächst für beliebige  $(\zeta, \eta) \in \mathbb{R}^2$  und  $C^2$ -Funktionen  $\varphi(\zeta, \eta)$  das nichtlineare Funktional

$$\begin{aligned} I_1(\varphi, \zeta, \eta) &:= \varphi(\zeta, \eta), \\ I_2(\varphi, \zeta, \eta) &:= \varphi_\zeta \varphi_\eta / \varphi_{\zeta\eta}, \\ I &= (I_1, I_2). \end{aligned} \quad (2.4)$$

Das System (2.1), (2.3) lautet dann

$$I(\psi, u, v) = I(h, x, y). \quad (2.5)$$

Auflösung nach  $u, v$  liefert dann die gesuchte Lösung  $u(x), v(y)$  — in Abhängigkeit von den Daten  $\psi$  und  $h$ . Als Datenbasis sind beliebige Kurven in der  $(x, y)$ -Ebene zulässig, deren  $x$ - und  $y$ -Projektionen den gewünschten Wertebereich durchlaufen.

Selbstverständlich unterliegt die Auflösbarkeit von (2.5) gewissen Voraussetzungen. Trivialerweise sollte  $\psi_{uv} \neq 0$  gelten. Nach dem Satz über implizite Funktionen sollte ferner für die Jacobi-Determinante in  $(x_0, y_0)$  gelten

$$\det D_{(u,v)}I(\psi, u_0, v_0) \neq 0,$$

um die lokal eindeutige Auflösbarkeit in  $u_0 = u(x_0), v_0 = v(y_0)$  zu garantieren. Der Fall, dass solche Bedingungen verletzt sind, ist für spezielle kubische  $\psi$  in Abschnitt 2.4 untersucht. Die besondere Form der Invariantengleichung (2.5) erläutern wir in Abschnitt 2.2. Sie ist der Ausgangspunkt für ein systematisches mathematisches Verständnis des Identifikationsproblems.

### 2.1.2 Vollständige lokale Identifikation von $h = w(\psi(u, v))$

Wir beschreiben jetzt eine mögliche punktweise Identifizierung folgender Baumstruktur

$$\psi(u(x), v(y)) = w(h(x, y)), \quad (2.6)$$

siehe Abb. 2.2. Gegenüber der Kapitelüberschrift und der Abbildung haben wir hier  $w$  durch  $w^{-1}$  ersetzt. Durch wiederholte Differentiation dieser Gleichung erhalten wir Relationen zwischen Ableitungen aller bekannten und unbekannt Funktionen. Wir benutzen diese Relationen, um die Ableitungen der unbekannt Funktionen durch die Ableitungen bekannter Funktionen und die Werte von  $u, v$  darzustellen. Dies ist erst unter Einbeziehung aller Ableitungen bis zur vierten Ordnung möglich. Die entsprechenden Gleichungen sind sehr kompliziert, aber ihre Lösungen wurden mit Hilfe von Computeralgebra-Software gefunden. Ein systematischer Zugang ist im folgenden Abschnitt beschrieben.

Um die Resultate in einer übersichtlichen und brauchbaren Form zu präsentieren, definieren wir die folgenden nichtlinearen Differential-Operatoren dritter und vierter Ordnung:

$$\begin{aligned} N_1(h) &:= \frac{1}{h_x^3 h_y^3} \left( h_x^2 h_{xyy} h_y - h_x h_{xxy} h_y^2 + h_{xx} h_{xy} h_y^2 - h_x^2 h_{xy} h_{yy} \right), \\ N_2(h) &:= \frac{1}{h_x^5 h_y^4} \left( -h_x^3 h_{xy} h_{xyy} h_y + h_x^3 h_{xxy} h_y^2 - h_x^2 h_{xxy} h_{xy} h_y^2 \right. \\ &\quad + h_x h_{xx} h_{xy}^2 h_y^2 - h_x^2 h_{xx} h_{xyy} h_y^2 - h_x^2 h_{xxy} h_y^3 \\ &\quad + 3h_x h_{xx} h_{xxy} h_y^3 - 3h_{xx}^2 h_{xy} h_y^3 + h_x h_{xxx} h_{xy} h_y^3 \\ &\quad \left. + h_x^3 h_{xy}^2 h_{yy} - h_x^3 h_{xxy} h_y h_{yy} + h_x^2 h_{xx} h_{xy} h_y h_{yy} \right). \end{aligned} \quad (2.7)$$

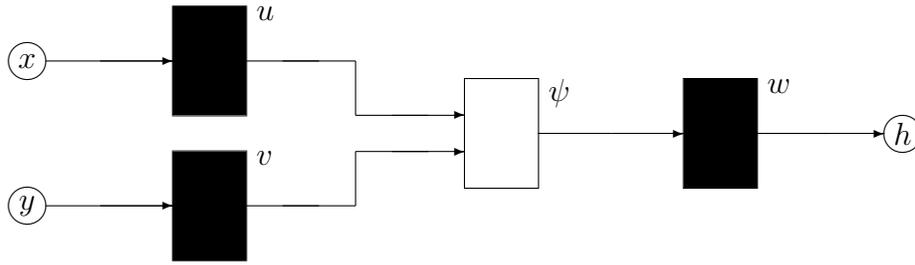


Abbildung 2.2: Einfacher Black-White-Black-Baum.

Die Identität

$$(w')^2 = \frac{N_1(h)}{N_1(\psi)} \quad (2.8)$$

drückt die Ableitung von  $w$  durch die Ableitungen von  $\psi$  und  $h$  aus. Zusätzlich ergeben sich zwei differentielle Invarianten  $I_1$  und  $I_2$ ,

$$I_1(h, x, y) := \frac{N_2(h)}{\sqrt{N_1^3(h)}} \Big|_{(x,y)}. \quad (2.9)$$

Der Operator  $I_2$  ist durch eine Symmetrie definiert: in der Definition von  $I_1$  sind alle  $x$ -Ableitungen durch entsprechende  $y$ -Ableitungen zu ersetzen, sowie umgekehrt alle  $y$ -Ableitungen durch  $x$ -Ableitungen.

Weil die Zahl aller Ableitungen der Input-Output-Funktion bis zur vierten Ordnung um zwei größer als die Zahl der Ableitungen der unbekannt Funktionen bis zu dieser Ordnung ist, erhalten wir zwei Kompatibilitätsrelationen, die für den Zweck der Identifizierung sehr nützlich sind. Das System

$$\begin{aligned} I_1(\psi, u, v) &= I_1(h, x, y), \\ I_2(\psi, u, v) &= I_2(h, x, y) \end{aligned} \quad (2.10)$$

ist, ganz analog zu (2.5), eine notwendige Bedingung für die Kompatibilität der Daten und der Baumstruktur.

Die rechte Seite von (2.10) ist eine Funktion von  $x, y$ , die durch die Daten  $h(x, y)$  und deren Ableitungen bestimmt ist. Die linke Seite enthält die Funktionen von  $u, v$ . Die unbekannte Funktion  $w$  ist eliminiert. Die Werte der unbekannt Funktionen  $u, v$  können im allgemeinen Fall aus (2.10) bestimmt werden. Danach können wir die Funktion  $w$  vermöge (2.6) bestimmen.

Abbildung 2.3 erläutert das lokale Identifizierungsverfahren. Die differentielle Invarianten bestimmen eine lokal umkehrbare Abbildung zwischen dem  $(u, v)$ -Raum und dem Raum der Invarianten  $(I_1, I_2)$ . Wir bilden die Daten von der Datenbasis in den Raum der Invarianten ab. Das Urbild dieser Menge im  $u, v$ -Raum liefert die gesuchten Black-Box-Funktionen.

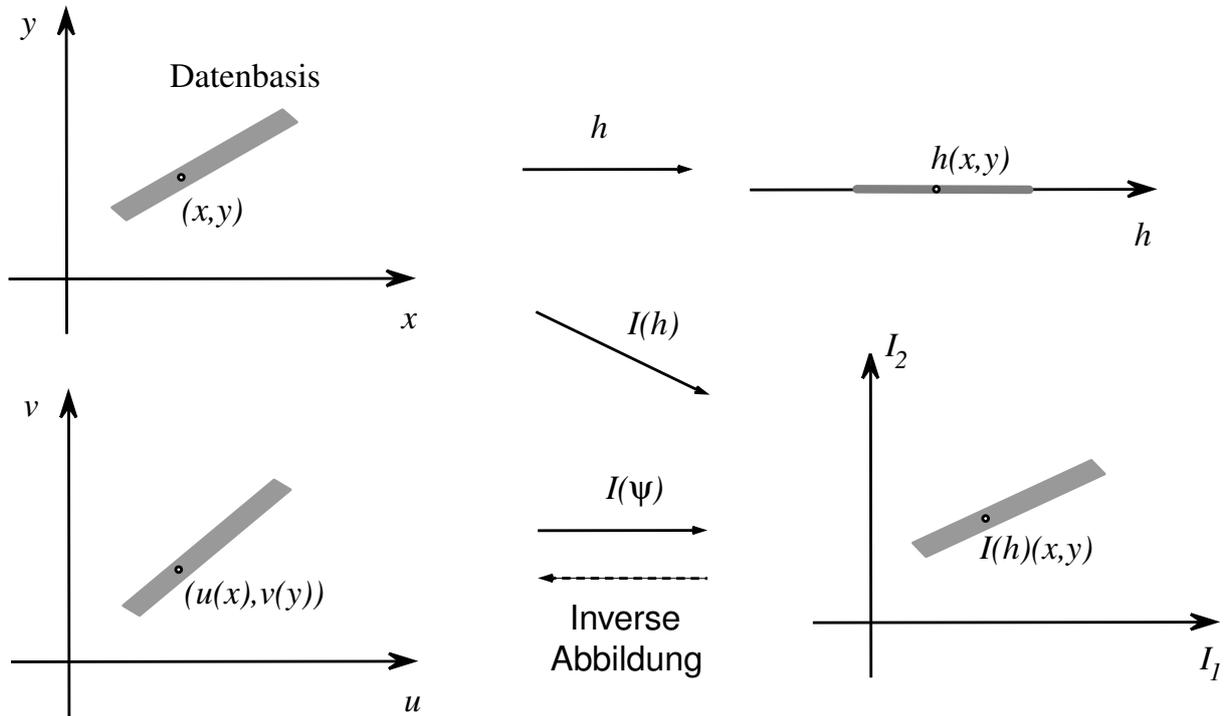


Abbildung 2.3: Punkweise Identifizierung.

## 2.2 Lokale Normalformen

In den Abschnitten 2.1.1, 2.1.2 haben wir die lokale Identifikation der einfachen Hybridmodelle  $h = \psi(u, v)$  und  $h = w(\psi(u, v))$  im Punkt  $(x_0, y_0)$  zurückgeführt auf Gleichungen der Form

$$I(\psi, u, v) = I(h, x, y); \quad (2.11)$$

siehe (2.5) und (2.10). Hierbei waren  $I = (I_1, I_2)$  Ausdrücke, die partielle Ableitungen der White-Box  $\psi$  bzw. der Daten  $h$  bis zur Ordnung zwei bzw. vier in  $(x_0, y_0)$  und  $(u_0, v_0)$  enthielten. Wir beschreiben nun das Konzept einer *Normalform* für strukturierte Hybridmodelle. Dieses Konzept erlaubt es nicht nur, die invariante Form (2.11) der Identifikationsgleichungen zu verstehen, sondern liefert darüber hinaus einen systematischen Zugang, um die Identifikationsgleichungen überhaupt zu gewinnen. In der Tat ist ja weder die Auflösbarkeit der großen Gleichungssysteme garantiert, die durch fortgesetzte Differentiation von Gleichungen wie  $h = w(\psi(u, v))$  entstehen, noch ist auch nur die erforderliche Ableitungsordnung a priori zuverlässig vorhersagbar.

Betrachten wir zunächst den allereinfachsten Fall  $h = \psi(u, v)$ ; genauer

$$h(x(\xi), y(\eta)) = \psi(u(\xi), v(\eta)). \quad (2.12)$$

Vorläufig dürfen wir  $\xi, \eta$  als Hilfsvariablen ansehen und notfalls  $x = \xi + x_0$ ,  $y = \eta + y_0$  denken. Wir können aber die Transformationen  $x(\xi), y(\eta)$  auch als (lokale) Gruppe

ansehen, wenn wir fordern

$$\begin{aligned} x(0) &= x_0, & x_\xi(0) &\neq 0 \\ y(0) &= y_0, & y_\eta(0) &\neq 0. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Schreiben wir diese Gruppenaktion auf Funktionen  $\Xi(\xi, \eta)$  in der Form

$$\Xi(x(\xi), y(\eta)) =: \Xi^{x,y}(\xi, \eta), \quad (2.14)$$

dann können wir (2.12) auch formulieren als

$$h^{x,y} = \psi^{u,v}. \quad (2.15)$$

Mit anderen Worten gilt also

**Satz 2.1** *Das Identifikationsproblem des strukturierten Hybridmodells  $h = \psi(u, v)$  ist genau dann lösbar, wenn die Daten  $h$  und die White-Box  $\psi$  im selben Gruppen-Orbit der Transformationen (2.14) liegen.*

Die Wahl geeigneter Repräsentanten von Gruppen-Orbits wird als Normalform bezeichnet. Beispielsweise repräsentiert die Jordansche Normalform, wohlbekannt aus der Linearen Algebra, Gruppen-Orbits quadratischer Matrizen  $\Xi$  unter Konjugation  $\Xi^X := XAX^{-1}$  mit der Gruppe invertierbarer Matrizen  $X$ . In unserem konkreten Fall der Gruppenaktion  $\Xi^{x,y}$  aus (2.14) definieren wir als *Normalform* einfach diejenigen Funktionen  $\Xi(\xi, \eta)$ , für die (lokal) gilt

$$\begin{aligned} \Xi(\xi, 0) &= \xi + \Xi(0, 0) \\ \Xi(0, \eta) &= \eta + \Xi(0, 0). \end{aligned} \quad (2.16)$$

Tatsächlich ist diese Normalform jederzeit aus  $h = h(x, y)$  lokal eindeutig herzustellen, wenn wir wählen

$$\begin{aligned} x(0) &= x_0, & h(x(\xi), y_0) &= \xi + h(x_0, y_0), \\ y(0) &= y_0, & h(x_0, y(\eta)) &= \eta + h(x_0, y_0). \end{aligned} \quad (2.17)$$

Voraussetzung für die lokale Auflösbarkeit nach  $x(\xi), y(\eta)$  ist dabei  $h_x, h_y \neq 0$  in  $(x_0, y_0)$ . Wirklich folgt aus (2.17) sofort, dass

$$h^{x,y} = H \quad (2.18)$$

die in (2.16) definierte Normalform realisiert, mit  $\Xi(0, 0) = h(x_0, y_0)$ . Die entscheidende Beobachtung ist nun

**Satz 2.2** *Jeder Koeffizient der Taylor-Entwicklung der Normalform  $\Xi$  ist eine Invariante der Gruppenaktion.*

Der Beweis des Satzes folgt sofort aus der Definition der Normalform. Als Folgerung erhalten wir sofort die Invarianten  $I_1, I_2$  aus Abschnitt 2.1.1. In der Tat gelte (2.15), d.h.  $h$  und  $\psi$  sollen im selben Gruppen-Orbit liegen:

$$h^{x,y} = \Xi = \psi^{u,v}. \quad (2.19)$$

Wir definieren

$$\begin{aligned} I_1 &:= \Xi(0,0) \\ I_2 &:= \Xi_{\xi\eta}(0,0). \end{aligned} \quad (2.20)$$

Generell sind alle beliebig hohen, nicht gemischten partiellen  $\xi$ - und  $\eta$ -Ableitungen durch die Normalform-Bedingung (2.16) festgelegt:

$$\begin{aligned} \Xi_\xi &= 1, & \Xi_{\xi\xi} &= 0, & \dots \\ \Xi_\eta &= 1, & \Xi_{\eta\eta} &= 0, & \dots \end{aligned} \quad (2.21)$$

Dabei verbleiben (2.20) als freie nicht a priori festgelegte Normalform-Koeffizienten der niedrigsten Ableitungs-Ordnung Null bzw. zwei. Die konkrete Rechnung ergibt

$$I_1(h, x_0, y_0) = \Xi(0,0) = h^{x,y}(0,0) = h(x_0, y_0) \quad (2.22)$$

und ganz analog

$$\begin{aligned} I_2(h, x_0, y_0) &= \Xi_{\xi\eta}(0,0) = (h^{x,y})_{\xi\eta}(0,0) \\ &= h(x(\xi), y(\eta))_{\xi\eta}(0,0) \\ &= h_{x,y}(x_0, y_0) \cdot x_\xi(0) \cdot y_\eta(0) \\ &= \frac{h_{xy}}{h_x h_y} \Big|_{(x_0, y_0)}. \end{aligned} \quad (2.23)$$

In der letzten Gleichung wurde (2.17) benutzt:  $h_x x_\xi = 1 = h_y y_\eta$ .

Nach Satz 4.2 gelten nun die Beziehungen

$$\begin{aligned} I_1(h, x_0, y_0) &= I_1(\psi, u_0, v_0) \\ I_2(h, x_0, y_0) &= I_2(\psi, u_0, v_0) \end{aligned} \quad (2.24)$$

aus (2.5) *a priori*. Sie liefern sofort die konkreten Bestimmungsgleichungen (2.1), (2.3) für  $u, v$ . Übrigens haben wir in Abschnitt 2.1.1 aus praktischen Gründen die Invariante  $I_2 = \Xi_{\xi\eta}$  durch ihren ebenso zulässigen Kehrwert ersetzt. Ganz analog sind beliebige Funktionen der Taylorkoeffizienten der Normalform  $\Xi$  zulässig. Allerdings beruht umgekehrt jede lokale Identifikation, die maximal zweite Ableitung der Daten benutzt, notwendig auf unseren Invarianten  $I_1, I_2$ .

Die Beziehungen (2.5) sind also nicht eine zufällige Kuriosität des speziellen Problems  $h = \psi(u, v)$  sondern geradezu *der* Schlüssel zu seiner Lösung.

Als zweites Beispiel betrachten wir  $h = w(\psi(u, v))$ . Analog zu (2.14) heißt die Gruppenaktion nun

$$\Xi^{x,y,w}(\xi, \eta) := w(\Xi(x(\xi), y(\eta))). \quad (2.25)$$

Das Identifikationsproblem erhält so die Form

$$h^{\text{id},\text{id},\text{id}}(\xi, \eta) = \psi^{u,v,w} \quad (2.26)$$

und die Sätze 2.1, 2.2 finden entsprechend Anwendung. Als *Normalform*, entsprechend (2.16) wählen wir diesmal

$$\begin{aligned} \Xi(\xi, 0) &= \xi \\ \Xi(0, \eta) &= \eta \\ \Xi(\eta, \eta) &= 2\eta. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Im Unterschied zu (2.16) ist es diesmal nicht von vornherein klar, dass jeder Gruppen-Orbit (2.25) einen solchen Repräsentanten besitzt. Wir geben deshalb eine kurze Begründung. Ohne Einschränkung sei bereits  $x_0 = y_0 = 0$  und  $h(0, 0) = 0$ . Wir betrachten zunächst den linearen Fall

$$h(x, y) = \alpha x + \beta y. \quad (2.28)$$

Dann führt die Wahl

$$x(\xi) = \frac{1}{\alpha}\xi, \quad y(\eta) = \frac{1}{\beta}\eta, \quad w(h) = h \quad (2.29)$$

sofort zum Ziel  $h^{x,y,w} = \Xi$  mit (2.27). Der allgemeine nichtlineare Fall kann durch Skalierung mit  $\varepsilon$  auf den linearen Fall zurückgeführt werden. Sei

$$\begin{aligned} h^\varepsilon(x, y) &:= \frac{1}{\varepsilon}h(\varepsilon x, \varepsilon y), \\ x^\varepsilon(\xi) &:= \frac{1}{\varepsilon}x(\varepsilon\xi) \\ y^\varepsilon(\eta) &:= \frac{1}{\varepsilon}y(\varepsilon\eta) \\ w^\varepsilon(h) &:= \frac{1}{\varepsilon}w(\varepsilon h). \end{aligned} \quad (2.30)$$

Dann gilt für positive  $\varepsilon$  die Äquivalenz

$$\begin{aligned} h^{x,y,w} &= \Xi \iff \\ (h^\varepsilon)^{x^\varepsilon, y^\varepsilon, w^\varepsilon} &= \Xi^\varepsilon \end{aligned} \quad (2.31)$$

Wegen  $x(0) = y(0) = w(0) = 0 = h(0, 0) = \Xi(0, 0)$  geht die zweite Gleichung von (2.31) im Limes  $\varepsilon \searrow 0$  in den linearen Fall (2.28) über, mit trivialer Lösung (2.29). Aus dem Satz über implizite Funktionen, übrigens mit der Normierung  $w(0) = 0, w'(0) = 1$ , ergibt sich dann die Lösung von (2.31), für kleine positive  $\varepsilon$ , und letztlich die Normalform (2.27).

Wie in (2.20) ergeben sich aus der Normalform (2.27) für  $\Xi$  Invarianten  $I_1, I_2$  der Gruppenaktion und folglich Identifikationsgleichungen für  $u, v$ . Wir bemerken zunächst, dass die Normalform  $\Xi$  selbst die Gestalt

$$\Xi(\xi, \eta) = \xi + \eta + \xi\eta(\xi - \eta)\tilde{\Xi}(\xi, \eta) \quad (2.32)$$

besitzt. Das folgt aus (2.27) durch Abdividieren der Nullstellengebilde  $(\xi, 0), (0, \eta)$  und  $(\xi, \xi)$  von  $\Xi(\xi, \eta) - \xi - \eta$ . Durch Differentiation von (2.28) in  $\xi = \eta = 0$  erhalten wir ferner

die Relationen

$$\begin{aligned}\Xi_\xi = \Xi_\eta &= 1, \\ \Xi_{\xi\xi\eta} + \Xi_{\xi\eta\eta} &= 0, \\ 3\Xi_{\xi\xi\eta\eta} + 2(\Xi_{\xi\xi\xi\eta} + \Xi_{\xi\eta\eta\eta}) &= 0.\end{aligned}\tag{2.33}$$

Alle anderen partiellen Ableitungen von  $\Xi$  der Ordnungen Null bis vier in  $\xi = \eta = 0$  verschwinden identisch für die Normalform  $\Xi$ . Als Invarianten niedrigster Ordnung kommen also zunächst die drei unabhängigen Terme

$$\Xi_{\xi\xi\eta}, \Xi_{\xi\xi\xi\eta}, \Xi_{\xi\eta\eta\eta}\tag{2.34}$$

in Betracht.

Damit ist klar, dass die Invarianten zur Identifikation von  $u, v$  aus Abschnitt 2.1.2, (2.10) notwendig von mindestens dritter bzw. vierter Ableitungsordnung in  $h$  bzw.  $\psi$  sein müssen. Wir erhalten also entsprechend Identifikationsgleichungen für  $u, v, w$  der Form

$$I(\psi, u, v, w) = I(h, x, y, \text{id})\tag{2.35}$$

mit  $I = (I_1, I_2, I_3)$ . Dadurch werden die Wahlmöglichkeiten in (2.30) voll ausgeschöpft.

Im Kapitel 4 wird der Normalformzugang auf allgemeine Baumstrukturen, d.h. Hybridstrukturen, deren zugrundeliegende *ungerichtete* Graphen kreisfrei sind, ausgedehnt.

Wir erwähnen abschließend einen etwas anderen Zugang, der auf der Transformation der Vektorfelder

$$\frac{dy}{dx} = -\frac{\Xi_x(x, y)}{\Xi_y(x, y)}\tag{2.36}$$

einer gegebenen Funktion  $\Xi$  beruht. Die Lösungen von (2.36) im  $(x, y)$ -Raum sind die Höhenlinien von  $\Xi$ , welche durch Transformationen  $\Xi \mapsto w(\Xi)$  unangetastet bleiben: lediglich die numerischen Werte  $w(\Xi)$ , die den Höhenlinien jeweils zugeordnet sind, ändern sich, nicht aber die Höhenlinien selbst. Damit ist es möglich, lediglich die Gruppe der Transformationen  $x(\xi), y(\eta)$  auf die Differentialgleichung (2.36) wirken zu lassen. Es ergeben sich dann Normalformen dieser Vektorfelder, zugehörige Invarianten, und letztlich wiederum Identifikationsgleichungen für die Black-Boxes  $u$  und  $v$ . Allerdings werden diesmal nur zwei statt drei Identifikationsgleichungen benötigt, weil die Black-Box-Funktion  $w$ , welche nur die numerischen Werte der Höhenlinien bestimmt, von vornherein eliminiert wurde. Nach erfolgter Identifikation von  $u, v$  ist dann  $w$  trivial durch Einsetzen in  $w(\psi(u(x), v(y))) = h(x, y)$  gegeben.

## 2.3 Semilokale Formen

Bisher haben wir die Beispiele  $h = \psi(u, v)$  und  $h = w(\psi(u, v))$  durch rein lokale Identifikationsgleichungen im Punkt  $(x_0, y_0)$  nach  $u(x_0), v(y_0)$  aufgelöst. Wir skizzieren nun die

alternative Möglichkeit, gewöhnliche Differentialgleichungen für  $u(x(s)), v(y(s))$  entlang einer eindimensionalen Datenbasis

$$D = \{(x(s), y(s)); \quad s \in \mathbb{R}\} \quad (2.37)$$

herzuleiten. Für die  $s$ -Ableitungen gelte dabei  $\dot{x}, \dot{y} \neq 0$ .

Wir betrachten zunächst das Beispiel  $h = \psi(u, v)$  aus Abb. 2.1. Wir wollen die Black-Box-Funktionen

$$\begin{aligned} u(s) &:= u(x(s)) \\ v(s) &:= v(y(s)) \end{aligned} \quad (2.38)$$

aus den gegebenen Daten bestimmen. In offensichtlicher Notation gilt dabei

$$\begin{aligned} \dot{u} &= u_x \dot{x} \\ \dot{v} &= v_y \dot{y}. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Durch einmalige partielle Ableitung der Relation  $h(x, y) = \psi(u(x), v(y))$  nach  $x$  bzw.  $y$  erhalten wir andererseits

$$\begin{aligned} \psi_u \cdot u_x &= h_x \\ \psi_v \cdot v_y &= h_y. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Durch Multiplikation mit  $\dot{x}$  bzw.  $\dot{y}$  ergibt sich damit aus (2.39)

$$\begin{aligned} \dot{u} = h_x / \psi_u \cdot \dot{x} &=: f(s, u, v) \\ \dot{v} = h_y / \psi_v \cdot \dot{y} &=: g(s, u, v), \end{aligned} \quad (2.41)$$

also ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen 1. Ordnung für  $u, v$ . Sobald eine Anfangslösung  $u(x_0), v(y_0)$  irgendwo auf der Datenbasis  $\mathcal{D}$  bekannt ist, etwa durch den lokalen Normalformansatz, lässt sich  $u(x(s)) = u(s), v(y(s)) = u(s)$  auf der entsprechenden  $\mathcal{D}$ -Komponente bestimmen. Es ist bemerkenswert, dass die semilokale Darstellung (2.41) zweite Ableitungen von  $h, \psi$  vermeidet und eventuell sogar geeignet ist, Störungen der Daten  $f, g$  zu glätten.

Das Beispiel  $h = w(\psi(u, v))$  aus Abb. 2.2 ist einer entsprechenden semilokalen Behandlung zugänglich. Analog zu (2.40) erhalten wir zunächst

$$\begin{aligned} w' \psi_u u_x &= h_x \\ w' \psi_v v_y &= h_y, \end{aligned} \quad (2.42)$$

wobei  $w' = w'(\psi(u(s), v(s)))$  die positiv gedachte Ableitung der Black-Box-Funktion  $w$  im Punkt  $\psi(u(s), v(s))$  bedeutet. Aus (2.42) können wir auf vielerlei Weise  $w'$  bestimmen, etwa mit (2.39) durch den symmetrischen Ausdruck

$$w' = \left( \frac{h_x h_y \cdot \dot{x} \dot{y}}{\psi_u \psi_v \cdot \dot{u} \dot{v}} \right)^{\frac{1}{2}} =: w_1(s, u, v, \dot{u}, \dot{v}). \quad (2.43)$$

Ähnlich ergibt sich aus der gemischten Ableitung

$$(w''\psi_u\psi_v + w'\psi_{uv})u_xu_y = h_{xy}, \quad (2.44)$$

wenn wir mit  $\dot{x}\dot{y}$  multiplizieren und wieder (2.39) einsetzen, sofort ein entsprechender Ausdruck der Form

$$w'' = w_2(s, u, v, \dot{u}, \dot{v}) \quad (2.45)$$

für  $w''$ . Differenzieren wir  $h = w(\psi(u, v))$  hingegen zweimal partiell nach  $x$  und bedenken

$$\ddot{u} = u_{xx}\dot{x}^2 + u_x\ddot{x}, \quad (2.46)$$

so erhalten wir nach Multiplikation mit  $\dot{x}^2$

$$w'\psi_u(\ddot{u} - \dot{u} \cdot \frac{\ddot{x}}{\dot{x}}) + (w''\psi_u^2 + w'\psi_{uu})\dot{u}^2 = h_{xx}\dot{x}^2. \quad (2.47)$$

Ersetzen wir hier  $w'$  und  $w''$  durch  $w_1, w_2$  aus (2.43), (2.45) und lösen (2.47) nach  $\ddot{u}$  auf, dann erhalten wir explizite Ausdrücke der Form

$$\begin{aligned} \ddot{u} &= f(s, u, v, \dot{u}, \dot{v}) \\ \ddot{v} &= g(s, u, v, \dot{u}, \dot{v}). \end{aligned} \quad (2.48)$$

Dabei erhalten wir die Gleichung  $\ddot{v} = g$  ganz analog zu  $\ddot{u} = f$  durch zweimalige partielle Ableitung von  $h = w(\psi(u, v))$  nach  $y$ . Das System 2. Ordnung (2.48) bestimmt also die Black-Box-Funktionen  $(u, v)$  auf semilokale Weise entlang der Datenbasis  $\mathcal{D}$  aus (2.37), sobald an irgendeinen Punkt  $(x_0, y_0) \in \mathcal{D}$  sowohl  $(u, v)$  als auch  $\dot{u}, \dot{v}$  bekannt sind. Dabei ergeben sich aus den lokalen Verfahren von Abschnitt 2.2 zwanglos  $u_x(x_0), v_y(y_0)$  und folglich, mit (2.39), neben  $(u, v)$  auch  $\dot{u}, \dot{v}$  im Startpunkt  $x_0, y_0$ .

Wieder fällt auf, dass die rechte Seite des bestimmenden Systems (2.48) nur höchstens zweite Ableitungen der Daten  $\psi, h, x(s), y(s)$  enthält und zugleich über eine doppelte Glättung dieser Daten in  $s$ -Richtung verfügt.

## 2.4 Mehrdeutigkeiten bei nicht-monotonen White-Boxes

Um die Auswirkungen nichtmonotoner White-Box-Funktionen auf die Identifizierbarkeit eines strukturierten Hybridmodells (SHM) genauer zu verstehen, wurde der einfachste Fall einer Baumstruktur

$$h(x, y) = \psi(u(x), v(y)) \quad (2.49)$$

näher untersucht. Hierbei stellen  $x, y$  die Eingangsdaten mit zugehörigem Ausgang  $h$  dar. Die Funktionen  $u, v$  bezeichnen Black-Boxes und  $\psi$  eine White-Box. Wie aus Abschnitt 2.1.1 bekannt, ergibt sich durch Ableiten von (2.49) die Beziehung

$$\frac{h_x h_y}{h_{xy}} = \frac{\psi_u \psi_v}{\psi_{uv}}, \quad (2.50)$$

wobei Argumente im Index jeweils partielle Ableitungen nach diesen Argumenten bedeuten. Zusammengefasst erhalten wir ein System

$$\begin{aligned} \Psi(u, v) &= I(\psi, u, v) = \left( \psi(u, v), \frac{\psi_u(u, v)\psi_v(u, v)}{\psi_{uv}(u, v)} \right), \\ I(h, x, y) &= \left( h(x, y), \frac{h_x(x, y)h_y(x, y)}{h_{xy}(x, y)} \right) \end{aligned} \quad (2.51)$$

aus zwei Gleichungen mit zwei Unbekannten  $u, v$ ; also kurz

$$\Psi(u, v) = I(h, x, y). \quad (2.52)$$

Dieses System ist zumindest lokal nach  $u(x), v(y)$  als Funktion von  $I(h, x, y)$  auflösbar, sofern gewisse Nichtausartungsbedingungen an  $\Psi$  erfüllt sind.

Das globale Lösungsverhalten und damit insbesondere die Extrapolierbarkeit der Lösung sind somit eng mit Lage und Gestalt der kritischen Entartungspunkte verknüpft. Exemplarisch wurde die kubische White-Box-Funktion

$$\psi(u, v) = u^3 + a_1 u^2 v - uv^2 + v^3 + u^2 + uv + a_2 v^2 + a_3 u \quad (2.53)$$

betrachtet.

Voraussetzung für die lokale Auflösbarkeit von (2.52) ist die Regularität der Linearisierung

$$D\Psi = \begin{pmatrix} \psi_u & \psi_v \\ \frac{(\psi_{uu}\psi_v + \psi_u\psi_{uv})\psi_{uv} - \psi_u\psi_v\psi_{uu}}{\psi_{uv}^2} & \frac{(\psi_{uv}\psi_v + \psi_u\psi_{vv})\psi_{uv} - \psi_u\psi_v\psi_{uv}}{\psi_{uv}^2} \end{pmatrix}. \quad (2.54)$$

Die kritischen Werte

$$\{\Psi(u, v); \det D\Psi(u, v) = 0\} \quad (2.55)$$

bilden Kurven (mit evtl. weiteren Singularitäten, z.B. Cusps), die Bereiche von  $I(h, \cdot, \cdot)$ -Werten verschiedener Lösungs Vielfachheit der Lösungen  $(u, v)$  von (2.52) gegeneinander abgrenzen. Die Kurven selbst beschreiben — abgesehen von Singularitäten höherer Ordnung — Folds von  $\Psi$ ; die Vielfachheit der Lösungen  $(u, v)$  auf beiden Seiten der Fold unterscheidet sich um zwei.

In den Abbildungen 2.4, 2.5, 2.6 sind diese Kurven sowohl im Urbildraum ( $u$ - $v$ -Ebene) als auch im Bildraum ( $\Psi$ -Ebene) für drei ausgewählte Funktionen  $\psi$  in verschiedenen Maßstäben geplottet. Die linke Spalte zeigt jeweils den Urbildraum und die rechte den Bildraum. Die Koeffizienten  $a = (a_1, a_2, a_3)$  haben die Werte  $a = (0, 1, 1)$  bzw.  $(0.1, 1, 1)$  bzw.  $(0.1, -1, 0)$ .

Die Abbildungen wurden numerisch aus Lösungen  $(u, v)$  der Entartungsbedingung (2.55) durch Pfadverfolgung mit dem Programmpaket AUTO gewonnen. Dabei kann zur Festlegung von Startwerten  $(u, v)$  für die Pfadverfolgung folgende Tatsache ausgenutzt

werden. Für große Werte  $|u|, |v|$  werden  $\Psi$  und  $\det D\Psi$  annähernd homogen. Die gesuchten singulären Kurven nähern sich also radialen Asymptoten an, deren Richtung analytisch-numerisch relativ leicht bestimmt werden kann. Auch in den genannten Abbildungen sind diese Asymptotenrichtungen im Urbild- wie im Bildraum leicht auszumachen.

Die sich jeweils anschließenden Abbildungen 2.4–2.6(a–d) zeigen nochmal die Bildregionen der  $\Psi$ -Ebene mit eingetragenen Vielfachheiten der jeweiligen Lösungen  $(u, v)$  von (2.52). Für die Berechnung der Vielfachheiten wurde das Algebra- und Visualisierungspaket Mathematica verwendet. Man beachte insbesondere, dass bereits für kubische White-Box  $\psi$  bis zu 11-fache Lösungen auftreten.

Zum Verständnis der Abbildungen sind einige weitere Bemerkungen hilfreich. Eine zwar nur mittelbare aber doch wichtige Rolle für die Gestalt der Singularitäten spielen die Nullstellen der Nennerfunktion des Quotienten (2.50)

$$\{\psi_{uv} = 0\}. \quad (2.56)$$

Diese Nullstellen bilden ebenfalls eine Kurve im Urbildraum. In unserem Beispiel dritten Grades handelt es sich hierbei um eine Gerade

$$\{v = 0.5 + a_1 u\}, \quad (2.57)$$

die in den Abbildungen 2.4–2.6 im oberen linken Teilbild als Strich-Punkt-Linie eingetragen ist. Schneidet nun diese Nenner-Null-Linie die singulären Kurven, so ist zunächst einmal der Quotient (2.50) dort nicht definiert. Dabei kann es sich um eine hebbare Unstetigkeit handeln, siehe Abbildung 2.5, so dass im Bildbereich keine Besonderheiten auftreten. Handelt es sich jedoch um einen Pol, siehe Abbildung 2.6, entstehen im Bildbereich senkrechte Asymptoten. Die in den Abbildungen 2.6(a–d) gegenüber der Abbildung 2.6 zusätzlich auftretende vertikale Grenzlinie zwischen Gebieten unterschiedlicher Lösungs Vielfachheit ist dabei das Bild dieser Singularität. Sie besitzt keine Entsprechung im Urbildraum und kann daher nicht durch den Pfadverfolgungsansatz erfasst werden.

In den Abbildungen 2.4, 2.4(a–d) wurde noch eine weitere mögliche Entartung dargestellt. Gegenüber Abbildung 2.5 ist lediglich der Koeffizient  $a_1$  auf Null gesetzt. Dadurch besitzen Zähler und Nenner der Determinante  $\det D\Psi$  einen gemeinsamen Faktor. Im Urbildraum entstehen die horizontalen Asymptoten parallel zur Nenner-Null-Linie. Im Bildraum brechen die „Schlaufen“ aus Abbildung 2.5 auf.

Im Rahmen des zweiten Arbeitsbesuchs bei der Bayer-AG im März 2003 wurden die mit nicht monotonen White-Boxes verbundenen Probleme auch numerisch bestätigt. Dazu wurde das von der Bayer-AG entwickelte Softwarepaket „Hybrid Tool“ verwendet. Bei vorgegebener Struktur eines Hybridmodells und einer Datenbasis sowie den zugehörigen Funktionswerten versucht das Hybrid-Tool die Black-Boxes zu identifizieren, indem es neuronale Netze trainiert.

Hinsichtlich des Trainings der neuronalen Netze kann der zuvor beschriebene Normalformenansatz wie folgt interpretiert werden: Die zur Identifizierung herangezogene Datenbasis liegt zwar infolge der starken Korrelation nahe einer eindimensionalen Kurve im zweidimensionalen Parameterraum, besitzt allerdings eine nicht verschwindende Dicke. Dadurch approximieren die trainierten neuronalen Netze nicht nur die Funktionswerte von  $h$  entlang dieser Kurve, sondern auch deren Ableitungen. Ist die Dicke der Datenbasis ausreichend, sowohl Funktionswerte als auch erste Ableitungen gut zu approximieren, erwarten wir eine lokal eindeutige Identifizierung, solange keine der Entartungskurven erreicht wird. In Bereichen der  $\Psi$ -Ebene mit höherer Lösungsvielfachheit gibt es aber trotzdem mehrere Lösungen  $u, v$  der Black-Boxes, die alle zu einer perfekten Wiedergabe von  $h$  und seinen ersten Ableitungen führen. Nur eine dieser Lösungen erlaubt jedoch eine gute Extrapolation. Diese Mehrdeutigkeit ist nur aufzulösen, wenn die Dicke der Datenbasis ausreicht, auch höhere Ableitungen zu approximieren. Alternativ könnten auch einzelne Ausnahme-Datensätze, die einen großen Abstand zur Datenkurve besitzen, die benötigte Eindeutigkeit herstellen.

Die Tests bestätigten, dass Trainingsdaten abseits der kritischen Kurven zu einer guten Approximation führen, während das Hybrid-Tool bei Daten nahe der kritischen Kurven unzuverlässig reagiert. Details finden sich in den im Anhang 2 beigefügten Auswertungsbögen.

Exemplarisch wurde wieder die kubische White-Box-Funktion (2.53) mit den speziellen Koeffizienten

$$\psi(u, v) = u^3 + 0.1u^2v - uv^2 + v^3 + u^2 + uv + v^2 + u \quad (2.58)$$

betrachtet. Als Trainingsdaten wurden 100 gleichverteilte Punkte in einem Bereich entlang einer Kurve mit 10% transversaler Ausdehnung verwendet.

Lagen die Urbilddaten  $(x, y)$  fern der kritischen Kurven und überdeckten die Bilddaten mehrere der Mehrdeutigkeitsregionen wurde eine nahezu perfekte Identifizierung und Extrapolation erreicht. Für Urbilddaten nahe der kritischen Kurven und damit verbundener Fold im Extrapolationsbereich wurde nur sporadisch eine Identifikation mit akzeptabler Extrapolation erreicht. Im Mittel waren die Extrapolationsfehler sehr groß.

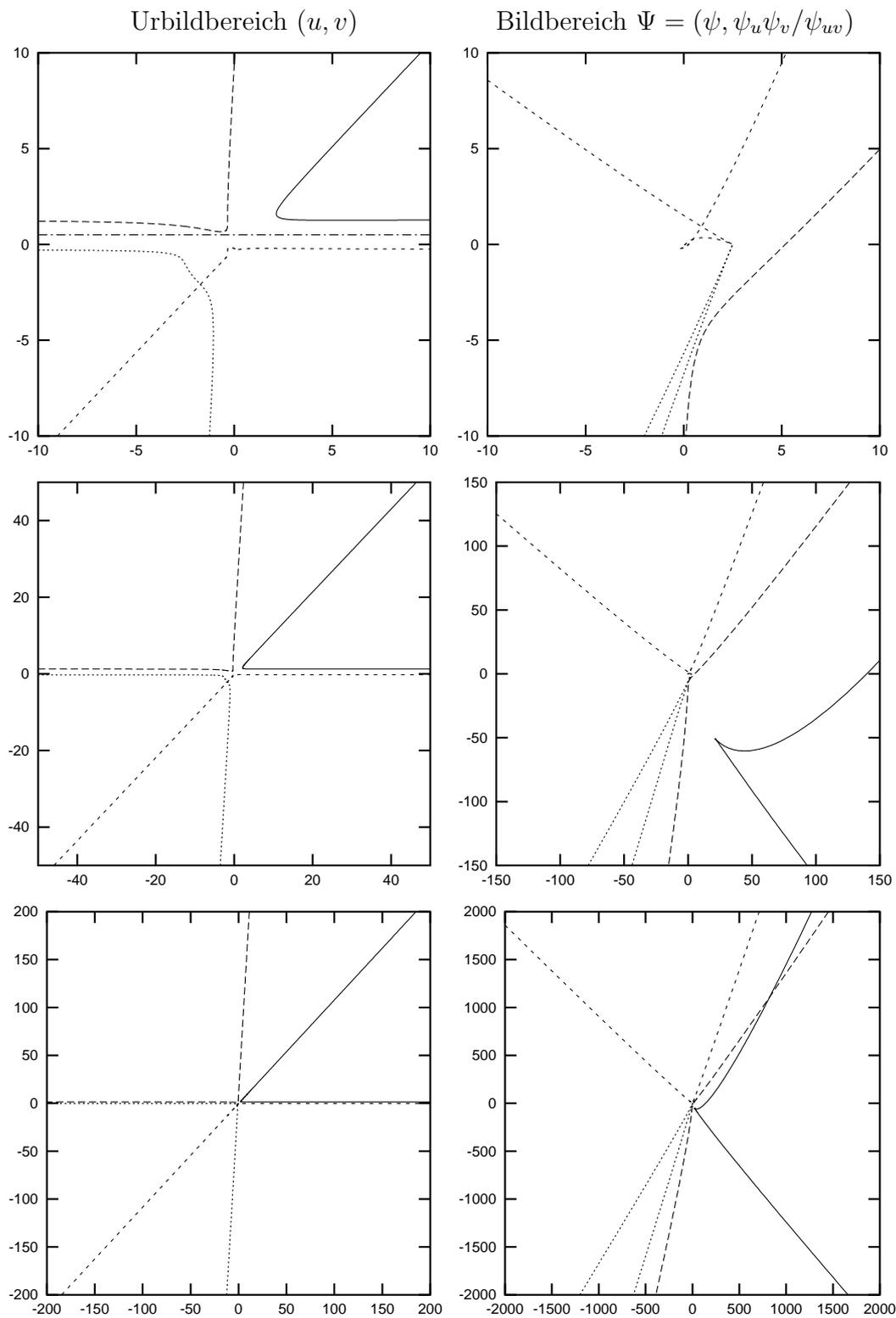


Abbildung 2.4: Kritische Punkte (Urbildbereich) und kritische Werte (Bildbereich) der Abbildung  $(u, v) \mapsto (\psi, \psi_u \psi_v / \psi_{uv})$  zur White-Box  $\psi = u^3 - uv^2 + v^3 + u^2 + uv + v^2 + u$ .

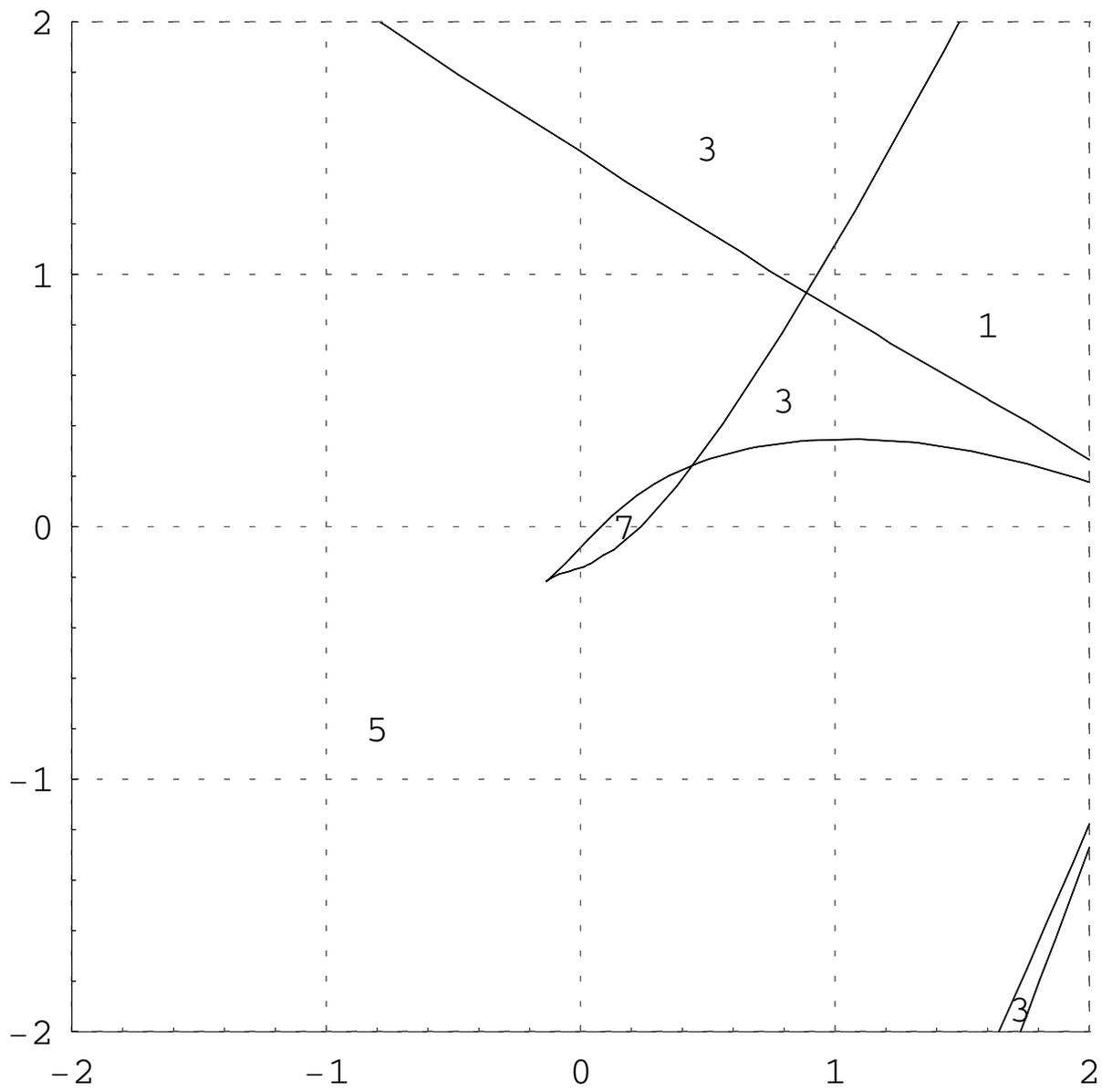


Abbildung 2.4(a): Lösungsregionen mit Vielfachheit im Bildbereich zur White-Box  $\psi = u^3 - uw^2 + v^3 + u^2 + uv + v^2 + u$ .

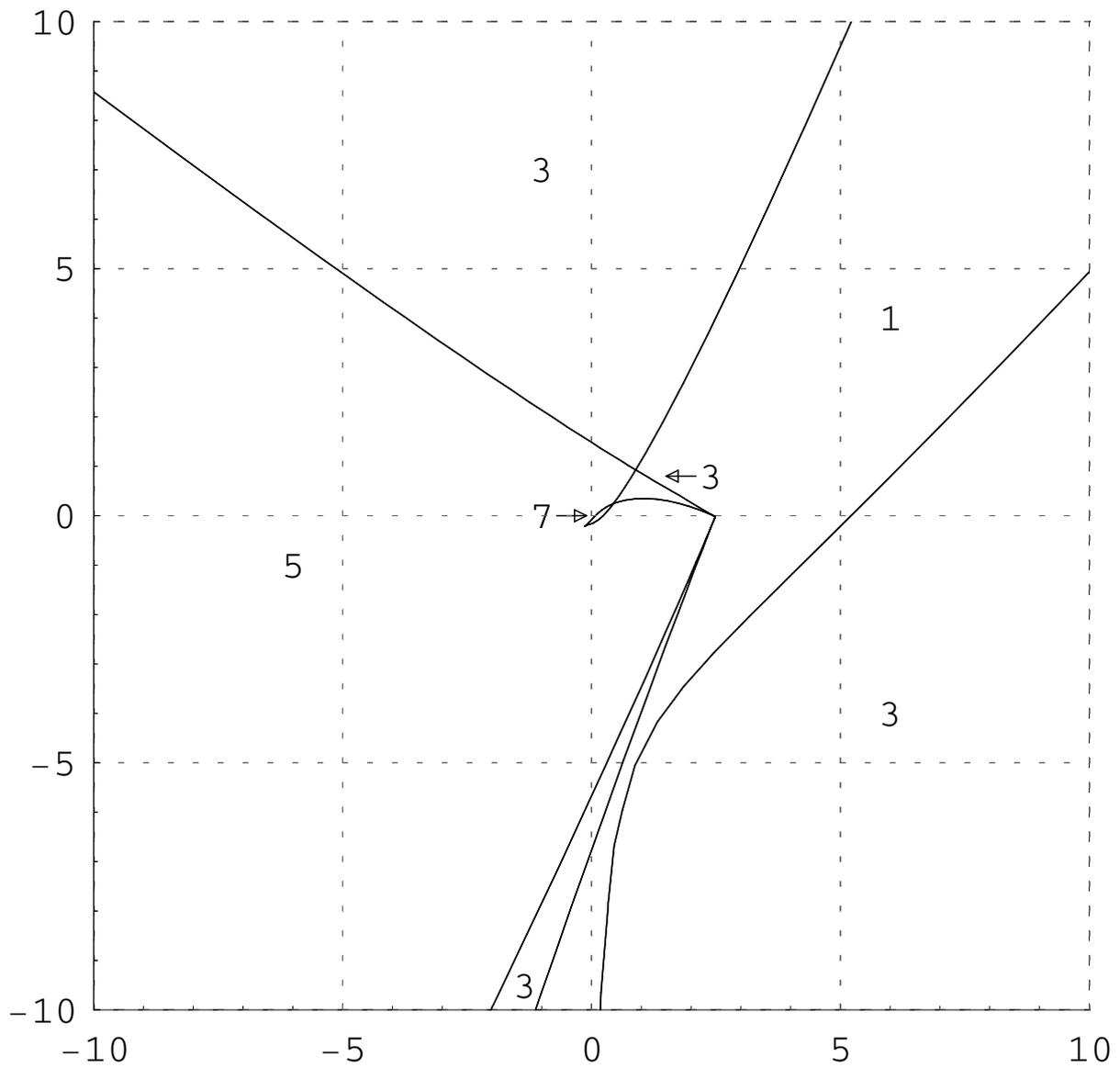


Abbildung 2.4(b): Lösungsregionen mit Vielfachheit im Bildbereich zur White-Box  $\psi = u^3 - uw^2 + v^3 + u^2 + uv + v^2 + u$ .

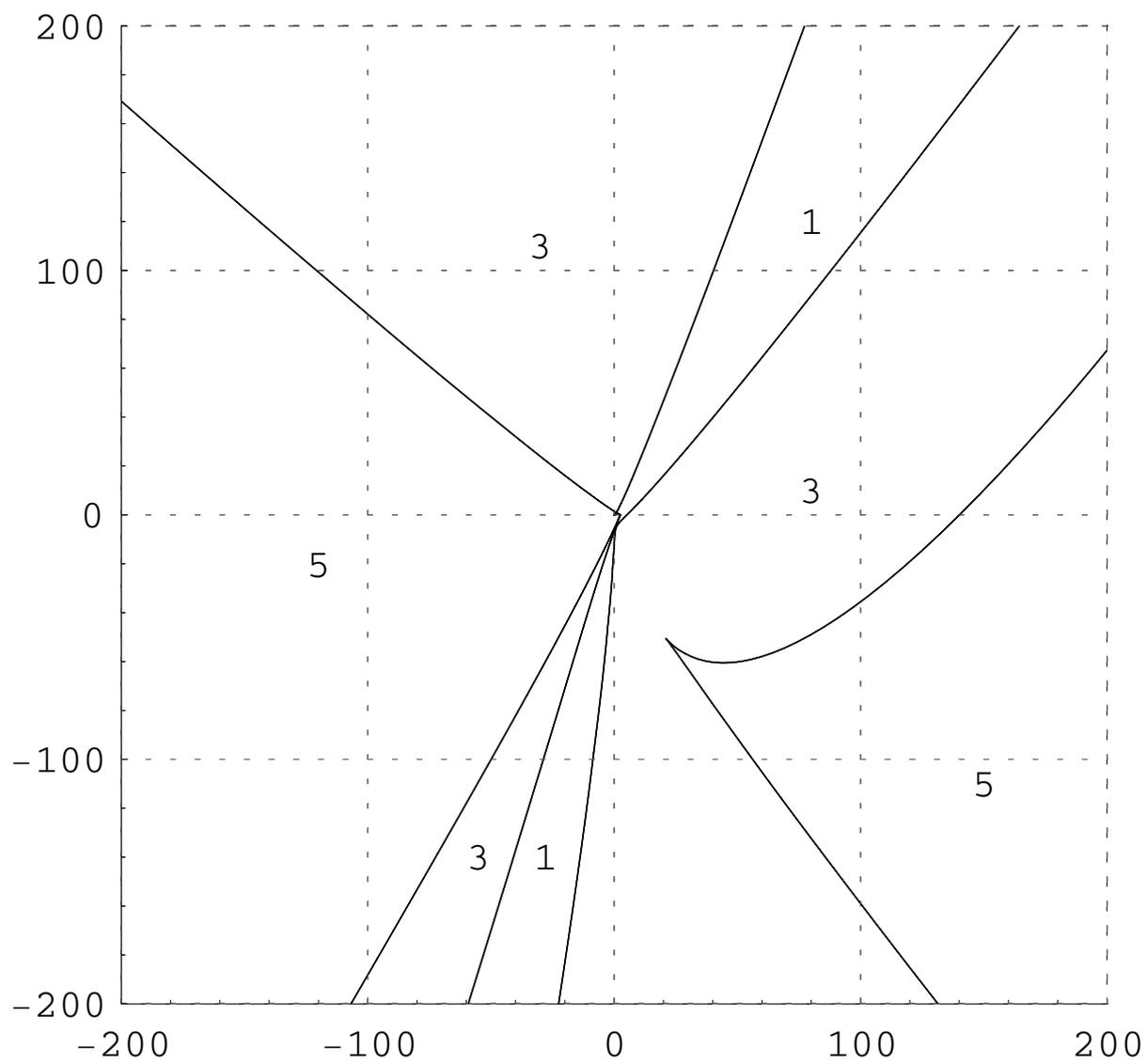


Abbildung 2.4(c): Lösungsregionen mit Vielfachheit im Bildbereich zur White-Box  $\psi = u^3 - uw^2 + v^3 + u^2 + uv + v^2 + u$ .

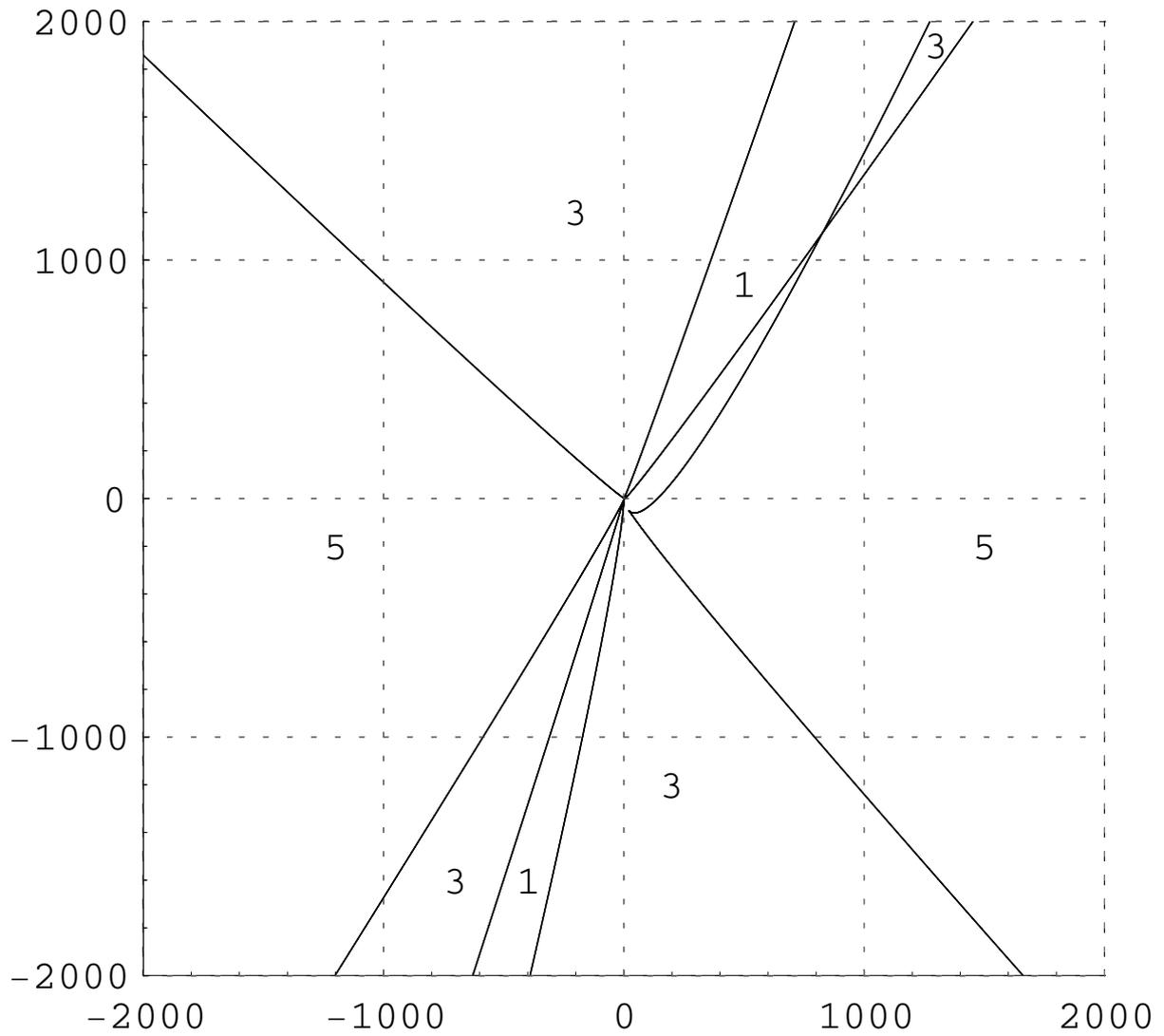


Abbildung 2.4(d): Lösungsregionen mit Vielfachheit im Bildbereich zur White-Box  $\psi = u^3 - uw^2 + v^3 + u^2 + uv + v^2 + u$ .

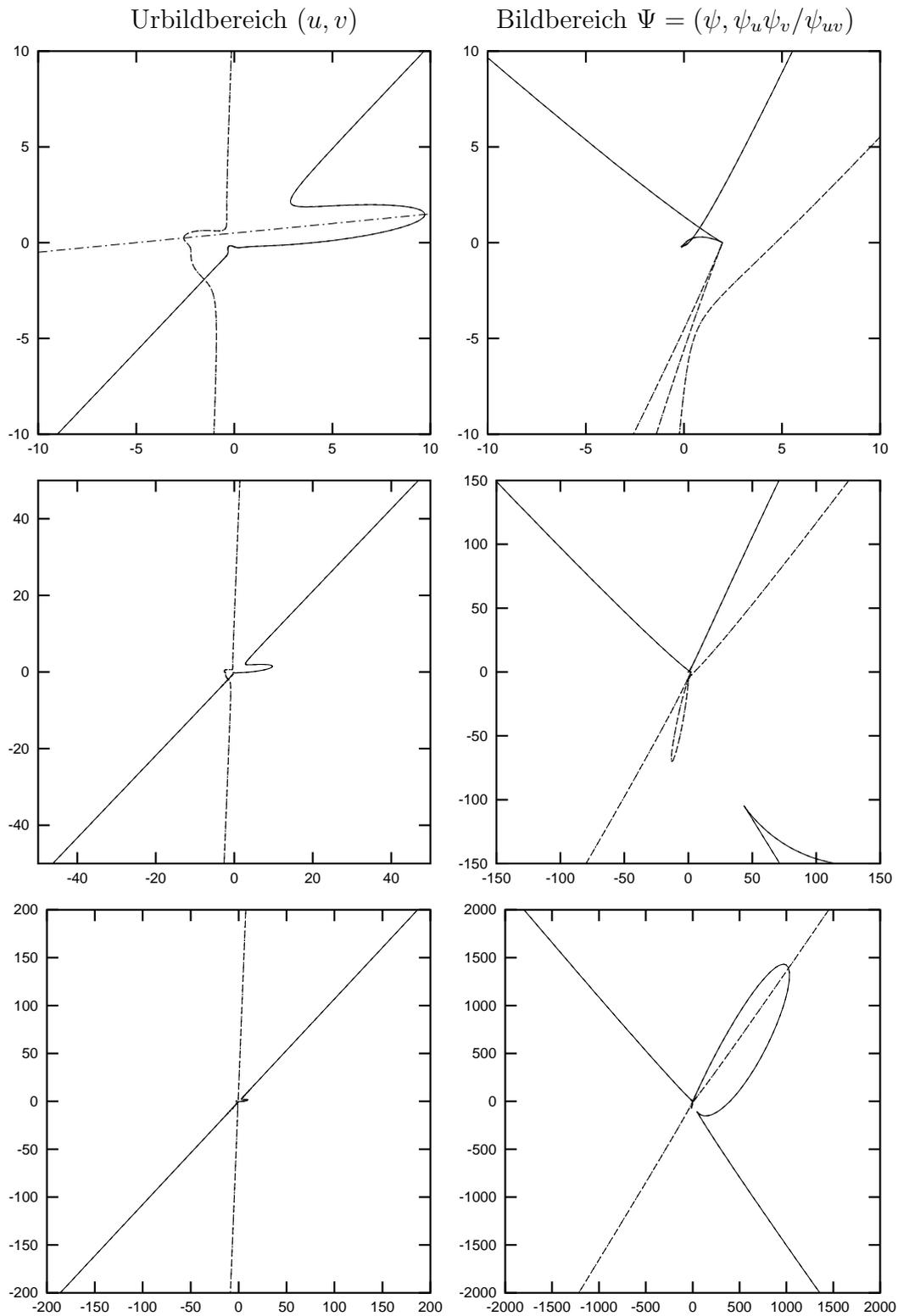


Abbildung 2.5: Kritische Punkte (Urbildbereich) und kritische Werte (Bildbereich) der Abbildung  $(u, v) \mapsto (\psi, \psi_u \psi_v / \psi_{uv})$  zur White-Box  $\psi = u^3 + 0.1u^2v - uv^2 + v^3 + u^2 + uv + v^2 + u$ .

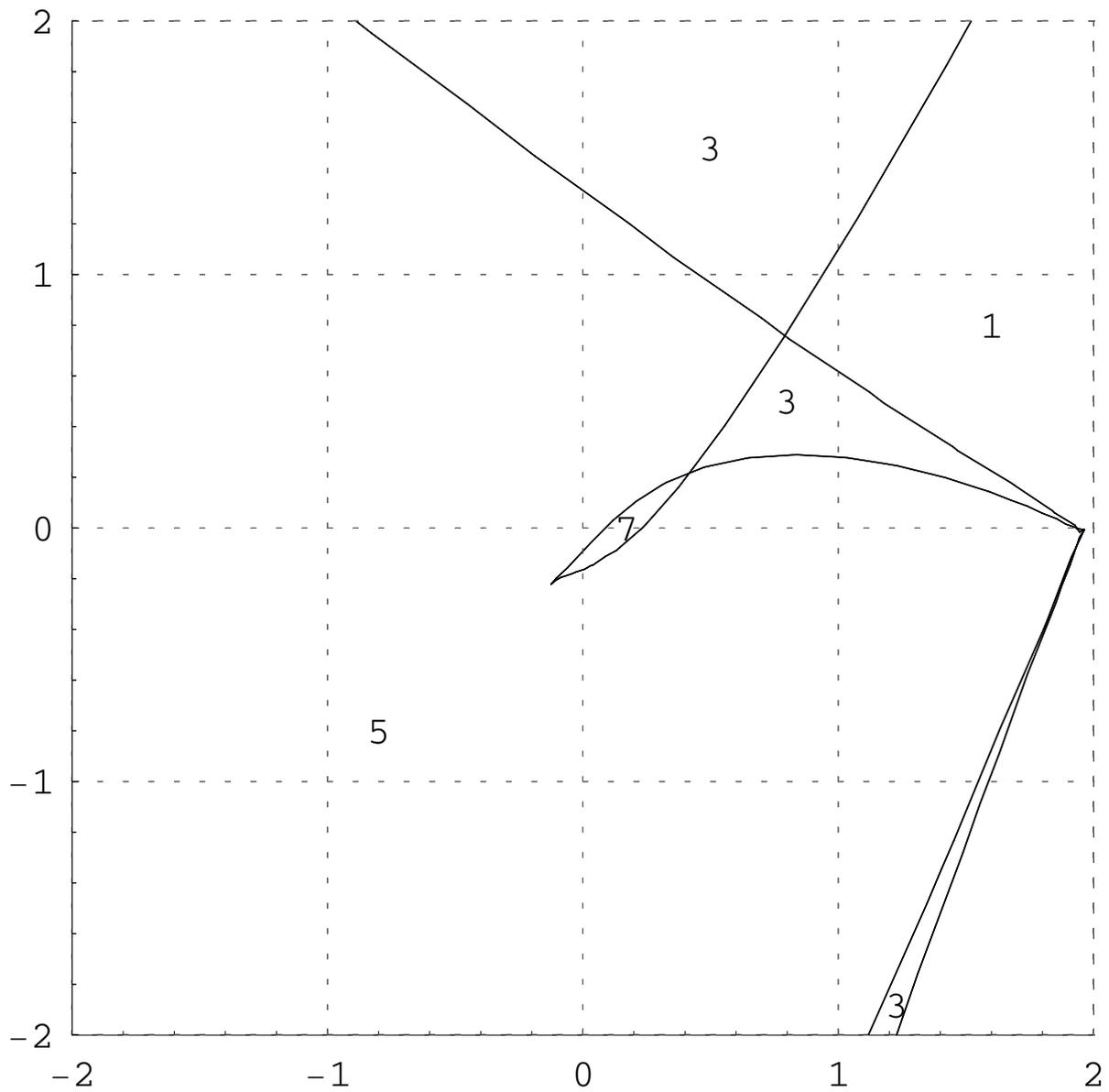


Abbildung 2.5(a): Lösungsregionen mit Vielfachheit im Bildbereich zur White-Box  $\psi = u^3 + 0.1u^2v - uv^2 + v^3 + u^2 + uv + v^2 + u$ .

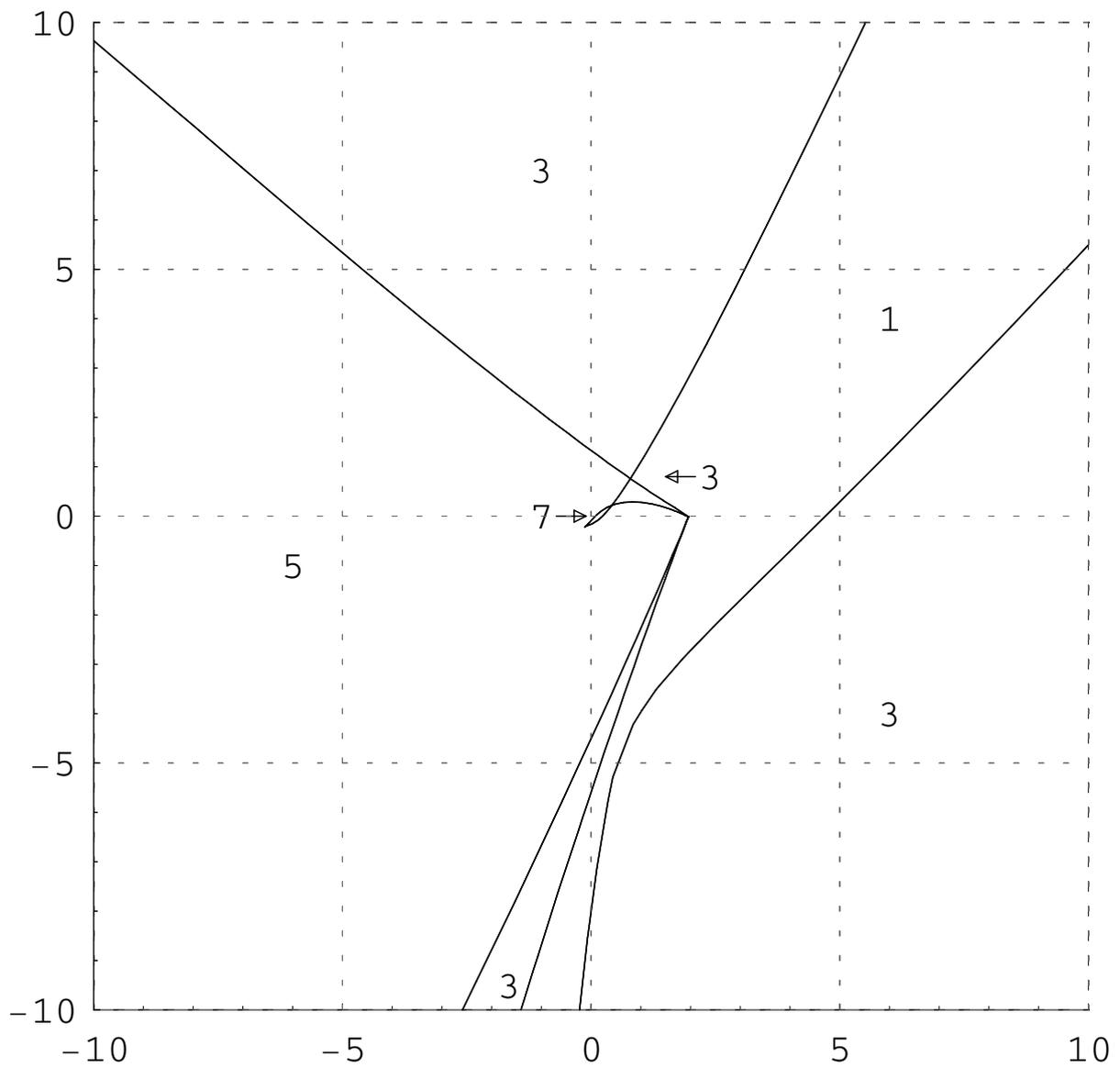


Abbildung 2.5(b): Lösungsregionen mit Vielfachheit im Bildbereich zur White-Box  $\psi = u^3 + 0.1u^2v - uv^2 + v^3 + u^2 + uv + v^2 + u$ .

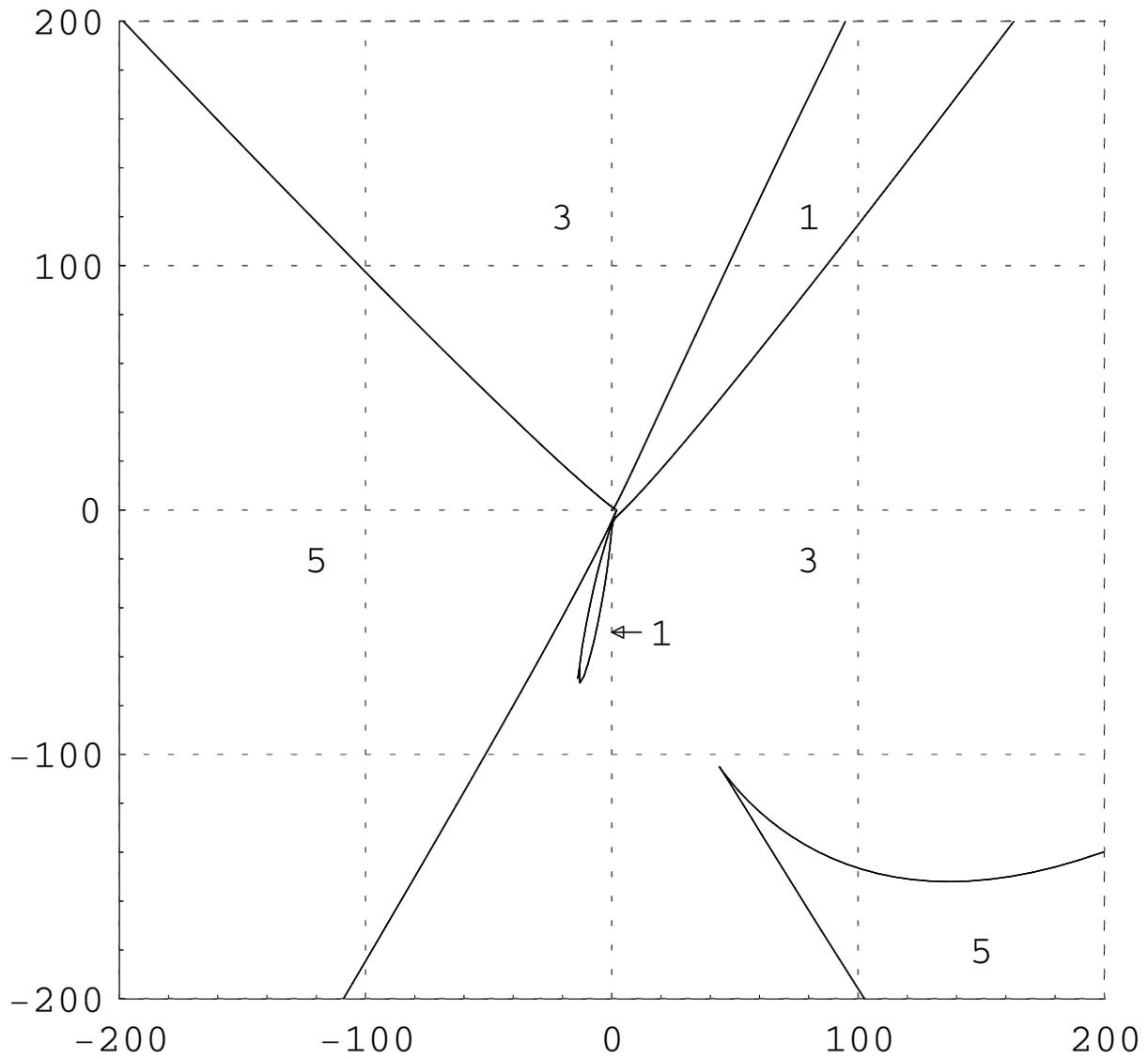


Abbildung 2.5(c): Lösungsregionen mit Vielfachheit im Bildbereich zur White-Box  $\psi = u^3 + 0.1u^2v - uv^2 + v^3 + u^2 + uv + v^2 + u$ .

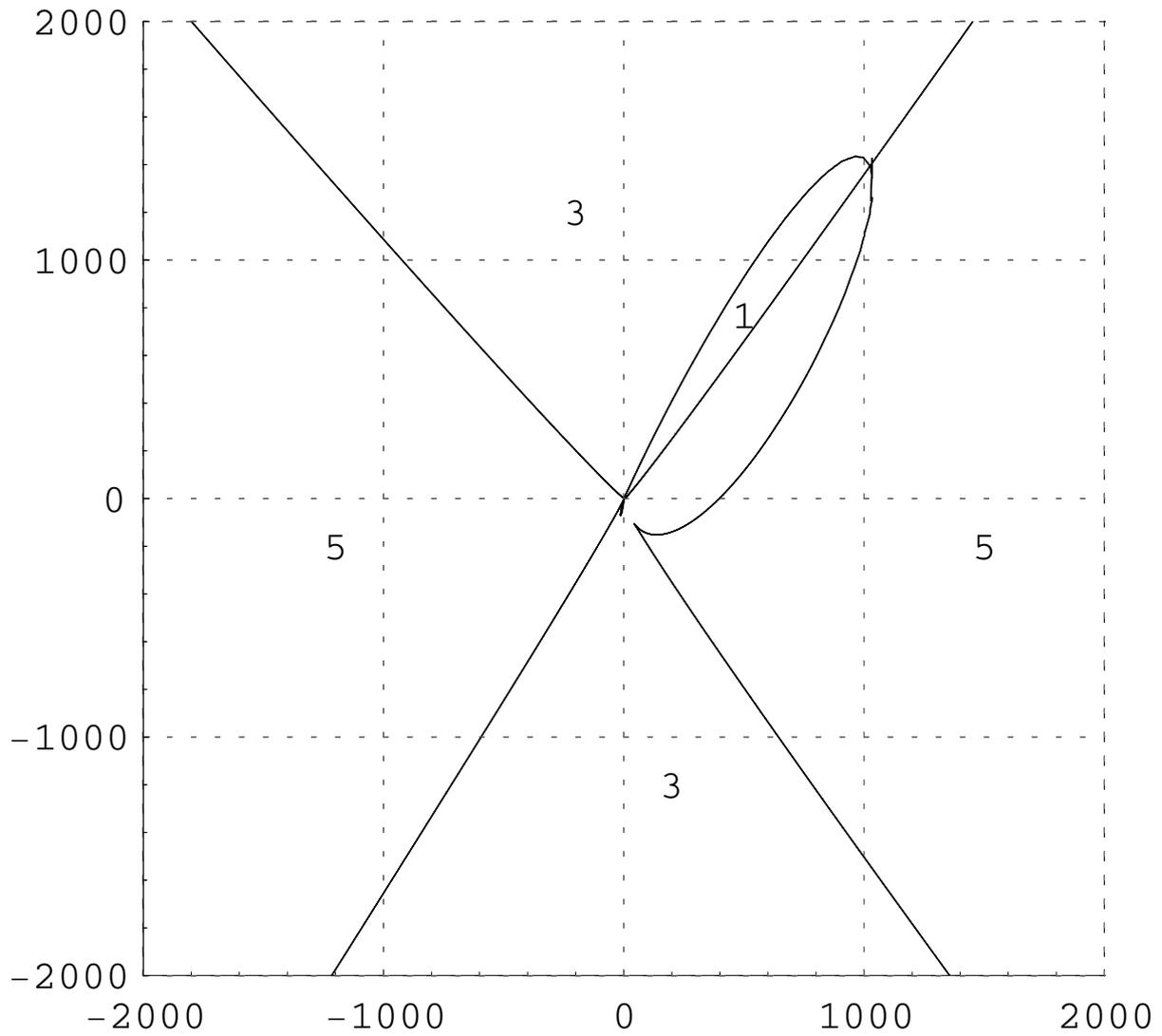


Abbildung 2.5(d): Lösungsregionen mit Vielfachheit im Bildbereich zur White-Box  $\psi = u^3 + 0.1u^2v - uv^2 + v^3 + u^2 + uv + v^2 + u$ .

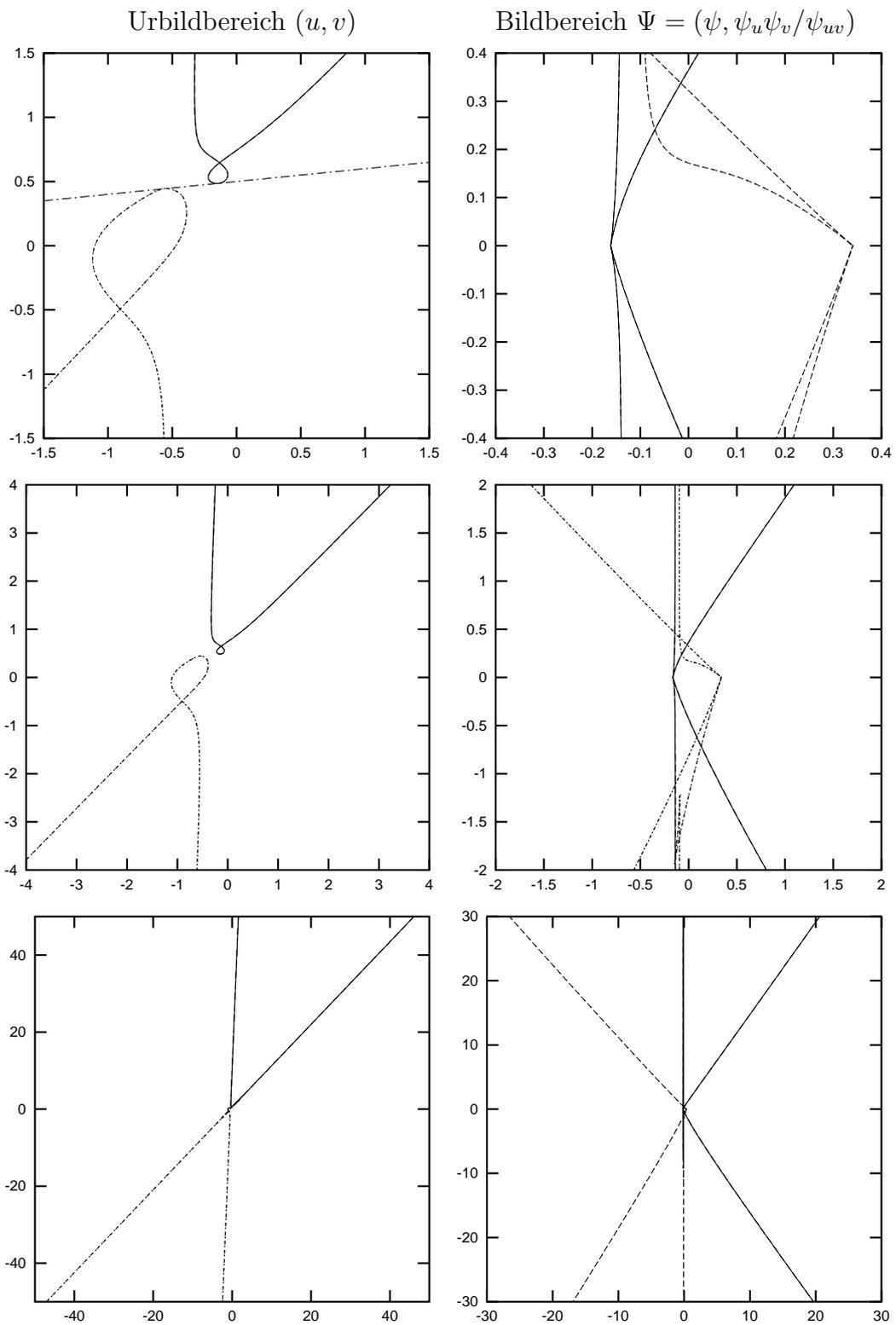


Abbildung 2.6: Kritische Punkte (Urbildbereich) und kritische Werte (Bildbereich) der Abbildung  $(u, v) \mapsto (\psi, \psi_u \psi_v / \psi_{uv})$  zur White-Box  $\psi = u^3 + 0.1u^2v - uv^2 + v^3 + u^2 + uv - v^2$ .

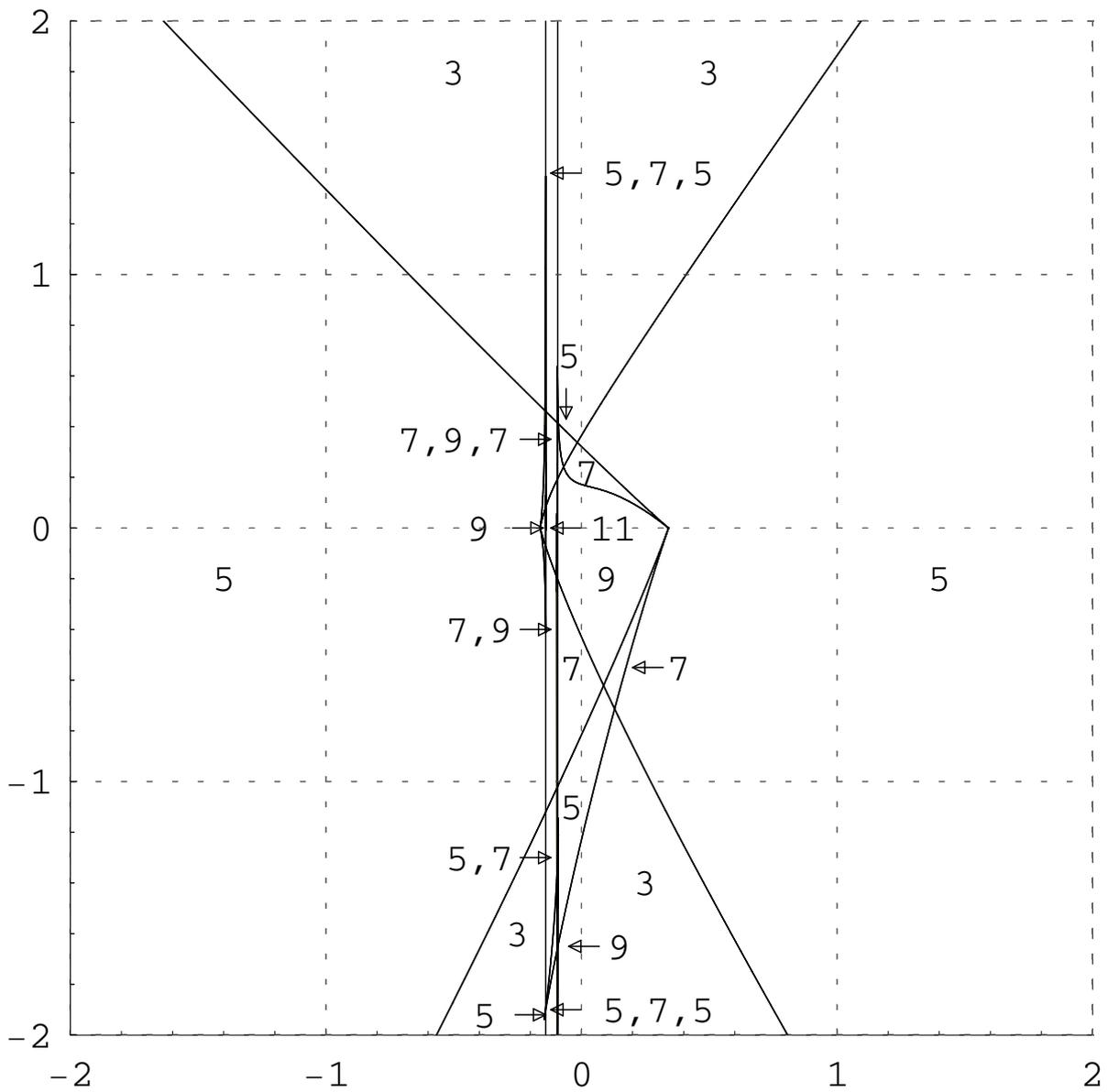


Abbildung 2.6(a): Lösungsregionen mit Vielfachheit im Bildbereich zur White-Box  $\psi = u^3 + 0.1u^2v - uv^2 + v^3 + u^2 + uv - v^2$ .

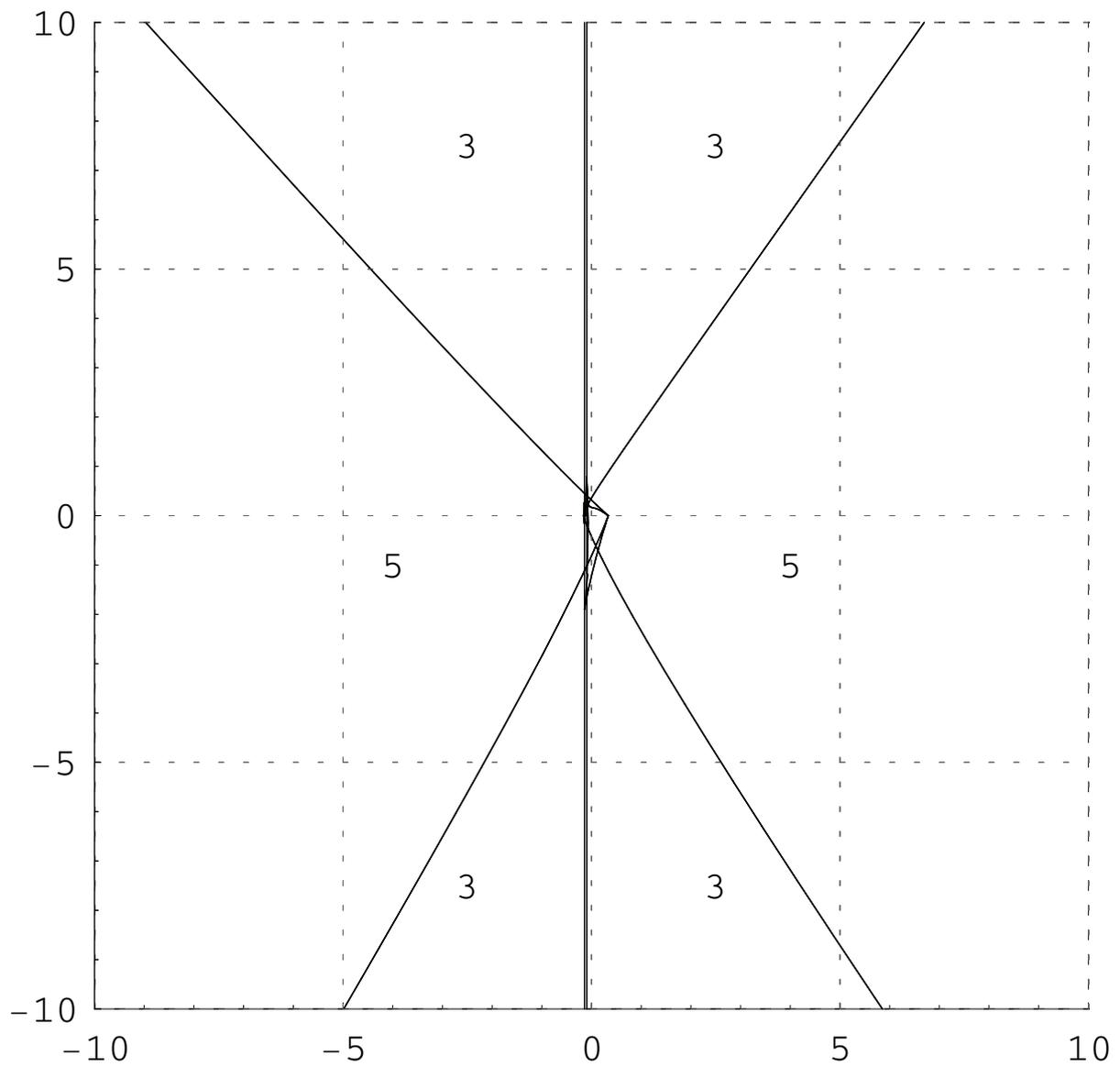


Abbildung 2.6(b): Lösungsregionen mit Vielfachheit im Bildbereich zur White-Box  $\psi = u^3 + 0.1u^2v - uv^2 + v^3 + u^2 + uv - v^2$ .

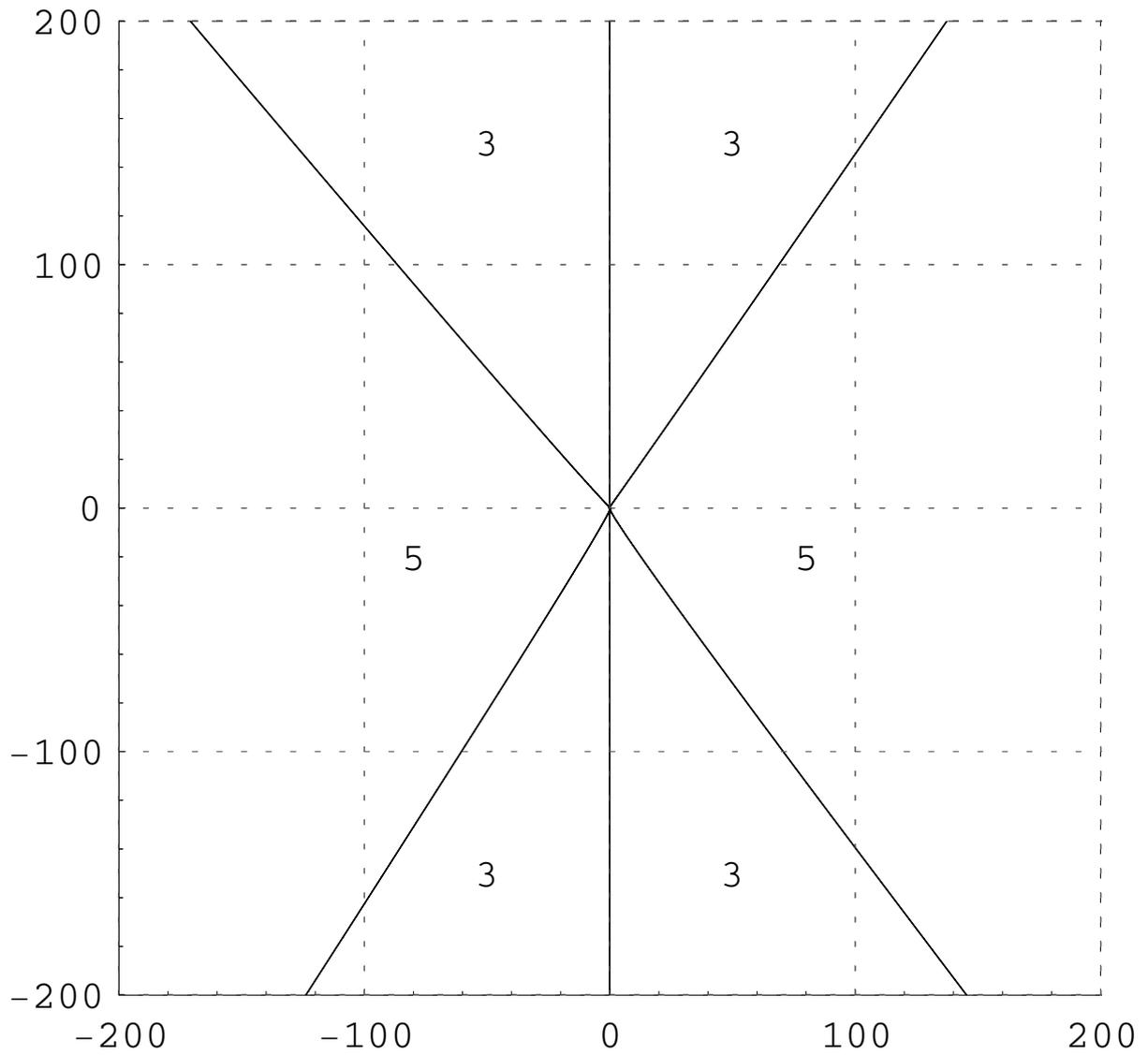


Abbildung 2.6(c): Lösungsregionen mit Vielfachheit im Bildbereich zur White-Box  $\psi = u^3 + 0.1u^2v - uv^2 + v^3 + u^2 + uv - v^2$ .

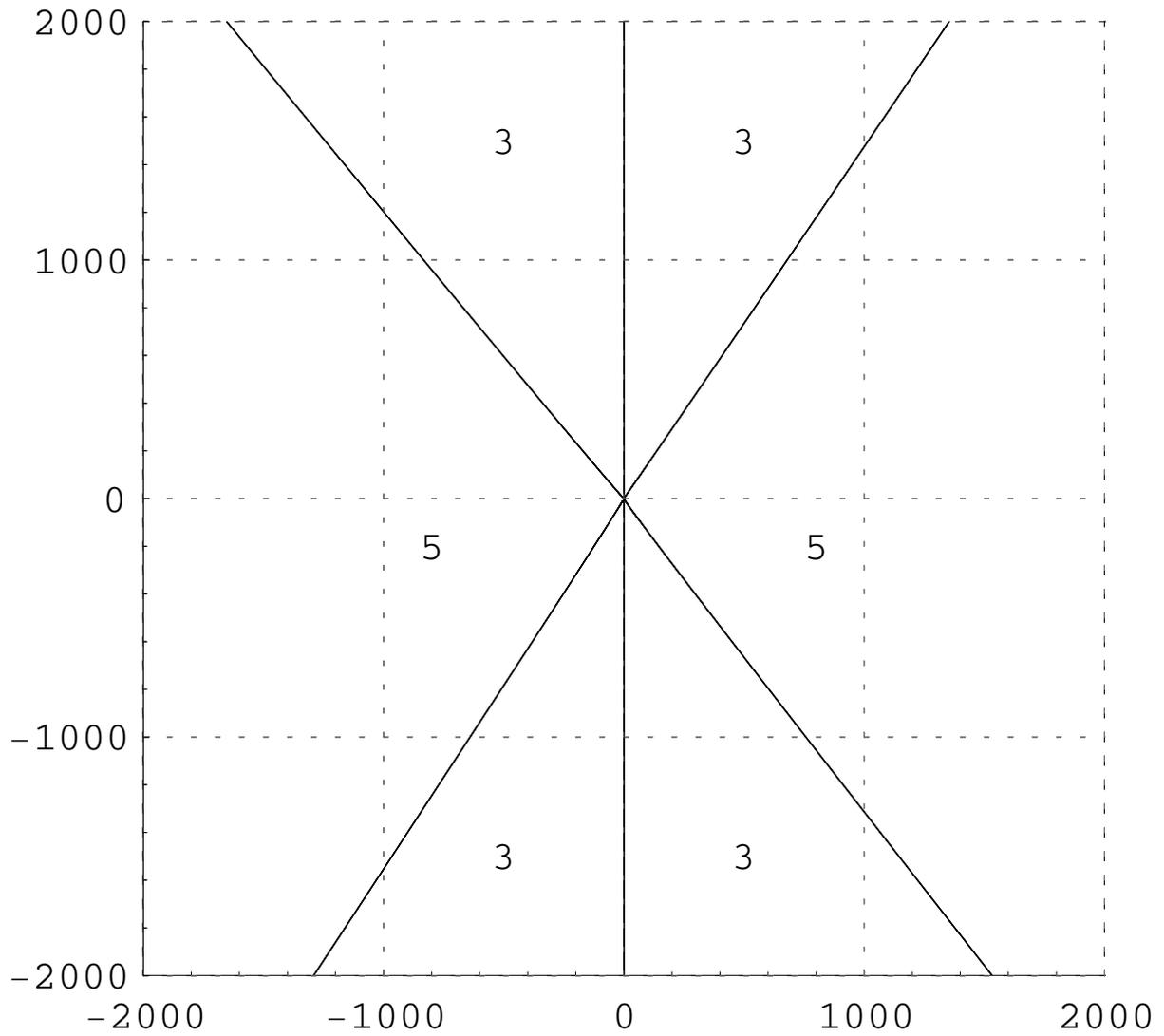


Abbildung 2.6(d): Lösungsregionen mit Vielfachheit im Bildbereich zur White-Box  $\psi = u^3 + 0.1u^2v - uv^2 + v^3 + u^2 + uv - v^2$ .

## 2.5 Konsistenztests

Wir haben bisher lokale und semilokale Verfahren zur Identifizierung der Black-Box-Funktion  $u, v, w$  in den Beispielen  $h = \psi(u, v)$  und  $h = w(\psi(u, v))$  entwickelt, sofern die White-Box  $\psi$  und, entlang einer Datenbasis

$$D = \{(x(s), y(s)); s \in \mathbb{R}\}, \quad (2.59)$$

auch die Ableitungen der globalen Input-Output Relation  $h = h(x, y)$  gegeben waren. Aus diesen Resultaten ergeben sich sofort vier Ansätze, um die Konsistenz vorgelegter Datensätze zu prüfen:

- (i) Verwendung mehrerer Datenbasen  $D_j$
- (ii) Vergleich lokaler und semilokaler Resultate
- (iii) Herleitung überbestimmter lokaler Systeme
- (iv) Herleitung überbestimmter Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen.

Die jeweiligen Ansätze können zudem gemischt verfolgt werden. Wir beschreiben kurz die jeweiligen Ansätze.

Zu (i) betrachten wir der Einfachheit halber disjunkte Kurven  $(x_j(s), y_j(s)) \in D_j \subset \mathbb{R}^2$  eindimensionaler Datenbasen. Seien  $X, Y$  die Durchschnitte der Wertebereiche der  $x_j(s)$  bzw.  $y_j(s)$ . Dann erhalten wir für  $(x, y) \in X \times Y$  zunächst mehrere Black-Box-Kandidaten  $u_j(x), v_j(y)$ , egal auf welchen konkreten Verfahren diese Identifizierung beruht. Die Streuung der Werte  $u_j(x), v_j(y)$  bezüglich  $j$ , zum jeweils selben Wert  $x$  bzw.  $y$ , ist ein direktes Maß für die Konsistenz der Daten. Werden die Daten nach Einbeziehung der Fehleranalyse als inkonsistent erkannt, so hat das vorgelegte Problem als nicht-identifizierbar zu gelten. Dann ist eventuell die Analyse struktureller Modelländerungen erforderlich, um Konsistenz der Daten zu erzielen. Liegt jedoch nur eine einzige Datenbasis vor, so greifen immer noch die Ansätze (ii)–(iv).

Der Vergleich lokaler und semilokaler Resultate, (ii), beruht auf der Möglichkeit, zusätzlich zur semilokalen Lösung — etwa der Differentialgleichungen (2.41), (2.48) — an beliebigen weiteren Stellen  $(x_j, y_j) = (x(s_j), y(s_j))$  der festen Datenbasis  $\mathcal{D}$  lokale Identifizierungen durchzuführen. Der Vergleich der so erhaltenen Lösungen  $(u_j^{loc}, v_j^{loc})$  mit der semilokalen Lösung  $(u(s_j), v(s_j))$  liefert unmittelbar beliebig viele Konsistenz-Tests. Zudem ist ein beliebiger Wert  $s_{j_0}$  als Startwert der semilokalen Lösung frei wählbar.

Die Herleitung überbestimmter lokaler Systeme, (iii), ist am einfachsten an den Normalformen  $\Xi = \Xi(\xi, \eta)$  aus Abschnitt 2.2 zu erläutern; vgl. (2.16), (2.27). Tatsächlich liefert jede Ableitung von  $\Xi$  eine Invariante

$$I_k := \partial_\xi^{k_1} \partial_\eta^{k_2} \Xi(0, 0) \quad (2.60)$$

für  $k = (k_1, k_2)$ . Für  $h = \psi(u, v)$  beispielsweise waren die  $I_k$  durch die Normalform definiert sofern  $k_1 k_2 = 0 < k_1^2 + k_2^2$  war. Deshalb hatten wir die Invarianten  $I_1 := I_{0,0}$  und  $I_2 := I_{1,1}$  als von niedrigster Ableitungsordnung bevorzugt. Jede der Invarianten  $I_{1,2}, I_{2,1}, I_{3,1}, I_{2,2}, I_{1,3}, \dots$  liefert jedoch eine weitere Identifikationsgleichung

$$I_k(\psi, u, v) = I_k(h, x, y), \quad (2.61)$$

die zur Konsistenzprüfung herangezogen werden kann. Wählen wir also  $N \geq 2$  zulässige Gleichungen der Form (2.61) aus, dürfen wir  $\binom{N}{2}$  Lösungen  $(u, v)$  im Punkt  $(x_0, y_0)$  erwarten, die sämtlich übereinstimmen müssen. Bis zur Ableitungsordnung  $n$  erhalten wir so

$$\begin{aligned} N &= \frac{1}{2}n(n-1) + 1 && \text{Gleichungen, und} \\ \binom{N}{2} &= \frac{1}{8}n(n-1)(n^2 - n + 2) && \text{Lösungen} \end{aligned} \quad (2.62)$$

als Tests auf Nicht-Identifizierbarkeit. Beispielsweise erhalten wir 6 Tests durch 3. Ableitungen.

Entsprechendes gilt für den Test (iii) im Beispiel  $h = w(\psi(u, v))$ . Durch freie Wahl von  $\Xi$  in (2.27) lässt sich leicht abzählen, dass wir bis zur Ableitungsordnung  $n$

$$\begin{aligned} N &= \frac{1}{2}(n-1)(n-2) && \text{Gleichungen, und} \\ \binom{N}{3} &= \frac{1}{48}n(n-1)(n-2)(n-3)(n^2 - 3n - 2) && \text{Lösungen} \end{aligned} \quad (2.63)$$

erhalten – als Tests auf Nicht-Identifizierbarkeit. Die zugehörige Identifikationsgleichungen haben diesmal die Form

$$I_k = (\psi, u, v, w) = l_k(h, x, y, \text{id}); \quad (2.64)$$

für jede Lösung ist ein Tripel dieser Gleichungen erforderlich. Beispielsweise erhalten wir 20 Tests durch 5. Ableitungen.

Die Herleitung überbestimmter Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen, (iv), ist eventuell noch vielversprechender. Wir betrachten als Beispiel wieder  $h = \psi(u, v)$ . Da bei der Herleitung des Systems (2.48) das Hybridmodell  $h = w(\psi(u, v))$  betrachtet wurde, dürfen wir in (2.47) einfach  $w' \equiv 1, w'' \equiv 0$  setzen und erhalten

$$\begin{aligned} \ddot{u} &= \left( \frac{\ddot{x}}{x} \dot{u} - \psi_{uu} \dot{u}^2 + h_{xx} \dot{x}^2 \right) / \psi_u \\ \ddot{v} &= \left( \frac{\ddot{y}}{y} \dot{v} - \psi_{vv} \dot{v}^2 + h_{yy} \dot{y}^2 \right) / \psi_v. \end{aligned} \quad (2.65)$$

Auch dieses System 2. Ordnung erlaubt eine Identifikation der Black-Box-Funktionen  $u, v$ . Es kann sogar kreuzweise mit einer der Gleichungen 1. Ordnung aus (2.41) kombiniert werden, um weitere Lösungen zu erhalten. Insgesamt ergeben sich daher 4 Bestimmungsmöglichkeiten für die Lösungen des Hybridmodells  $h = \psi(u, v)$ , wenn wir bereit sind, 2. Ableitungen der Daten in die Betrachtung einzubeziehen.

### 3 Generizität und Eindeutigkeit

In diesem Kapitel skizzieren wir ein zunächst abstraktes, aber sehr umfassendes Verfahren, das die eindeutige Identifizierbarkeit weiter Klassen strukturierter Hybridmodelle garantiert. Wie in (1.2) schreiben wir das allgemeine SHM in der Form

$$h = H(\psi, u) \quad (3.1)$$

mit gegebenen White-Boxes  $(\psi_j)_{j \in W}$  und zu bestimmenden Black-Boxes  $(u_i)_{i \in B}$ . Wir haben in (1.12) gesehen, dass bereits im einfachsten Fall  $H(\psi, u)(x_1, x_2) = \psi(u_1(x_1), u_2(x_2))$  aus Abb. 2.1 die eindeutige Identifizierung von  $u_1, u_2$  scheitert, wenn  $\psi$  eine spezielle additive Struktur besitzt. Der zentrale Begriff, der Eindeutigkeit des Identifizierungsproblems auch in sehr allgemeinen Fällen garantiert, ist deshalb die *Generizität* der White-Box-Funktionen  $\psi_j$ .

Unter Generizität, alias Nicht-Ausartung, verstehen wir dabei, dass die  $\psi_j$  gewisse Bedingungen erfüllen, die für offene und zugleich dichte Mengen der  $\psi_j$  — oder wenigstens für abzählbare Durchschnitte solcher Mengen — erfüllt sind. Der Satz von Baire besagt unter sehr allgemeinen Voraussetzungen, dass solche generischen Mengen, die auch residual genannt werden, jedenfalls noch dicht sind. Dabei bedeutet „dicht“, dass beliebig kleine Störungen stets Elemente der residualen Mengen liefern müssen. Im Unterschied zu allein dichten Mengen sind jedoch abzählbare Durchschnitte residualer Mengen stets wieder residual. Generizität ist also ein recht stabiler Begriff; man kann Elemente generischer Teilmengen als typische Vertreter der Gesamtheit auffassen.

Um über „dichte“ und „offene“ Mengen zu sprechen, muss zunächst ein geeigneter Raum für die White-Box-Funktionen  $\psi$  und unsere Black-Box-Funktionen  $u$  fixiert werden. Weil höhere Ableitungen der  $u$  und  $\psi$  eine bedeutende Rolle spielen, die uns bereits in Kapitel 2 begegnet ist, wählen wir *Jet-Räume*  $J[u]$  und  $J[\psi]$ . Die Räume  $J[u]$  zählen neben den Funktionen  $u_i$  selbst auch noch deren Ableitungen bis zu einer gewissen Ordnung  $N$  auf; wir schreiben  $J^N[u]$ , um diese Begrenzung zu betonen. Wir werten die Ableitungen konkret auf endlichen Mengen  $\mathcal{M}$  von Black-Box-Inputs aus, die letzten Endes aus der Datenbasis  $\mathcal{D}$  hervorgehen. Besteht  $u$  beispielsweise aus einer einzigen Black-Box-Funktion  $u : \mathbb{R}^{n_1} \rightarrow \mathbb{R}^{n_2}$ , dann wird  $J^N[u]$  ein endlich-dimensionaler linearer Raum der Dimension

$$\dim J^N[u] = |\mathcal{M}| \cdot n_2 \cdot \binom{N + n_1}{n_1} \quad (3.2)$$

sein, wobei  $|\mathcal{M}| < \infty$  die Mächtigkeit der Testmenge  $\mathcal{M}$  bezeichnet. Für detailliertere Beispiele verweisen wir auf Kapitel 4.

In Jet-Räumen  $J = J^N$  können wir also (3.1) als Gleichung für  $u \in J[u]$  auffassen mit gegebenen  $h \in J[h]$ ,  $\psi \in J[\psi]$  und einer Abbildung

$$H : J[\psi] \times J[u] \longrightarrow J[h], \quad (\psi, u) \longmapsto H(\psi, u), \quad (3.3)$$

welche die genaue Struktur des Graphen wiedergibt, der das SHM beschreibt. Weil der reale Reaktor seinen Output  $h$  durch — zunächst unbekannte — Black-Box-Funktionen  $u^*$  erzeugt, gilt sicherlich

$$h = H(\psi, u^*) \quad (3.4)$$

für die gegebenen Daten  $h$ . Die Eindeutigkeitsfrage lautet also wie folgt: besitzt die Gleichung

$$R(\psi, u, u^*) := H(\psi, u) - H(\psi, u^*) \quad (3.5)$$

nur die trivialen Lösungen  $u = u^*$  (Eindeutigkeit), oder gibt es eventuell weitere Lösungen?

Den Schlüssel zur Beantwortung dieser Frage liefert der Transversalitätssatz von René Thom, siehe z.B. [AR67]. Ohne hier auf Einzelheiten des Beweises weiter einzugehen, fixieren wir die Notation

$$\begin{aligned} r_u &:= \dim \text{Bild}(R_u(\psi, u)), \\ r_\psi &:= \dim \text{Bild}(R_\psi(\psi, u)), \\ r &:= \dim \text{Bild}(D_{(\psi, u)}R(\psi, u)) \end{aligned} \quad (3.6)$$

für die endlich-dimensionalen Bilder der partiellen Ableitungen  $R_u$ ,  $R_\psi$  und können dann unseren Hauptsatz formulieren, der die Eindeutigkeitsfrage beantwortet.

**Satz 3.1** *Für alle  $(\psi, u)$  gelte die Rang-Bedingung*

$$r > \max_{(\psi, u)} r_u \quad (3.7)$$

*Dann ist für eine generische Menge von White-Box-Funktionen  $\psi$  die Lösung  $u = u_*$  des SHM (3.1) eindeutig bestimmt.*

Leider ist kein allgemeines Rezept bekannt, um die zentrale Voraussetzung (3.7) zu überprüfen. Diese Rang-Bedingung hängt vielmehr entscheidend von Eigenschaften des SHM ab. Wir werden beispielsweise in Abschnitt 5.2 sehen, dass Kalibrierungen tatsächlich die Rang-Bedingung (3.7) verletzen. Das muss ja auch so sein. Wenn die Kalibrierungen jedoch von Ausartungen gewisser White-Boxes kommen, wie im additiven Fall (1.12), kann der gefeierte Transversalitätssatz von Thom eben genau dann Abhilfe durch eine Generizitäts-Bedingung an die White-Boxes  $\psi$  schaffen, wenn die Rang-Bedingung gilt.

Für Einzelheiten der Durchführung dieses Programms für konkrete SHM wird auf die folgenden Kapitel verwiesen.

## 4 Baumstrukturen

### 4.1 Rekursive Identifikation aller Baumstrukturen

In [FS03] wird die Identifikation allgemeiner skalarer Hybridmodelle mit Baumstruktur mathematisch rigoros gefasst und bewiesen. Wir geben hier die entsprechende Formulierung.

Wir betrachten einen endlichen Baum, also einen ungerichtet zyklensfreien Graphen mit Ecken  $j \in J = \{1, \dots, N\}$ . Der Graph wird orientiert und anschließend mit disjunkten Levels  $J = \ell^0 \cup \dots \cup \ell^m$  versehen, so dass die Orientierung der Kanten stets zum nächst höheren Level weist. Ausnahme ist das einpunktige höchste Level  $\ell_m = \{N\}$ . Die orientierten Kanten definieren also zu jeder Ecke  $j \in \ell_k$ ,  $0 \leq k < m$ , einen eindeutigen Nachfolger  $s(j) \in \ell_{k+1}$ . Die Menge der Vorgänger von  $j$  ist  $p_j := s^{-1}(j)$ , für  $j \in J \setminus \ell_0$ .

Um den Baumgraphen als Hybridmodell zu betrachten, zerlegen wir  $J \setminus \ell_0 = B \cup W$  disjunkt und bezeichnen Ecken  $j \in B$  als *Black-Box*,  $j \in W$  als *White-Box*. Wir assoziieren nun jeder Box  $j \in J \setminus \ell_0$  eine skalare *Input-Output Funktion*

$$u_j = u_j((x_i)_{i \in p_j}) \in \mathbb{R} \quad (4.1)$$

in Abhängigkeit von den jeweiligen *Inputs*  $(x_i)_{i \in p_j} \in \mathbb{R}^{|p_j|}$  der Box  $j$ . Dabei sind die Funktionen  $u_j$  gegeben für White-Boxes  $j \in W$ , und gesucht für Black-Boxes  $j \in B$ . Durch die Definition

$$x_j = u_j \quad \text{für } j \in J \setminus \ell_0 \quad (4.2)$$

ist rekursiv bezüglich der Level  $\ell_k$  durch den Baum eine Verkettung der Funktionen  $u_j$  definiert. Setzen wir  $x^0 := (x_i)_{i \in \ell_0}$ , so erhalten wir die globale *Input-Output Relation*

$$h(x^0) := u^N \in \mathbb{R} \quad (4.3)$$

des Hybridmodells. Wir geben  $h$  lokal auf einer *Datenbasis*

$$x^0 \in \mathcal{D} \subseteq \mathbb{R}^{|\ell_0|} \quad (4.4)$$

vor. Dabei ist zunächst  $\mathcal{D}$  eine eingebettete Untermannigfaltigkeit mit Rand  $\partial\mathcal{D}$ .

Als Hindernis einer eindeutigen Identifizierung aller Black-Box-Funktionen  $u_j$ ,  $j \in B$ , fällt sofort wie in (1.1) die *triviale Kalibrierung* auf. Seien  $u_j, u_{s(j)}$  aufeinander folgende Black-Box-Funktionen;  $j \notin \ell_0, \ell_m$ . Dann sind mit diesen Funktionen zugleich auch die Funktionen

$$\sigma \circ u_j, \quad u_{s(j)} \circ \sigma^{-1} \quad (4.5)$$

Lösungen des Identifizierungsproblems, für jede invertierbare reelle Funktion  $\sigma$  als Kalibrierung. Die Identifizierung der Black-Box kann deshalb höchstens bis auf triviale Kalibrierung erfolgen.

Wir formulieren nun die Voraussetzungen (i)-(iii) für den Schuppertschen Satz. Wie oben betrachten wir ein Hybridmodell mit Baumstruktur, Black- und White-Box-Funktionen  $u_j$ ,  $j \in B \cup W$ , die globale Input-Output-Relation  $h(x^0)$  mit Input-Variablen  $x^0$ , und eine Datenbasis  $x^0 \in \mathcal{D}$ . Es gelte

- (i)  $u_{j,x_i} \neq 0$  für die partiellen Ableitungen aller  $u_j$  nach  $x_i$ , für alle  $j \in J \setminus \ell_0$  und  $i \in p_j$ ;
- (ii) die Datenbasis  $\mathcal{D} \subseteq \mathbb{R}^{|\ell_0|}$  ist eine Untermannigfaltigkeit der Dimension

$$\dim \mathcal{D} = \max_{j \in B} |p_j| \quad (4.6)$$

und von allgemeiner Lage in  $\mathbb{R}^{|\ell_0|}$ ;

- (iii)  $h$  selbst und seine partiellen Ableitungen sind — bis zu genügend hoher, endlicher Ordnung — auf der Datenbasis  $\mathcal{D}$  vorgegeben. Alle White-Box-Funktionen  $u_j$ ,  $j \in W$  sind ebenfalls von dieser Ordnung differenzierbar und erfüllen gewisse generische Nichtentartungs-Bedingungen.

Voraussetzung (i) schließt insbesondere kritische Punkte der  $u_j$  aus. Beispielsweise sind dann die Bedingungen  $h_x, h_y \neq 0$  aus Kapitel 2 automatisch erfüllt. Die Bedingung „allgemeiner Lage“ für die Datenbasis, (ii), ist ähnlich wie in Kapitel 3 im Bairschen Sinne zu verstehen. Die Nichtausartungs-Bedingungen an die White-Box-Funktionen  $u_j$  in (iii) umfassen insbesondere Bedingungen wie die eindeutige Lösbarkeit der identifizierenden Gleichungssysteme aus Kapitel 2; siehe etwa (2.5) und (2.10).

**Satz 4.1** [Sch00, FS03] *Unter den obigen Voraussetzungen (i)–(iii) sind alle Black-Box-Funktionen  $u_j$ ,  $i \in B$ , des skalaren Hybridmodells (4.1)–(4.4) mit Baumstruktur bis auf triviale Kalibrierung (4.5) im durch die Datenbasis  $\mathcal{D}$  vorgegebenen Bereich eindeutig bestimmt.*

Die Identifikation der Black-Box-Funktion  $u_j((x_i)_{i \in p_j})$  kann selbstverständlich nur im Bereich derjenigen  $(x_i)_{i \in p_j}$  erwartet werden, die innerhalb der Input-Werte  $x^0 \in \mathcal{D}$  auch tatsächlich auftreten. Für  $j \in \ell_1$ ,  $i \in \ell_0$  sind dies Projektionen von  $\mathcal{D}$  auf die Komponenten  $(x_i)_{i \in p_j}$  des Input-Vektors  $x^0$  selbst. Für  $j \in \ell_k$ ,  $k > 1$  hingegen hängt dieser Bereich noch von den  $u_i$  auf den orientierten Pfaden ab, die vom Level  $\ell_0$  zu  $j \in \ell_k$  führen.

Der induktive Beweis des Satzes 4.1 wird in [FS03] gegeben und würde den Rahmen unserer Übersicht sprengen. Den Beispielen aus Kapitel 2 kommt in diesem Beweis jedoch eine zentrale Rolle zu; insbesondere tritt der Black-White-Black-Baum  $h = w(\psi(u, v))$  aus Abschnitt 2.1.2 als zentraler Baustein hervor. In der leicht verallgemeinerten Form

$$h(x_1, \dots, x_n) = w(\psi(u_1(x_1), \dots, u_n(x_n))), \quad (4.7)$$

siehe Abb. 4.1, lässt sich rekursiv jede Baumstruktur auf die wiederholte Anwendung dieses Spezialfalles zurückführen.

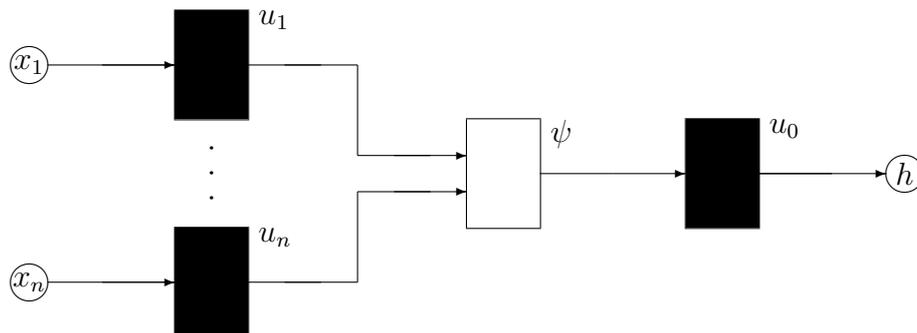


Abbildung 4.1: Allgemeiner Black-White-Black-Baum.

## 4.2 Lokale Normalform skalarer Baumstrukturen

In Kapitel 2 haben wir die lokale Identifikation der einfachen Hybridmodelle  $h = \psi(u, v)$  und  $h = w(\psi(u, v))$  im Punkt  $(x_0, y_0)$  zurückgeführt auf Systeme der Form

$$I(\psi, u, v) = I(h, x, y); \quad (4.8)$$

siehe (2.5) und (2.10). Hierbei waren  $I = (I_1, I_2)$  Ausdrücke, die partielle Ableitungen der White-Box  $\psi$  bzw. der Daten  $h$  bis zur Ordnung zwei bzw. vier in  $(x_0, y_0)$  und  $(u_0, v_0)$  enthielten. Wir beschreiben nun Normalformen im allgemeinen Fall skalarer Black-White-Black-Bäume mit  $n$  skalaren Inputs, vgl. (4.7). Für Einzelheiten wird wiederum auf [FS03] verwiesen.

Wir gehen analog zu (2.25)–(2.36) vor. Mit der Gruppenaktion

$$\Xi^{x_1, \dots, x_n, w}(\xi_1, \dots, \xi_n) := w(\Xi(x_1(\xi_1), \dots, x_n(\xi_n))) \quad (4.9)$$

der Transformationen  $x_1, \dots, x_n, w$  lautet das Identifikationsproblem (4.7) nun

$$h^{\text{id}, \dots, \text{id}, \text{id}} = \psi^{u_1, \dots, u_n, w}. \quad (4.10)$$

Für Multi-Indices  $k = (k_1, \dots, k_n) \in \mathbb{N}_0^n$  und  $k! := k_1! \cdots k_n!$  bezeichne

$$\Xi_k(\xi_1, \dots, \xi_n) := \partial_{\xi_1}^{k_1} \cdots \partial_{\xi_n}^{k_n} \Xi(\xi_1, \dots, \xi_n)$$

die entsprechende partielle Ableitung der Ordnung  $|k| = k_1 + \cdots + k_n$ . Ferner sei  $e_j = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)$  der  $j$ -te Einheitsvektor und  $e = (1, \dots, 1)$ . Dann erhalten wir die *Normalform*

$$\begin{aligned} \Xi(t e_j) &= t, \\ \Xi(t e) &= nt, \\ \Xi_{k_0} &= 1, \end{aligned} \quad (4.11)$$

falls  $\Xi_{e_j} \neq 0$  und falls  $k_0$  so gewählt ist, dass  $|k_0|$  gerade ist und ursprünglich  $\Xi_{k_0} \neq 0$ . Weil unsere Identifikation letztlich auf Jet-Räumen wie in Kapitel 3 beruht, also auf endlichen Taylor-Entwicklungen, können wir das Normalform-Resultat auch direkt für die Taylor-Entwicklung formulieren.

p \ n	2	3	4	5
0	0	0	0	0
1	0	0	0	0
2	0	1	4	8
3	1	7	19	37
4	2	18	49	101
5	5	35	100	221

Tabelle 4.2: Dimensionen  $d(n, p)$  des Raumes der reellen Taylorkoeffizienten  $\Xi_k$  der Normalform  $\Xi$  aus (4.9) mit Ableitungsordnung  $|k| \leq p$ .

**Satz 4.2** *In obiger Notation für die partiellen Ableitungen  $\Xi_k$  lautet die Normalform (4.11)*

$$\begin{aligned}
\Xi_k &= 0, & \text{für } k = p e_j, \\
\Xi_k &= 1, & \text{für } k = e_j, \\
\Xi_{k_0} &= 1, \\
\sum_{|k|=p} \frac{1}{k!} \Xi_k &= 0,
\end{aligned} \tag{4.12}$$

für alle Ordnungen  $p \neq 1$  und alle  $j = 1, \dots, n$ . Für  $n = 2$  Inputs kann die gerade Ordnung  $|k_0| = 4$  gewählt werden, sonst  $|k_0| = 2$ . Ferner muss  $k_0 \neq p e_j$  sein. Mit den Einschränkungen  $u_j(0) = 0$ ,  $w(0) = 0$  sind dann die Jets der Transformationen  $u_1, \dots, u_n, w$  auf diese Normalformen sogar eindeutig bestimmt.

Wird  $\Xi$  durch seine Taylor-Reihe dargestellt, dann ist umgekehrt  $\Xi$  in Normalform (4.11), wenn Bedingungen (4.12) gelten.

Die Dimensionen  $d(n, p)$  des Raumes der reellen Taylorkoeffizienten  $\Xi_k$  der obigen Normalform  $\Xi$  mit Ableitungsordnung  $|k| \leq p$  ist für  $n \geq 3$  gegeben durch

$$d(n, p) = \begin{cases} 0 & \text{für } p = 0, 1, \\ \binom{n+p}{n} - (n+1)p - 1 & \text{für } p \geq 2. \end{cases} \tag{4.13}$$

Korrekturen für  $n = 2$  ergeben sich aus Tabelle 4.2.

Wie bereits in Kapitel 2 an einfacheren Beispielen ausgeführt, ergeben sich nun sofort Bestimmungsgleichungen der Form

$$I_k(\psi, u) := \Xi_k(0) = I_k(h, x) \tag{4.14}$$

wenn  $\Xi$  die gemeinsame Normalform für die gegebenen Daten  $h$  und  $\psi$  im Punkt  $x$  bzw.  $u(x)$  bezeichnet. Wir können dann  $u$  aus den resultierenden Systemen (4.14) bestimmen.

Wir beschließen diesen Abschnitt, indem wir sämtliche erforderlichen Invarianten  $I_k$  für die Fälle  $n = 2$ ,  $n = 3$  und  $n \geq 4$  explizit angeben. Wir beginnen mit dem einfachsten

Fall  $n \geq 4$ , der gemäß Tabelle 4.2 für die generisch benötigten  $n$  Invarianten maximal  $p = 2$  Ableitungen erfordert. Mit den Ausdrücken

$$\begin{aligned} q_{k_1 k_2} &:= \frac{\psi_{k_1 k_2}}{\psi_{k_1} \psi_{k_2}}, \\ \bar{q} &:= \frac{1}{n(n-1)} \sum_{k_1 \neq k_2} q_{k_1 k_2} \end{aligned} \quad (4.15)$$

erhalten wir

$$I_{k_1 k_2} = \Xi_{k_1 k_2} = \frac{q_{k_1 k_2} - \bar{q}}{q_{12} - \bar{q}}, \quad (4.16)$$

wenn wir  $\Xi_{12} = 1$  normieren. Die ersten Ableitungen  $I_j = \Xi_j$  sind sämtlich bereits durch die Normalform-Bedingungen (4.11) fixiert.

Im Fall  $n = 3$  verbleibt gemäß Tabelle 4.2 im wesentlichen nur eine einzige unabhängige Invariante der Ordnung  $p = 2$ , etwa mit der Normierung  $k_0 = (1, 0, 1)$  der Term

$$I_{12} := \Xi_{12} = \frac{2\psi_3\psi_{12} - \psi_1\psi_{23} - \psi_2\psi_{13}}{2\psi_2\psi_{13} - \psi_1\psi_{23} - \psi_3\psi_{12}}. \quad (4.17)$$

In dritter Ableitungsordnung  $p = 3$  ergeben sich drei weitere Terme, und zwar beliebige Quotienten je zweier der vier Ausdrücke

$$\begin{aligned} \tilde{\Xi} &:= \frac{1}{\psi_1^3 \psi_2^3 \psi_3^3} \sum_{\text{perm}} \left( 3\psi_1^2 \psi_2^2 \psi_3^2 \psi_{123} - \psi_1 \psi_2 \psi_3 (\psi_1^2 \psi_2^2 + 2\psi_1 \psi_2 \psi_{13} \psi_{23}) \right. \\ &\quad \left. - 3\psi_1^3 \psi_2^2 (\psi_3 \psi_{233} - \psi_{23} \psi_{33}) \right), \end{aligned} \quad (4.18)$$

$$\tilde{\Xi}_{12} := \frac{1}{\psi_1^3 \psi_2^3} \left( \psi_1^2 \psi_{12} \psi_{22} + \psi_1 \psi_2^2 \psi_{122} - \{12\} \right). \quad (4.19)$$

Dabei wird in (4.18) über alle Permutationen der Indices  $\{1, 2, 3\}$  summiert. In (4.19) bezeichnet  $\{12\}$  die vorangehende Summe mit vertauschten Indices  $1 \leftrightarrow 2$ . Durch zyklische Permutationen  $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 1$  der Indices liefert (4.19) tatsächlich drei verschiedene Ausdrücke. Projektiv verbleiben also als Quotienten die weiteren drei Invarianten

$$I_{j,j+1} = \tilde{\Xi}_{j,j+1} / \tilde{\Xi} \quad (4.20)$$

dritter Ordnung.

Im Fall  $n = 2$  erhalten wir schließlich je eine Invariante der Ableitungs-Ordnung  $p = 3$  und  $p = 4$ . Analog zu obiger Notation ergeben sich

$$\tilde{\Xi}_{12}^{(3)} := \frac{1}{\psi_1^3 \psi_2^3} \left( \psi_1^2 (\psi_{12} \psi_{22} - \psi_2 \psi_{122} - \{12\}) \right). \quad (4.21)$$

für  $p = 3$  sowie

$$\tilde{\Xi}_{12}^{(4)} := \frac{1}{\psi_1^5 \psi_2^5} \left( \psi_1^4 (-3\psi_{12} \psi_{22}^2 + \psi_2 (\psi_{12} \psi_{222} + 3\psi_{22} \psi_{122}) - \psi_2^2 \psi_{1222}) - \{12\} \right), \quad (4.22)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\Xi} := \frac{1}{\psi_1^5 \psi_2^5} & \left( -3\psi_1^4 \psi_{12} \psi_{22}^2 + \psi_1^3 \psi_2 (3\psi_1 \psi_{22} \psi_{122} + \psi_1 \psi_{12} \psi_{222} + 2\psi_{12}^2 \psi_{22}) \right. \\ & \left. + \psi_1^2 \psi_2^2 (\psi_{11} \psi_{22} + \psi_{1222} - 2\psi_1 \psi_{22} \psi_{112} - 2\psi_1 \psi_{12} \psi_{122}) + \{12\} \right) \end{aligned} \quad (4.23)$$

für  $p = 4$ . Die Normierung  $\Xi_{k_0} = 1$  muss ebenfalls von vierter Ordnung gewählt werden. Mit  $k_0 = (2, 2)$  ergeben sich projektiv die einzigen beiden Invarianten der Ableitungsordnung  $p \leq 4$ :

$$I^{(3)} = \tilde{\Xi}_{12}^{(3)} / \tilde{\Xi}, \quad I^{(4)} = \tilde{\Xi}_{12}^{(4)} / \tilde{\Xi}. \quad (4.24)$$

Unter generischen Bedingungen an  $\psi$  sind damit wieder die Black-Boxes  $u_1, u_2$  lokal eindeutig bestimmt, und schließlich durch Einsetzen auch die einzig verbleibende Black-Box  $w$ . Damit ist per Rekursion aus Abschnitt 4.1 unsere Identifikation aller skalaren Hybridmodelle mit Baumstruktur abgeschlossen.

### 4.3 Lokale Normalform vektorieller Baumstrukturen

Wir wollen die für skalare Baumstrukturen bereits entwickelte Normalformenmethode, Abschnitt 4.2, auf vektorwertige Bäume ausdehnen. Aus technischen Gründen müssen wir dabei jedoch einschränkend annehmen, dass alle Black-Boxes zwischen Räumen gleicher Dimension wirken. Nur dann können wir die Black-Box-*Diffeomorphismen* als Gruppenaktion auf den Input-Output Relationen der Hybridmodelle interpretieren. Im Falle des Black-White-Black-Baumes

$$\begin{aligned} h(x_1, \dots, x_n) &= u_0(\psi(u_1(x_1), \dots, u_n(x_n))), \\ x_i \in \mathbb{R}^{m_i}, u_i : \mathbb{R}^{m_i} &\rightarrow \mathbb{R}^{m_i}, \quad \psi : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^{m_0}, \quad m = m_1 + \dots + m_n, \end{aligned} \quad (4.25)$$

siehe Abb. 4.1, müssen notwendig  $\psi$  und  $h$  auf dem selben Gruppenorbit liegen — sofern die Modellierung des Hybridmodells korrekt war. Gelingt es nun, eine allgemeine Normalform anzugeben, d.h. einen eindeutigen Vertreter  $\Xi(x_1, \dots, x_n)$  jedes Gruppenorbits zu bestimmen, liefern die Transformationen von  $h$  und  $\psi$  auf die gemeinsame Normalform  $\Xi$  genau die Bestimmungsgleichungen der gesuchten Black-Box-Funktionen  $u_i$ .

Um die gegenüber dem skalaren Fall auftretenden Schwierigkeiten zu erläutern, beginnen wir zunächst mit zwei einfachen Beispielen. Der allereinfachste Fall einer nicht-skalaren Struktur ist gegeben durch  $n = 2, m_1 = 2, m_2 = 1, m_0 = 1, u_0 = \text{id}$ ,

$$h(x_{1,1}, x_{1,2}, x_2) = \psi(u_{1,1}(x_{1,1}, x_{1,2}), u_{1,2}(x_{1,1}, x_{1,2}), u_2(x_2)), \quad (4.26)$$

mit  $x_1 = (x_{1,1}, x_{1,2}) \in \mathbb{R}^2, x_2 \in \mathbb{R}$ , siehe Abb. 4.2.

Für die folgenden lokalen Betrachtungen wählen wir ohne Einschränkung  $h(0) = 0, \psi(0) = 0$  und beschränken die Black-Box-Transformationen auf lokale Diffeomorphismen mit  $u_i(0) = 0$ .

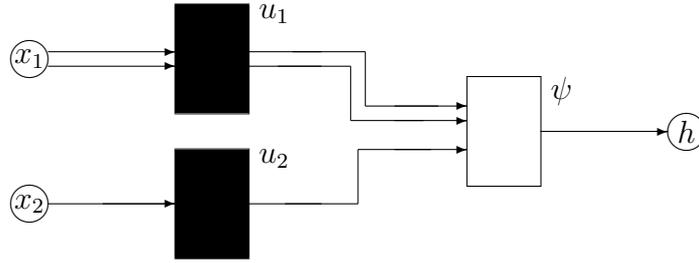


Abbildung 4.2: Einfachster vektorwertiger Black-White-Baum. Alle Kanten entsprechen skalaren Inputs bzw. Outputs.

Als Normalform können wir dann all jene Funktionen  $\Xi(x_1, x_2) : \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  definieren, für die gilt:

$$\begin{aligned} (i_1) \quad \Xi(x_1, 0) &= x_{1,1}, \\ (i_2) \quad \partial_{x_2} \Xi(x_1, 0) &= x_{1,2}, \\ (ii) \quad \Xi(0, x_2) &= x_2. \end{aligned} \tag{4.27}$$

Dabei entsprechen die Bedingungen  $(i_1, ii)$  den bereits im skalaren Fall verwendeten. Bedingung  $(i_2)$  ist der Vektorwertigkeit geschuldet. Die Diskrepanz  $m_1 > m_0$  der Dimensionen von Input und Output erfordert notwendig die Festlegung von Termen höherer Ordnung in der Normalform.

**Lemma 4.3** Die Funktion  $\psi : \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  mit  $\psi(0) = 0$  genüge in  $u = 0$  den Nichtausartungsbedingungen

$$\begin{aligned} (i) \quad \det \left( \partial_{u_1} \begin{pmatrix} \psi(u_1, u_2) \\ \partial_{u_2} \psi(u_1, u_2) \end{pmatrix} \right) \Big|_{u=0} &\neq 0, \\ (ii) \quad \partial_{u_2} \psi(u_1, u_2) \Big|_{u=0} &\neq 0. \end{aligned} \tag{4.28}$$

Dann existieren lokale Diffeomorphismen  $u_1 : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$  und  $u_2 : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ , so dass

$$\psi(u_1(x_1), u_2(x_2)) = \Xi(x_1, x_2) \tag{4.29}$$

gilt, wobei die Normalform  $\Xi$  den Bedingungen (4.27) genügt. Mit den Normalisierungen

$$u_k(0) = 0, \quad k = 1, 2 \tag{4.30}$$

sind die Transformationen und damit auch ihre Jets eindeutig.

**Beweis.** Zur Vereinfachung der Schreibweise definieren wir folgenden Inklusionsabbildungen für die Einsetzung des  $i$ -ten Arguments:

$$\begin{aligned} j_1(x_1) &:= (x_1, 0), \\ j_2(x_2) &:= (0, x_2). \end{aligned} \tag{4.31}$$

Einsetzen von (4.27)(ii) in (4.29) ergibt nun unter Ausnutzung der Normalisierung (4.30)

$$(\psi \circ j_2)(u_2(x_2)) = \psi(0, u_2(x_2)) = \psi(u_1(0), u_2(x_2)) = \Xi(0, x_2) = x_2.$$

Dies ist genau dann erfüllt, wenn wir

$$u_2 = (\psi \circ j_2)^{-1} \quad (4.32)$$

wählen. Dabei sichert die Nichtausartungsbedingung (4.28)(ii) gerade die lokale Umkehrbarkeit von  $(\psi \circ j_2)$  und damit die Existenz von  $u_2$ . Außerdem erhalten wir

$$u_2'(0) = (\partial_{u_2}\psi(0))^{-1} \neq 0. \quad (4.33)$$

Nun können wir  $u_1$  durch (4.27)(i) und (4.29) bestimmen:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \psi \circ j_1 \\ (\partial_{u_2}\psi \cdot u_2'(0)) \circ j_1 \end{pmatrix} (u_1(x_1)) &= \begin{pmatrix} \psi(u_1(x_1), 0) \\ \partial_{u_2}\psi(u_1(x_1), 0) \cdot u_2'(0) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \psi(u_1(x_1), u_2(0)) \\ \frac{d}{dx_2}\psi(u_1(x_1), u_2(x_2))|_{x_2=0} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \Xi(x_1, 0) \\ \partial_{x_2}\Xi(x_1, 0) \end{pmatrix} \\ &= x_1. \end{aligned}$$

Erneut erhalten wir die eindeutige Auflösung

$$u_1 = \begin{pmatrix} \psi \circ j_1 \\ (\partial_{u_2}\psi \cdot u_2'(0)) \circ j_1 \end{pmatrix}^{-1}. \quad (4.34)$$

Die Nichtausartungsbedingung (4.28)(i) sichert diesmal die Regularität der Linearisierung und damit die lokale Umkehrbarkeit von  $(\psi \circ j_1, \partial_{u_2}\psi \circ j_1)$ . Der skalare Faktor  $u_2'(0)$  ist ungleich Null nach (4.33) und beeinflusst die Regularität deshalb nicht.

Die Festlegungen (4.34, 4.32) definieren somit die eindeutigen Transformationen auf die geforderte Normalform.  $\boxtimes$

Die nach diesem Lemma existierende Normalform hat die Gestalt

$$\Xi(x_{1,1}, x_{1,2}, x_2) = x_{1,1} + x_2 + x_{1,2}x_2 + x_{1,1}x_2^2\tilde{\Xi}_1 + x_{1,2}x_2^2\tilde{\Xi}_2 \quad (4.35)$$

Als zur Identifikation zur Verfügung stehende freie Invarianten erhalten wir außer der (zu Beginn ohne Einschränkung auf Null normierten) Konstanten  $\Xi(0, 0)$  zwei Koeffizienten dritter Ordnung:

$$\partial_{x_{1,1}}\partial_{x_2}\partial_{x_2}\Xi, \partial_{x_{1,2}}\partial_{x_2}\partial_{x_2}\Xi.$$

Alle weiteren freien Invarianten haben mindestens die Ordnung 4. Da wir aber nur drei skalare Funktionen zu bestimmen haben, genügen die Bestimmungsgleichungen bis zur dritten Ordnung.

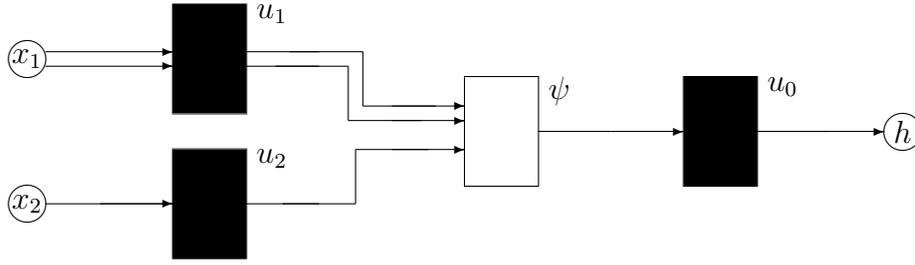


Abbildung 4.3: Einfacher vektorwertiger Black-White-Black-Baum. Alle Kanten entsprechen skalaren Inputs bzw. Outputs.

Als nächstes wollen wir noch den Output mit einer weiteren skalaren Black-Box modifizieren. Der entstehende Black-White-Black-Baum ist gekennzeichnet durch die Dimensionen  $n = 2$ ,  $m_1 = 2$ ,  $m_2 = 1$ ,  $m_0 = 1$ ,

$$h(x_{1,1}, x_{1,2}, x_2) = u_0\left(\psi(u_{1,1}(x_{1,1}, x_{1,2}), u_{1,2}(x_{1,1}, x_{1,2}), u_2(x_2))\right), \quad (4.36)$$

mit  $x_1 = (x_{1,1}, x_{1,2}) \in \mathbb{R}^2$ ,  $x_2 \in \mathbb{R}$ , siehe Abb. 4.3.

Wieder wählen wir ohne Einschränkung  $h(0) = 0$ ,  $\psi(0) = 0$  und beschränken die Black-Box-Transformationen auf lokale Diffeomorphismen mit  $u_i(0) = 0$ . Die zusätzliche (skalare) Black-Box kann wie im Fall eines rein skalaren Baumes durch eine weitere Normalformbedingung repräsentiert werden.

**Lemma 4.4** *Die Funktion  $\psi : \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  mit  $\psi(0) = 0$  genüge in  $u = 0$  den Nichtausartungsbedingungen (4.28) Dann existieren lokale Diffeomorphismen  $u_0 : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $u_1 : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$  und  $u_2 : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ , so dass*

$$u_0\left(\psi(u_1(x_1), u_2(x_2))\right) = \Xi(x_1, x_2) \quad (4.37)$$

gilt, wobei die Normalform  $\Xi$  den Bedingungen (4.27) und der zusätzlichen Einschränkung

$$\Xi(t, 0, t) = 2t \quad (4.38)$$

genügt. Mit den Normalisierungen

$$\begin{aligned} u_k(0) &= 0, & k &= 0, 1, 2 \\ u'_0(0) &= 1, \end{aligned} \quad (4.39)$$

sind die Jets der Transformationen eindeutig festgelegt.

**Beweis.** Genau wie in Lemma 4.3 sind  $u_1, u_2$  festgelegt durch

$$\begin{aligned} u_1 &= \left( \begin{array}{c} u_0 \circ \psi \circ j_1 \\ (u'_0(\psi(\cdot)) \partial_{u_2} \psi(\cdot) u'_2(0)) \circ j_1 \end{array} \right)^{-1}, \\ u_2 &= (u_0 \circ \psi \circ j_2)^{-1}. \end{aligned} \quad (4.40)$$

Zur Bestimmung von  $u_0$  betrachten wir die Abbildung  $\varphi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ ,

$$\varphi(t) = \psi \left( \left( \begin{array}{c} \psi \circ j_1 \\ \partial_{u_2} \psi \circ j_1 \end{array} \right)^{-1} \begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix}, (\psi \circ j_2)^{-1} t \right). \quad (4.41)$$

Die Linearisierung im Nullpunkt ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \varphi'(0) &= \begin{pmatrix} \partial_{u_{1,1}} \psi(0) & \partial_{u_{1,2}} \psi(0) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_{u_{1,1}} \psi(0) & \partial_{u_{1,2}} \psi(0) \\ \partial_{u_{1,1}} \partial_{u_2} \psi(0) & \partial_{u_{1,2}} \partial_{u_2} \psi(0) \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &\quad + \partial_{u_2} \psi(0) (\partial_{u_2} \psi(0))^{-1} \\ &= 2. \end{aligned} \quad (4.42)$$

Auf  $\varphi$  kann nun die Normalformbedingung (4.38) angewendet werden:

$$\varphi(t) = \psi(u_1(u_0(t), 0), u_2(u_0(t))) = u_0^{-1}(\Xi(u_0(t), 0, u_0(t))) = u_0^{-1}(2u_0(t)) \quad (4.43)$$

Zu beachten ist dabei, dass aufgrund von (4.40) gilt:

$$0 = \left( (u_0'(\psi(\cdot)) \partial_{u_2} \psi(\cdot) u_2'(0)) \circ j_1 \right) u_1(t, 0) = \left( (\partial_{u_2} \psi(\cdot)) \circ j_1 \right) u_1(t, 0). \quad (4.44)$$

Hier haben wir benutzt, dass  $u_0$  und  $u_2$  lokal Diffeomorphismen mit nicht-verschwindender Ableitung sind.

In Verbindung bedeuten (4.42) und (4.44) — wie im Fall skalarer Bäume —, dass  $u_0$  als Konjugation der Funktion  $\varphi$  und deren Linearisierung im Nullpunkt angesehen werden kann. Für Linearisierungen ungleich  $-1$ ,  $0$ ,  $+1$  existieren solche Konjugationen. Die Jet-Eindeutigkeit folgt wieder analog zum skalaren Fall aus Abschnitt 4.2 bzw. [FS03].  $\boxtimes$

Nun gelingt die Verallgemeinerung auf eine größere Zahl von Black-Boxes und auf Black-Boxes mit höherer Dimension. Allerdings wird weiterhin zumindest eine skalare Black-Box benötigt.

**Satz 4.5** *Die Funktion  $\psi : \mathbb{R}^{m_1} \times \dots \times \mathbb{R}^{m_n} \rightarrow \mathbb{R}$  mit  $\psi(0) = 0$  und  $m_n = 1$  genüge in  $u = 0$  den Nichtausartungsbedingungen*

$$\det \left( \partial_{u_k} \begin{pmatrix} \psi(u_1, \dots, u_n) \\ \partial_{u_n} \psi(u_1, \dots, u_n) \\ \vdots \\ \partial_{u_n}^{m_k-1} \psi(u_1, \dots, u_n) \end{pmatrix} \right) \Big|_{u=0} \neq 0, \quad 1 \leq k \leq n \quad (4.45)$$

Dann existieren lokale Diffeomorphismen  $u_k : \mathbb{R}^{m_k} \rightarrow \mathbb{R}^{m_k}$ ,  $0 \leq k \leq n$ ,  $m_0 = 1$ , so dass

$$u_0(\psi(u_1(x_1), \dots, u_n(x_n))) = \Xi(x_1, \dots, x_n) \quad (4.46)$$

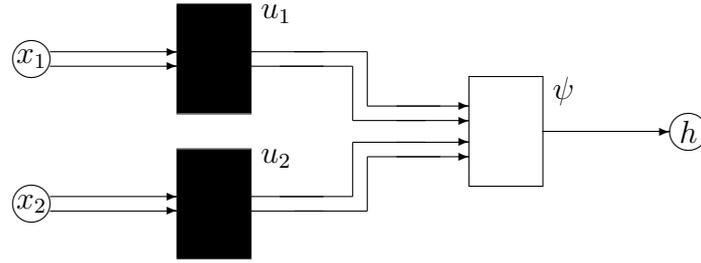


Abbildung 4.4: Einfachster vektorwertiger Black-White-Baum ohne skalare Black-Boxes. Alle Kanten entsprechen skalaren Inputs bzw. Outputs.

gilt, wobei die Normalform  $\Xi$  den Bedingungen

$$\begin{aligned}
 (0) \quad & \Xi(t \sum_{k=1}^n j_k(1, 0, \dots, 0)) = nt, \\
 (1) \quad & (\Xi \circ j_k)(x_k) = x_{k,1}, \quad 1 \leq k \leq n, \\
 (\ell) \quad & (\partial_{x_n}^{\ell-1} \Xi \circ j_k)(x_k) = x_{k,\ell}, \quad 1 \leq k \leq n-1, \quad 2 \leq \ell \leq k
 \end{aligned} \tag{4.47}$$

genügt. Mit den Normalisierungen

$$\begin{aligned}
 u_k(0) &= 0, & 0 \leq k \leq n \\
 u'_0(0) &= 1,
 \end{aligned} \tag{4.48}$$

sind die Jets der Transformationen eindeutig festgelegt, sofern  $n \geq 2$ .

**Beweis.** Der Beweis verläuft analog zu den Beweisen der Lemmata 4.3, 4.4. Als Bestimmungsgleichung für  $u_k$ ,  $1 \leq k \leq n-1$  erhalten wir zum Beispiel

$$u_k = \left( \begin{array}{c} u_0 \circ \psi \circ j_k \\ (u'_0(\psi(\cdot)) \partial_{u_n} \psi(\cdot) u'_n(0)) \circ j_k \\ \vdots \\ (u'_0(\psi(\cdot)) \partial_{u_n}^{m_k-1} \psi(\cdot) u'_n(0)^{m_k-1} + \dots) \circ j_k \end{array} \right)^{-1}. \tag{4.49}$$

Bei den höheren Ableitungen ist lediglich zu beachten, dass für die Regularität und damit die Auflösbarkeit von  $u_k$  nur die Terme mit den jeweils höchsten  $\psi$ -Ableitungen relevant sind. Die restlichen Terme sind linear abhängig von diesen.  $\boxtimes$

Die bisherigen Resultate forderten zumindest eine skalare Black-Box, deren einfache Transformation die restlichen Black-Boxes über die Richtungsableitung in diese skalare Komponente erschloss. Im weiteren wollen wir uns von dieser Forderung lösen. Dies ist nicht nur für Hybrid-Bäume ohne skalare Black-Boxes nötig, sondern auch im Fall von mehr als zwei Black-Boxes sinnvoll, da das ausschließliche Zurückgreifen auf die ausgezeichnete skalare Komponente die insgesamt zur Identifikation nötige Ableitungsordnung zusätzlich erhöht.

Die einfachste vektorielle Struktur ohne skalare Black-Boxes ist — erneut zunächst unter Verzicht auf die abschließende Black-Box  $u_0$  — gegeben durch  $n = 2$ ,  $m_1 = 2$ ,

$m_2 = 2$ ,  $m_0 = 1$ ,  $u_0 = \text{id}$ ,

$$h(x_1, x_2) = \psi(u_{1,1}(x_1), u_{1,2}(x_1), u_{2,1}(x_2), u_{2,2}(x_2)), \quad (4.50)$$

mit  $x_1 = (x_{1,1}, x_{1,2}) \in \mathbb{R}^2$ ,  $x_2 = (x_{2,1}, x_{2,2}) \in \mathbb{R}^2$ , siehe Abb. 4.4.

Als Normalformbedingen streben wir

$$\begin{aligned} (i_1) \quad \Xi(x_1, 0) &= x_{1,1}, \\ (i_2) \quad \partial_{x_{2,2}} \Xi(x_1, 0) &= x_{1,2}, \\ (ii_1) \quad \Xi(0, x_2) &= x_{2,1}, \\ (ii_2) \quad \partial_{x_{1,2}} \Xi(0, x_2) &= x_{2,2} \end{aligned} \quad (4.51)$$

an. Genau wie in (4.34) erhalten wir wieder

$$u_k = \left( \begin{array}{c} \psi \circ j_k \\ (\partial_{u_{\bar{k}}} \psi \cdot \partial_{x_{\bar{k},2}}(u_{\bar{k}})(0)) \circ j_k \end{array} \right)^{-1}, \quad k = 1, 2, \quad \bar{k} = 3 - k. \quad (4.52)$$

Allerdings sind beide Gleichungen nun gekoppelt. Die benötigten Ableitungen von  $u_1, u_2$  im Nullpunkt nach der jeweils zweiten Komponente ergeben sich jedoch aus den linearen Beziehungen

$$\partial_{x_{k,2}} u_k = \left( \begin{array}{c} \partial_{u_k} \psi(0) \\ \partial_{u_k} \partial_{u_{\bar{k}}} \psi(0) \partial_{x_{\bar{k},2}}(u_{\bar{k}})(0) \end{array} \right)^{-1}, \quad k = 1, 2. \quad (4.53)$$

Im Einzelnen gilt

$$\partial_{x_{k,2}} u_k = \frac{1}{(\partial_{u_k} \psi(0))^\perp (\partial_{u_k} \partial_{u_{\bar{k}}} \psi(0)) (\partial_{x_{\bar{k},2}} u_{\bar{k}}(0))} (\partial_{u_k} \psi(0))^\perp, \quad k = 1, 2. \quad (4.54)$$

Hierbei sind die orthogonalen Vektoren jeweils definiert als  $(a, b)^\perp = (-b, a)$  und Querstriche bedeuten wieder den jeweils komplementären Index,  $\bar{k} = 3 - k$ . Leider ist die Auflösung von (4.54) aufgrund der Symmetrie

$$\partial_{x_{2,2}} \partial_{x_{1,2}} = \partial_{x_{1,2}} \partial_{x_{2,2}}$$

nur bis auf einen eindimensionalen linearen Unterraum eindeutig, da die Gleichungen (4.54) lediglich auf drei statt der benötigten vier Bedingungen hinauslaufen. Wir erhalten

$$\begin{aligned} \partial_{x_{k,2}} u_k &= C_k (\partial_{u_k} \psi(0))^\perp, & k = 1, 2 \\ (C_1 C_2)^{-1} &= (\partial_{u_1} \psi(0))^\perp (\partial_{u_1} \partial_{u_2} \psi(0)) (\partial_{u_2} \psi(0))^\perp, \end{aligned} \quad (4.55)$$

mit reellen Konstanten  $C_1, C_2$ . Eine handhabbare Normalformbedingung, die die Eindeutigkeit der Transformation erreicht, ist bisher nicht gefunden, so dass die Herleitung der Normalform im allgemeinen Fall vektorwertiger Baumstrukturen noch nicht abschließend geklärt werden konnte.

#### 4.4 Eindeutige Identifikation vektorieller Baumstrukturen

Um allgemeine vektorielle Baumstrukturen zu betrachten, müssen wir uns vor allem von den in Abschnitt 4.3 aufgetretenen Dimensionseinschränkungen befreien. Zugleich werden wir überbestimmte Systeme zur Identifikation der Black-Boxes so angeben, dass auf Monotonievoraussetzungen verzichtet werden kann. Wir greifen dazu auf die Generizitätsmethode aus Kapitel 3 zurück; siehe Satz 3.1.

Zur Vorbereitung betrachten wir vektorielle Black-White-Black-Bäume aus Abb. 4.1 zunächst mit der zusätzlichen Vereinfachung, dass  $u_0 = \text{id}$  abwesend ist; siehe Abb. 4.5. Ziel ist also die Identifikation der Black-Boxes  $u = (u_1, \dots, u_n)$  im Black-White-Baum

$$h(x) = \psi(u(x)) = \psi(u_1(x_1), \dots, u_n(x_n)) \quad (4.56)$$

aus einer niedrig-dimensionalen Datenbasis der Inputs  $x_i \in \mathbb{R}^{m_i}$ ,  $x = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^m$  mit  $m = m_1 + \dots + m_n$ . Wir werden sehen, dass für  $u_i(x_i) \in \mathbb{R}^{m'_i}$  und eindimensionalem Output  $h \in \mathbb{R}$  eine Datenbasis der Dimension

$$\bar{m} := \max m_i \quad (4.57)$$

ausreicht. Als Voraussetzung wählen wir genauer simultan je  $\mu_i$  Werte für  $x_i \in \mathbb{R}^{m_i}$ , so dass insgesamt gilt

$$\mu_1 m'_1 + \dots + \mu_n m'_n < \mu_1 \cdot \dots \cdot \mu_n. \quad (4.58)$$

Wir erinnern zunächst an die Notation der Jet-Räume aus Kapitel 3. Sei  $u$  irgendeine glatte Funktion, etwa  $u : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^{m'}$ , und  $\mathcal{M} \subset \mathbb{R}^m$  eine endliche Teilmenge mit  $M = |\mathcal{M}|$  Elementen. Dann bezeichne

$$J_{\mathcal{M}} = J_{\mathcal{M}}^0[u] \quad (4.59)$$

den Raum der möglichen Funktionswerte  $u(x)$  auf  $x \in \mathcal{M}$ . Ableitungen werden also vorerst nicht einbezogen. Im vorliegenden Beispiel gilt dann

$$\dim J_{\mathcal{M}} = m' M, \quad (4.60)$$

siehe (3.2) mit  $N = 0$ . Wir verkürzen also den Funktionenraum der (stetigen)  $u$  zum endlich-dimensionalen Raum  $\mathbb{R}^{m' M}$ . Der Zusatz  $[u]$  in (4.59) erinnert lediglich an die Bezeichnung der Funktionen in  $J_{\mathcal{M}}$ ; eine mathematisch korrektere — aber weniger suggestive — Bezeichnung wäre

$$J_{\mathcal{M}} = J_{M, m'}. \quad (4.61)$$

In der Tat hängt  $J_{M, m'}$  nicht von der speziellen Wahl der Menge  $\mathcal{M}$  ab.

Zur Identifikation des Black-White-Baumes (4.56) aus Abb. 4.5 wählen wir speziell

$$\begin{aligned} \mathcal{M} &= \mathcal{M}_1 \times \dots \times \mathcal{M}_n, \\ \mathcal{M}_i &= \{x_i^1, \dots, x_i^{\mu_i}\} \subset \mathbb{R}^{m_i}, \end{aligned} \quad (4.62)$$

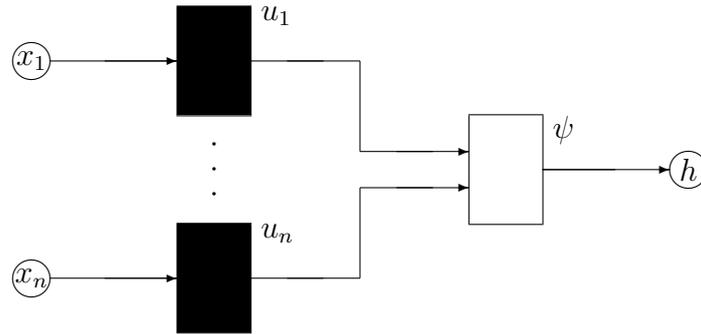


Abbildung 4.5: Allgemeiner Black-White-Baum.

so dass also  $M_i = |\mathcal{M}_i| = \mu_i$  und

$$M = M_1 \cdot \dots \cdot M_n = \mu_1 \cdot \dots \cdot \mu_n. \quad (4.63)$$

Für Black-Box-Funktionen  $u_i$ , die auf  $\mathcal{M}$  injektiv sind, wird dann die Menge  $\mathcal{M}' = u(\mathcal{M})$  der zugehörigen Black-Box-Outputs, also der  $\psi$ -Inputs, aus ebenfalls

$$|\mathcal{M}'| = |\mathcal{M}| \quad (4.64)$$

verschiedenen Elementen  $u(x_1^{j_1}, \dots, x_n^{j_n})$  bestehen,  $1 \leq j_i \leq \mu_i$ . Wir betrachten nun entsprechend dem Black-White-Graphen den Raum

$$J_{\mathcal{M}}[u] = J_{\mathcal{M}}[(u_1, \dots, u_n)] = J_{\mathcal{M}_1}[u_1] \times \dots \times J_{\mathcal{M}_n}[u_n] \quad (4.65)$$

für die Black-Boxes  $u$ . Der Raum  $J_{\mathcal{M}}[u]$  hat die Dimension

$$\dim J_{\mathcal{M}}[u] = \sum_i \dim J_{\mathcal{M}_i}[u_i] = \mu_1 m'_1 + \dots + \mu_n m'_n. \quad (4.66)$$

Für die White-Box  $\psi$  wählen wir den Raum  $C^1 = C^1[\psi]$  aller 1-mal stetig differenzierbaren Funktionen. Ganz analog zur Verkürzung der Black-Box-Funktionen  $u$  können wir  $C^1[\psi]$  zum Raum  $J_{\mathcal{M}'}[\psi]$  der  $\psi$ -Werte auf  $\mathcal{M}' = u(\mathcal{M})$  verkürzen. Wir können  $C^1[\psi]$  aber auch verkürzen zum endlich-dimensionalen Raum

$$J_{\mathcal{M}'}^1[\psi] = J_{M,1}^1 \quad (4.67)$$

der Paare  $(\psi(u), \psi_u(u))$  mit  $u \in \mathcal{M}'$ , also unter Einbeziehung der 1-ten Ableitung  $\psi_u$  von  $\psi$  nach  $u \in \mathbb{R}^{m'}$ . Dann gilt

$$\dim J_{\mathcal{M}'}^1[\psi] = (m' + 1)M, \quad (4.68)$$

vgl. (3.2) mit  $N = 1$ . Hier ist  $m' = m'_1 + \dots + m'_n$ . Wir betrachten schließlich die Abbildung

$$\begin{aligned} H : C[\psi] \times J_{\mathcal{M}}[u] &\rightarrow J_{\mathcal{M}}[h] \\ (\psi, u) &\mapsto \psi \circ u \end{aligned} \quad (4.69)$$

die durch Komposition (Verkettung) der Funktionen  $\psi$  und  $u$  gemäß (4.56) gegeben ist. Dabei ordnen wir  $\psi \circ u$  seine Verkürzung in  $J_{\mathcal{M}}[h]$  zu, wie oben beschrieben, die nicht von der ganzen Black-Box-Funktion  $u$  abhängt, sondern nur von ihrer Verkürzung in  $J_{\mathcal{M}}[u]$ .

Mit dieser Notation lautet das Identifikationsproblem (4.56) auf der diskreten Menge  $\mathcal{M}$  einfach

$$H(\psi, u) = h. \quad (4.70)$$

Diese Gleichung ist aufzufassen auf dem Raum  $(\psi, u) \in C^1[\psi] \times J_{\mathcal{M}}[u]$ , sowie auf  $h \in J_{\mathcal{M}}[h]$  der Dimension

$$\dim J_{\mathcal{M}}[h] = M = \dim J_{\mathcal{M}'}[\psi]. \quad (4.71)$$

Die behauptete generisch *eindeutige* Lösbarkeit der Gleichung  $H(\psi, u) = h$  folgt nun wie in Kapitel 3 skizziert aus dem Thomschen Transversalitätsatz (siehe [AR67]). Sei  $u = u^*$  die als *existent* vorausgesetzte Lösung. Der chemische Reaktor liefert jedenfalls eine solche Lösung. Dann gilt für jede weitere Lösung  $u$  sofort

$$R(\psi, u) := H(\psi, u) - H(\psi, u^*) = 0. \quad (4.72)$$

Dabei fassen wir  $R$  wie  $H$  als Abbildung auf,

$$R : C^1[\psi] \times J_{\mathcal{M}}[u] \rightarrow J_{\mathcal{M}}[h]. \quad (4.73)$$

Da wir uns  $u^*$  konstant gegeben denken, verkürzen wir hier im Vergleich zu (3.5)  $R = R(\psi, u, u^*)$  zu  $R(\psi, u)$ . Der Thomsche Transversalitätsatz folgert nun für genügend differenzierbare  $R$  aus der Surjektivität der totalen Ableitung  $D_{(\psi, u)}R$  die Surjektivität sogar der partiellen Ableitung

$$D_u R(\psi, u) \quad (4.74)$$

für generische, d.h. typische White-Box-Funktionen  $\psi$ , in jedem Lösungspunkt

$$R(\psi, u) = 0. \quad (4.75)$$

Die Surjektivität ist hier ein Spezialfall der allgemeinen Rang-Bedingung (3.7) aus Satz 3.1; wir erhalten einfach vollen Rang  $r = \dim J_{\mathcal{M}}[h] = M$ .

Wir wenden diesen Satz auf  $u \neq u^*$  wie folgt an. Die partielle Richtungsableitung

$$\varphi \mapsto D_{\psi} R \cdot \varphi = \varphi \circ u - \varphi \circ u^* \quad (4.76)$$

allein kann bereits surjektiv gewählt werden. Wir wählen nämlich zunächst  $\varphi \circ u \equiv 0$  auf  $\mathcal{M}$ . Wenn die  $u$ -Werte auf  $\mathcal{M}$  gänzlich verschieden von den entsprechenden Werten  $u^*$  sind, können wir  $\varphi$  auf  $u^*$  noch beliebig vorschreiben und so beliebige  $R$ -Variationen in  $J_{\mathcal{M}}[h]$  erzeugen.

Wir erhalten nun für  $u \neq u^*$  aus  $R(\psi, u) = 0$  einen Widerspruch, wenn die  $u$ -Variation in (4.74) allein zur Surjektivität nicht ausreicht. Das passiert schon aus Dimensionsgründen, wenn

$$\dim J_{\mathcal{M}}[u] < \dim J_{\mathcal{M}}[h]. \quad (4.77)$$

Weil  $r_u = \dim \text{Bild}(D_u R) \leq \dim J_{\mathcal{M}}[u]$  und  $r = \dim J_{\mathcal{M}}[h]$ , folgt aus (4.77) in der Tat die Rang-Bedingung (3.7) aus Satz 3.1.

Als hinreichende Bedingung für generische Eindeutigkeit der Black-Box-Lösung  $u^*$  ergibt sich also mit (4.60), (4.63), (4.66), (4.71) aus der Dimensionsbestimmung (3.2) die Rang-Bedingung

$$\mu_1 m'_1 + \dots + \mu_n m'_n < \mu_1 \cdot \dots \cdot \mu_n, \quad (4.78)$$

wie bereits in (4.58) angekündigt. Wir bemerken sofort, dass (4.78) nur erfüllt werden kann, wenn mindestens  $n \geq 2$  Black-Boxes vorliegen. Zusammenfassend gilt

**Satz 4.6** *Für die Anzahlen  $\mu_i = |\mathcal{M}_i|$  und die Dimensionen  $u_i \in \mathbb{R}^{m'_i}$  des allgemeinen vektoriellen Black-White-Baumes (4.56) gelte die Voraussetzung (4.78). Ferner sei die Referenzlösung  $u^*$  injektiv auf der endlichen Inputmenge  $\mathcal{M}$ .*

*Dann besitzt für generische White-Box-Funktionen  $\psi$  das Identifikationsproblem zu gegebenem  $h$  höchstens eine einzige Lösung  $u = u^*(x)$  auf Inputs  $x \in \mathcal{M} = \mathcal{M}_1 \times \dots \times \mathcal{M}_n \subset \mathbb{R}^m$  wie in (4.62).*

Wesentlich für die praktische Durchführung ist nur Bedingung (4.78). Wir stellen uns beispielsweise die Aufgabe, jede Black-Box  $u_i \in \mathbb{R}^{m'_i}$  auf einem  $m_i$ -dimensionalen Einheitswürfel ihrer Inputs  $x_i$  zu bestimmen. Wir rastern dazu den jeweiligen Würfel durch die Menge  $x_i \in \mathcal{M}_i$  mit Rasterweite  $\varepsilon$ . Es sind also mindestens etwa

$$\sum_i m'_i \varepsilon^{-m_i} \quad (4.79)$$

skalare Werte zu bestimmen. Unsere Datenbasis  $\mathcal{M} = \mathcal{M}^\varepsilon$  hat  $|\mathcal{M}^\varepsilon| = \mu_1^\varepsilon \cdot \dots \cdot \mu_n^\varepsilon$  Punkte. Wir bezeichnen daher

$$d_{\mathcal{M}} := \overline{\lim}_{\varepsilon \searrow 0} \frac{\log |\mathcal{M}^\varepsilon|}{\log 1/\varepsilon} = \overline{\lim}_{\varepsilon \searrow 0} \frac{\log \mu_1^\varepsilon + \dots + \log \mu_n^\varepsilon}{\log 1/\varepsilon} \quad (4.80)$$

als (asymptotische) *Dimension* unserer Input-Familie  $\mathcal{M} = \mathcal{M}^\varepsilon$ .

Um (4.78) erfüllen zu können, wählen wir etwa  $\mu_i = \varepsilon^{-m_i}$ , für ein beliebiges festes  $i$ . Für  $j \neq i$  wählen wir die übrigen  $\mu_j$  unabhängig von  $\varepsilon$  so, dass

$$\prod_{j \neq i} \mu_j > m'_i. \quad (4.81)$$

Insbesondere setzen wir voraus, dass  $n \geq 2$  Black-Boxes vorliegen. Eine konkrete Wahl wäre beispielsweise  $\mu_j := m'_{j+1} + 1$ , mit  $j + 1$  modulo  $n$  gezählt.

Mit dieser Wahl gilt (4.78) für genügend kleine Rasterweiten  $\varepsilon > 0$ . Als Dimension der resultierenden Datenbasis  $\mathcal{M}^{(i),\varepsilon}$  ergibt sich

$$d_{\mathcal{M}^{(i)}} = \overline{\lim}_{\varepsilon \searrow 0} \frac{1}{\log 1/\varepsilon} \left( \log \varepsilon^{-m_i} + \sum_{j \neq i} \log \mu_j \right) = m_i \quad (4.82)$$

Dadurch ist dann  $u_i = u_i^*$  auf dem  $\varepsilon$ -Raster  $\mathcal{M}_i^{(i),\varepsilon}$  eindeutig bestimmt. Verfahren wir sukzessive so, für alle  $i = 1, \dots, n$ , erhalten wir eine resultierende Datenbasis  $\mathcal{M}^\varepsilon = \bigcup_i \mathcal{M}^{(i),\varepsilon}$  der Dimension

$$d_{\mathcal{M}} = \max_i d_{\mathcal{M}^{(i)}} = \max_i m_i = \overline{m}. \quad (4.83)$$

Auch wenn nicht, wie hier zur Vereinfachung angenommen, achsenparallele  $\varepsilon$ -Raster  $\mathcal{M}^{(i),\varepsilon}$  vorliegen, ist unser Dimensionsbegriff gerechtfertigt. Wir schöpfen dann die Datenbasis dadurch aus, dass wir unsere achsenparallelen  $\varepsilon$ -Raster in Würfeln der Kantenlänge  $\delta$  entlang der Datenbasis platzieren, für kleines, aber  $\varepsilon$ -unabhängig gewähltes  $\delta > 0$ .

Ein analoges Resultat für Black-White-Black-Bäume dehnt — zusammen mit der allgemeinen rekursiven Reduktion auf diesen Fall aus Abschnitt 4.1 — erstmals das Resultat von Schuppert, [Sch00], auf vektorielle Black-Boxes aus. Der verbleibende Fall  $n = 1$  wird in Abschnitt 4.5 behandelt.

Wir beschließen deshalb dieses Kapitel mit einer kurzen Diskussion des allgemeinen Black-White-Black-Baumes

$$h(x) = u_0(\psi(u_1(x_1), \dots, u_n(x_n))), \quad (4.84)$$

dessen Identifikation uns nach [FS03] rekursiv alle vektoriellen Hybridmodelle mit Baumstruktur erschließt; siehe Abb. 4.1. Ohne Einschränkung ziehen wir uns auf skalarwertige  $h$  zurück: vektorielle  $h$  erleichtern die Identifikation nur, weil sie auf Black-Boxes  $u_i$  zurückgreifen, die für  $i = 1, \dots, n$  bereits aus einer einzigen skalaren Komponente von  $h$  bestimmbar sind. Mit  $u_0 : \mathbb{R}^{m_0} \rightarrow \mathbb{R}$  und  $\psi : \mathbb{R}^{m'} \rightarrow \mathbb{R}^{m_0}$  setzen wir in der Notation von Satz 4.6 voraus

$$(m' - m_0) \prod_{i=1}^n \mu_i > \sum_{i=1}^n \mu_i m'_i \cdot (1 + m_i). \quad (4.85)$$

Dabei sind wieder die Inputs  $x_i \in \mathcal{M}_i$  gewählt, also  $x \in \mathcal{M} = \mathcal{M}_1 \times \dots \times \mathcal{M}_n$  mit  $\mu_i := |\mathcal{M}_i|$  und  $|\mathcal{M}| = \mu_1 \cdot \dots \cdot \mu_n$ . Wieder sind mindestens  $n \geq 2$  Black-Boxes erforderlich. Die Identifikation des Black-White-Black-Baumes verlangt aber zusätzlich eine echte Dimensionsreduktion durch  $\psi : \mathbb{R}^{m'} \rightarrow \mathbb{R}^{m_0}$ , nämlich

$$m_0 < m'. \quad (4.86)$$

Analog zu Satz 4.6 gilt dann folgendes Resultat für den Black-White-Black-Baum.

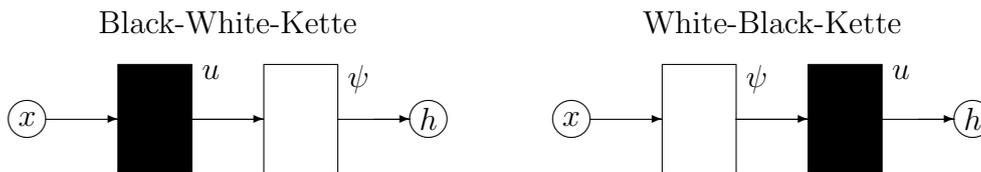


Abbildung 4.6: Unverzweigte vektorielle Ketten.

**Satz 4.7** Für die Referenzlösung  $u^*$  gelte Injektivität von  $u^* = (u_1^*, \dots, u_n^*)$  auf der Datenbasis  $\mathcal{M}$ . Die Werte von  $h = u_0^* \circ \psi \circ u^*$  seien sämtlich regulär auf  $\mathcal{M} = \mathcal{M}_1 \times \dots \times \mathcal{M}_n$ . Ferner gelte für die Anzahlen  $\mu_i = |\mathcal{M}_i|$  und die Dimensionen der Black-Box-Funktionen  $u_i : \mathbb{R}^{m_i} \rightarrow \mathbb{R}^{m'_i}$  und der White-Box-Funktion  $\psi : \mathbb{R}^{m'} \rightarrow \mathbb{R}^{m_0}$  die Einschränkung (4.85).

Dann besitzt für generische White-Box-Funktionen  $\psi$  das Identifikationsproblem des allgemeinen vektoriellen Black-White-Black-Baumes (4.84) zu gegebenem  $h$  nur die eindeutige Lösung  $u = u^*(x)$  auf Inputs  $x \in \mathcal{M} \subset \mathbb{R}^n$ . Monotonie-Voraussetzungen sind für die Gültigkeit des Satzes nicht erforderlich.

Der Beweis des Satzes beruht auf 1-Jet-Räumen  $J^1[h], J^1[\psi]$ , auf die wir im Kapitel 5 noch einmal näher eingehen. Die Notwendigkeit insbesondere der Dimensionseinschränkung (4.86) an die White-Box  $\psi$  wird im folgenden Abschnitt erläutert. Eine vollständige Darstellung, die auf Satz 3.1 beruht, würde den Rahmen dieser Zusammenfassung sprengen. Es lohnt aber anzumerken, dass die erforderliche Datenbasis  $\mathcal{M}^{(\varepsilon)}$  im Limes  $\varepsilon$ -gerasterter Mengen  $\mathcal{M}^i \subset \mathbb{R}^{m_i}$ , analog zur Argumentation in (4.79)–(4.83), wieder die von Schuppert [Sch00] vorausgesagte Dimension

$$d_{\mathcal{M}} = \bar{m} = \max_{0 \leq i \leq n} m_i$$

besitzt. In der Tat reicht diese Größenordnung mit  $i = 1, \dots, n$  aus, um Voraussetzung (4.86) zu gewährleisten. Die Identifikation von  $u_0$  kann anschließend durch Interpolation der  $u_i, i = 1, \dots, n$  und Wahl der Werte  $\psi(u(x))$  in einem  $\varepsilon$ -Raster eines Würfels in  $\mathbb{R}^{m_0}$  direkt erfolgen.

## 4.5 Partielle Identifikation unverzweigter Ketten

Die Resultate aus Abschnitt 4.4 zeigen, dass die eindeutige Identifikation von Black-Boxes  $u_i : \mathbb{R}^{m_i} \rightarrow \mathbb{R}^{m'_i}$  sogar dann möglich sein kann, wenn die Output-Dimension  $m'_i$  die Input-Dimension  $m_i$  übersteigt. Sowohl in Satz 4.6 als auch in Satz 4.7 waren dazu mindestens  $n \geq 2$  Black-Boxes erforderlich. Wenn unverzweigte Ketten aus Black- und White-Boxes auftreten, vgl. Abb. 4.6, ergeben sich zusätzliche Einschränkungen.

Wir betrachten zunächst den Fall  $n = 1$  einer vektoriellen Black-White-Kette

$$h(x) = \psi(u(x)). \quad (4.87)$$

Für  $u : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^{m'}$ ,  $\psi : \mathbb{R}^{m'} \rightarrow \mathbb{R}$  definieren dann reguläre Werte sowohl von  $\psi$  als auch von  $h = \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$  lokale Blätterungen des Urbildraumes  $\mathbb{R}^{m'}$  bzw.  $\mathbb{R}^m$  der Codimension 1. Die Black-Box  $u$  muss nur diese Blätterungen entsprechend gleicher Werte  $h = \psi := \lambda$  aufeinander abbilden, um als Lösung des SHM (4.87) zu gelten. Dabei indiziert  $\lambda \in \mathbb{R}$  die Blätter. In geeigneten lokalen Koordinaten ist also  $u$  einer beliebigen Familie von Abbildungen

$$v^\lambda : \mathbb{R}^{m-1} \rightarrow \mathbb{R}^{m'-1}$$

mit eindimensionalem Parameter  $\lambda \in \mathbb{R}$  äquivalent. Sobald  $m \geq 2$  oder  $m' \geq 2$ , ergeben sich so unendlich viele Freiheitsgrade für interne Kalibrierungen, die selbst durch vollständige Kenntnis der globalen Input-Output-Relation  $h$  nicht aufzulösen sind. Nur indem wir willkürlich beispielsweise für  $v^\lambda$  eine  $\lambda$ -unabhängige kanonische Projektion (im Fall  $m \geq m'$ ) oder Einbettung (im Fall  $m \leq m'$ ) wählen, lässt sich Eindeutigkeit erzwingen. Keinesfalls ändern diese Maßnahmen jedoch die globale Input-Output-Relation  $h$ .

Wir wenden uns nun dem Fall einer vektoriellen White-Black-Kette

$$h(x) = u(\psi(x)) \tag{4.88}$$

zu, der uns bereits in Satz 4.7 als Teil des allgemeinen vektoriellen Black-White-Black-Baumes begegnet ist. Wir benutzen wie dort die Notation  $\psi : \mathbb{R}^{m'} \rightarrow \mathbb{R}^{m_0}$  und  $u : \mathbb{R}^{m_0} \rightarrow \mathbb{R}$ . Falls  $m' \geq m_0$ , wenn also  $\psi$  die Dimension des Inputs  $x \in \mathbb{R}^{m'}$  nicht künstlich erhöht, können wir in regulären  $\psi$ -Werten ohne weiteres die Daten  $x$  lokal auf Mannigfaltigkeiten  $\mathcal{M}' \subseteq \mathbb{R}^{m'}$  der Dimension  $m_0$  einschränken, auf denen  $\psi$  diffeomorph operiert. Dann gilt einfach eindeutig

$$u = h \circ \psi^{-1} \tag{4.89}$$

auf den offenen Teilen  $\psi(\mathcal{M}')$  des  $\mathbb{R}^{m_0}$ .

Falls jedoch  $m' < m_0$ , wenn also  $\psi$  die Dimension des Inputs  $x \in \mathbb{R}^{m'}$  künstlich aufbläht, lässt sich die Forderung nach einer mindestens  $m_0$ -dimensionalen Datenbasis für die Black-Box  $u$  schlechterdings nicht realisieren. Die Black-Box  $u$  ist dann nur auf dem Bild von  $\psi$ , typischerweise also auf Varietäten der Codimension  $m_0 - m' \geq 1$ , bestimmt. Dort ist sie wieder eindeutig durch (4.89) gegeben. Außerhalb kann  $u$  beliebig gewählt werden — bleibt also völlig unbestimmt — wieder zunächst ohne sichtbare Auswirkung auf  $h$ . Dieser Fall ist besonders dann bedenklich, wenn sich beispielsweise durch Alterungsprozesse, Verunreinigungen oder auch nur kurzzeitige Betriebsstörungen die „White-Box“  $\psi$  ändert und das Gesamtsystem via  $u$  in unbekannte und auch den extrapolationsfreundigen SHM-Methoden prinzipiell nicht aus dem normalen Betrieb zugängliche Bereiche verschiebt. Zuverlässige Vorhersagen für die globale Input-Output Relation  $h$  sind dann nicht möglich.

## 5 Vorwärts verzweigte Hybridstrukturen

Wir betrachten nun allgemeine Hybridmodelle mit beliebig vorwärts verzweigter Struktur:

$$h = H(\psi, u) \quad (5.1)$$

Dabei bedeutet  $u = (u_i)_{i \in B}$  wie in Kapitel 3 eine Aufzählung aller vektoriellen Black-Box-Funktionen  $u_i$  im SHM, und  $\psi = (\psi_j)_{j \in W}$  die entsprechende White-Box-Aufzählung. Der Operator  $H$  beschreibt die hybride Komposition der Black- und White-Box-Funktionen, so wie sie das SHM vorgibt. Ohne auf die wesentlich mathematische Problematik der genauen Räume für  $u$ ,  $\psi$  und  $h$  sowie deren Differenzierbarkeitsstufen weiter einzugehen, halten wir vorab fest, dass wir uns  $u$  und  $h$  in einem endlich-dimensionalen Raum  $J^N$  denken, der analog zu den Räumen  $J = J^0$  und  $J^1$  aus (4.65)–(4.68) gebildet wird und  $N$ -Jets, also bis zu  $N$ -te Ableitungen, der  $u$ ,  $\psi$  und  $h$  auf geeigneten endlichen Datensätzen einbezieht.

### 5.1 Kalibrierung

Zu Beginn unserer Diskussion betrachten wir noch einmal die in Abschnitt 1.1 beschriebenen Kalibrierungen und ziehen eine Folgerung für die Bilder der partiellen Ableitungen  $R_\psi$  und  $R_u$  der analog zu unseren Transversalitäts- und Eindeutigkeitsbetrachtungen in Kapitel 3 und Abschnitt 4.4 gebildeten Funktion

$$R(\psi, u, u^*) := H(\psi, u) - H(\psi, u^*), \quad (5.2)$$

vgl. (3.5).

**Korollar 5.1** *Sei  $u^t = u^t(\psi, u^0)$  eine Kalibrierung von  $H$  im Sinne von (1.2), (1.4). Dann gilt für alle  $\psi, u^0, t$  und in jedem Punkt  $(\psi, u, u^*) = (\psi, u^t(\psi, u^0), u^0)$*

$$\text{Bild}(R_\psi) \subseteq \text{Bild}(R_u) \quad (5.3)$$

für die Bilder der partiellen Ableitungen  $R_\psi, R_u$ .

**Beweis.** Wir bemerken zunächst, dass aus (1.4)(iii) durch Integration nach  $t$  folgt

$$R(\psi, u^t(\psi, u^0), u^0) = H(\psi, u^t(\psi, u^0)) - H(\psi, u^0) = 0. \quad (5.4)$$

Differenzieren wir (5.4) nach  $\psi$  in Richtung  $\varphi$ , so erhalten wir

$$R_\psi \cdot \varphi + R_u \cdot (u_\psi^t \cdot \varphi) = 0, \quad (5.5)$$

für jedes  $\varphi$ . Damit ist auch (5.3) bewiesen. ✕

## 5.2 Eindeutige Identifikation

Um Black-Boxes  $u$  in verzweigten Strukturen zu identifizieren, schreiben wir wie in Kapitel 3 das SHM in der Form

$$h = H(\psi, u). \quad (5.6)$$

Mit einer gegebenen Referenzlösung  $h = H(\psi, u^*)$  formulieren wir wie in (3.5), (4.72), (5.2) das Eindeutigkeitsproblem mit Hilfe der Funktion

$$R(\psi, u, u^*) = H(\psi, u) - H(\psi, u^*) \quad (5.7)$$

als Eindeutigkeit der „trivialen“ Nullstelle  $u = u^*$  von  $R$ . Wenn wir uns  $u^*$  als fest denken, schreiben wir wieder verkürzt  $R(\psi, u)$  statt  $R(\psi, u, u^*)$ .

Wir betrachten  $\psi$ ,  $h$  und  $u$  in linearen Räumen  $J[\psi]$ ,  $J[h]$  bzw.  $J[u]$ , typischerweise endlich-dimensionalen Jet-Räumen  $J^N$  über endlichen Mengen. Wir haben dann (verkürzt)

$$H, R : J = J[\psi] \times J[u] \longrightarrow J[h]. \quad (5.8)$$

Für die endlichen Dimensionen der Bilder der partiellen Ableitungen  $R_\psi$ ,  $R_u$ , also deren Rang, benutzen wir wie in Satz 3.1 die Notation

$$\begin{aligned} r_u &:= \dim \text{Bild}(R_u(\psi, u)), \\ r_\psi &:= \dim \text{Bild}(R_\psi(\psi, u)), \\ r &:= \dim \text{Bild}(D_{(\psi, u)}R(\psi, u)). \end{aligned} \quad (5.9)$$

Diese Dimensionen hängen noch von  $(\psi, u)$  ab. In Satz 3.1 haben wir die Rang-Bedingung

$$r > \max_{(\psi, u)} r_u \quad (5.10)$$

gestellt. Dann war die Lösung  $u = u_*$  des SHM (5.6) für eine generische Menge von  $\psi$  eindeutig bestimmt.

Wir bemerken insbesondere, wie angekündigt, dass Kalibrierungen die Rang-Voraussetzung (5.10) verletzen. Insbesondere gilt dann nach Korollar 5.1 in  $u = u(\psi, u^*; t)$  die Rang-Beziehung

$$r_\psi \leq r_u = r. \quad (5.11)$$

Im weiteren Verlauf des Kapitels skizzieren wir die Umsetzung des Satzes für die maximal vorwärts verzweigte Struktur

$$h(x_1, x_2, x_3) = \psi(u_1(x_2, x_3), u_2(x_1, x_3), u_3(x_1, x_2)) \quad (5.12)$$

aus Abb. 5.1, mit  $x_i \in \mathbb{R}^{m_i}$ ,  $u_i \in \mathbb{R}^{m'_i}$  und  $h, \psi \in \mathbb{R}$ . Wenn wir vollständig analog zu Abschnitt 4.4, (4.59)–(4.77) und Satz 4.6, vorgehen, lautet die zu (4.78) analoge Bedingung für eindeutige Identifizierbarkeit

$$m'_1\mu_2\mu_3 + m'_2\mu_1\mu_3 + m'_3\mu_1\mu_2 < \mu_1\mu_2\mu_3 \quad (5.13)$$

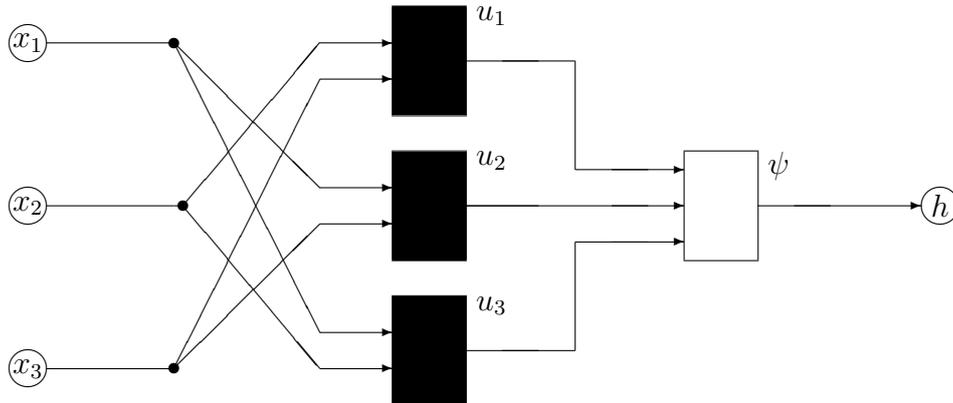


Abbildung 5.1: Maximal vorwärts verzweigte Struktur mit 3 Inputs. Alle Kanten des Strukturgraphen bedeuten skalare Inputs bzw. Outputs.

auf einer kartesischen Input-Menge  $x_i \in \mathcal{M}_i$  mit  $\mu_i := |\mathcal{M}_i|$ . Mit Blick auf unsere Rang-Bedingung (5.10) erkennen wir die linke Seite von (5.13) tatsächlich als Rang  $r_u$  der partiellen Ableitung nach  $u$ . Die rechte Seite ist wieder  $r_\psi$ . Zusammen folgt also aus Bedingung (5.13)

$$r \geq r_\psi > r_u \quad (5.14)$$

mit (durch injektives  $u^*|_{\mathcal{M}}$  bedingt) konstantem Rang  $r_\psi$ . Satz 3.1 liefert dann die Eindeutigkeit aller Black-Boxes  $u$ , für generisches  $\psi$ .

Wie groß ist diesmal die Dimension der erforderlichen  $\varepsilon$ -gerasterten Datenbasis  $\mathcal{M}^{(i),\varepsilon}$ ? Entsprechend unserer Diskussion in (4.79)–(4.83) wählen wir etwa für  $i = 1$ , also zur Identifikation von  $u_1$ , die  $\varepsilon$ -Raster  $\mu_2 = \varepsilon^{-m_2}$  und  $\mu_3 = \varepsilon^{-m_3}$ . Den übrigen freien Wert  $\mu_1$  wählen wir, so dass

$$\mu_1 > m'_1. \quad (5.15)$$

Dann gilt offensichtlich Bedingung (5.13) für alle genügend kleinen  $\varepsilon > 0$ , und  $u_1$  ist auf seinen  $\varepsilon$ -Raster eindeutig identifiziert. Ähnlich liefert

$$\begin{aligned} \mu_j &= \varepsilon^{-m_j}, & \text{für } j \neq i, & \text{ und} \\ \mu_i &= m'_i + 1 \end{aligned} \quad (5.16)$$

die eindeutige Identifizierbarkeit der anderen Black-Boxes  $u_i$ . Als Dimension der Datenbasis  $\mathcal{M}^{(i)}$  erhalten wir so aus (4.82)

$$\begin{aligned} d_{\mathcal{M}^{(i)}} &= \overline{\lim}_{\varepsilon \searrow 0} \frac{1}{\log 1/\varepsilon} \left( \log \mu_i + \sum_{j \neq i} \log \mu_j \right) \\ &= \sum_{j \neq i} m_j \end{aligned} \quad (5.17)$$

Zur Bestimmung aller Black-Boxes  $u_i$  aus der Datenbasis  $\mathcal{M} = \cup_i \mathcal{M}^{(i)}$  ist also die Di-

mension

$$d_{\mathcal{M}} = \left( \sum_{i=1}^n m_i \right) - \min_i m_i = \max_i \sum_{j \neq i} m_j \quad (5.18)$$

erforderlich. Dies ist wieder die maximale Anzahl der skalaren Input-Variablen einer einzigen Black-Box  $u_i$ .

Der allgemeinere Fall

$$h = \psi(u_1, \dots, u_n) \quad (5.19)$$

mit Black-Boxes  $u_i$  die nur von  $x_i$  nicht abhängen, d.h.  $\partial_{x_i} u_i \equiv 0$ , verläuft völlig analog. Wir ersetzen die Identifizierbarkeitsbedingung (5.13) durch

$$\sum_{i=1}^n m'_i / \mu_i < 1 \quad (5.20)$$

und sehen, dass (5.16)–(5.18) verbatim gültig bleiben. Ganz analog können minder verstränkte Fälle behandelt werden. Als Nenner im  $i$ -ten Summanden  $m'_i / \dots$  tritt dann das Produkt genau der  $\mu_j$  auf, von deren Input-Variable  $x_j$  die Black-Box  $u_i$  nicht abhängt. In all diesen Fällen bestätigt sich der Schuppertsche Satz [Sch00].

### 5.3 Beispiel: Kolmogorov-Netzwerk

Reine Summen oder Produkte taugen nicht als generische White-Boxes, weil sie nichttriviale Skalierungen zulassen, siehe Abschnitt 1.1. Unbeschadet dieser Schwierigkeit wollen wir in diesem Abschnitt die generische Eindeutigkeit des universellen Kolmogorov-Netzwerks

$$h = \sum_{j=1}^{2n+1} v_j \left( \sum_{i=1}^n u_{j,i}(x_i) \right) \quad (5.21)$$

nachweisen, wenn die Summen durch generische nichtlineare White-Boxes ersetzt werden. Die notorische Schwierigkeit dieses Beispiels liegt darin begründet, dass alle *stetigen* globalen Input-Output Relationen  $h$  mit  $n$  Inputs  $x_1, \dots, x_n$  durch geeignete *stetige* Black-Boxes  $v_i, u_{i,j}$  realisiert werden können, die sogar nur skalar sind. Unsere Identifikation benutzt in diesem Fall zwar teils prohibitiv hohe Ableitungen, kommt aber dann, in krassem Kontrast zu Kolmogorov's Resultat, mit nur 1-dimensionalen Datenbasen für die Inputs aus.

Betrachten wir also Kolmogorov's Beispiel (5.21) in der allgemeineren Form

$$h(x_1, \dots, x_n) = \psi_0 \left( \left( v_j \left( \psi_j \left( (u_{j,i}(x_i))_{1 \leq i \leq n} \right) \right) \right)_{1 \leq j \leq n'} \right), \quad (5.22)$$

vgl. Abb. 5.2. Wir betrachten dabei  $n' \geq n$ ; Kolmogorov hat speziell  $n' = 2n + 1$  gewählt. Um rein notationelle Komplikationen zu vermeiden, betrachten wir nur skalare Black- bzw. White-Boxes  $u_{j,i}, v_j$  bzw.  $\psi_0, \psi_j$  sowie skalare Inputs  $x_i$ .

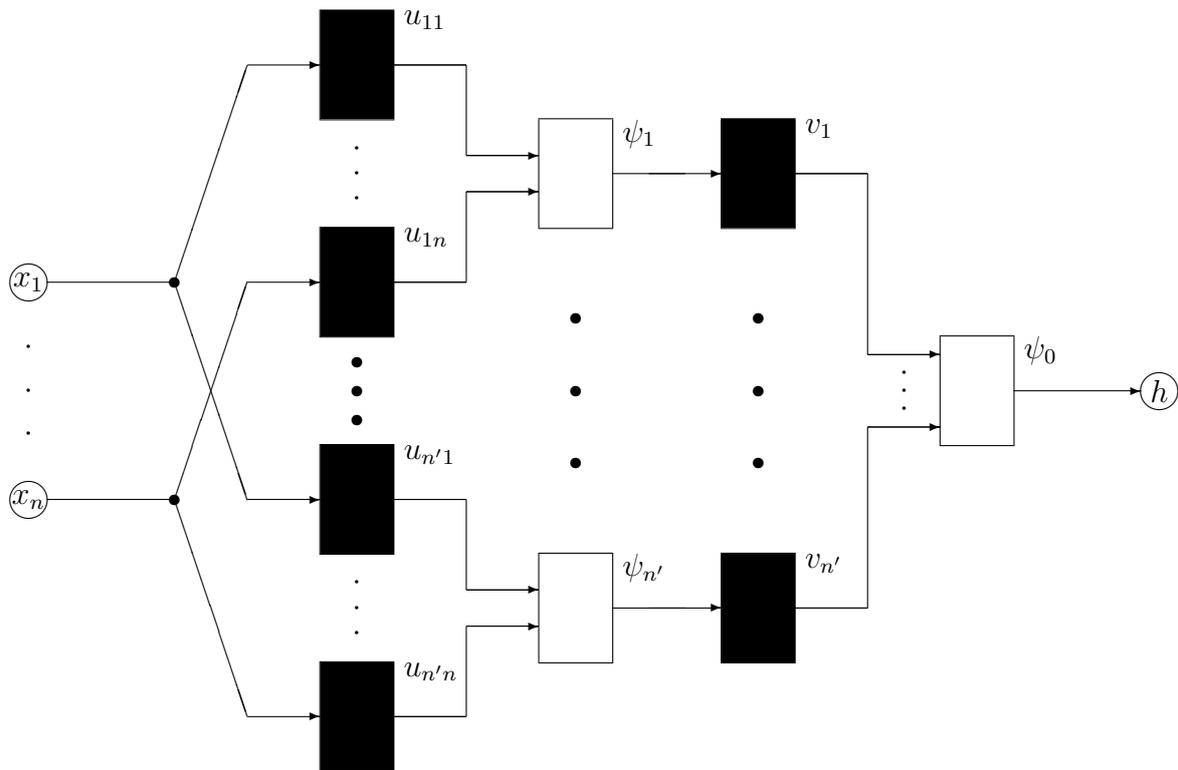


Abbildung 5.2: Das universelle Netzwerk von Kolmogorov.

Prinzipiell eröffnen sich nun zwei methodisch wesentlich verschiedene Zugänge. Wir können, erstens, im Geist der Normalformentheorie von [FS03] und von Kapitel 2 die Black-Box-Funktionen  $v_i, u_{j,i}$  als Transformationen betrachten, die aus den White-Boxes  $\psi_j$  eindeutige Normalformen herstellen. Dann ist zur lokalen Identifikation nur noch zu zeigen, dass  $\psi_0$  (und folglich  $h$ ) in der Lage ist, diese  $n'$  Normalformen der  $\psi_j$  simultan zu trennen.

Stattdessen werden wir, wie in Kapitel 3, direkt die Abbildungseigenschaften der partiellen Ableitungen von  $H$  und  $R$  auf Jet-Räumen betrachten. Dieser zweite Zugang hat den wesentlichen Vorteil, dass er nicht auf Diffeomorphismen  $v_i, u_{j,i}$  beschränkt ist, sondern sich direkt auf den allgemeinen vektoriellen Fall überträgt.

Wir betrachten zunächst für beliebige glatte  $v : \mathbb{R}^{n_1} \rightarrow \mathbb{R}^{n_2}$  den Jet-Raum  $J_{n_1, n_2}^N[v]$  von  $v$  selbst sowie seinen Ableitungen bis einschließlich der Ordnung  $N$ , ausgewertet auf einer endlichen Menge  $\mathcal{M}$ . Dann gilt offenbar

$$\dim J_{n_1, n_2}^N[v] = |\mathcal{M}| \cdot n_2 \cdot \binom{N + n_1}{n_1} \quad (5.23)$$

Im Kolmogorov-Beispiel wählen wir wieder eine Input-Menge  $\mathcal{M} = \mathcal{M}_1 \times \dots \times \mathcal{M}_n$  von

Produktstruktur und erhalten mit  $\mu_i := |\mathcal{M}_i|$ ,  $\mu := \mu_1 \cdot \dots \cdot \mu_n$  die Dimensionen

$$\begin{aligned} J_{1,1}^N[u_{j,i}] &= \mu_i \cdot (N+1), \\ J_{n,1}^N[\psi_j] &= \mu \cdot \binom{N+n}{n}, \\ J_{1,1}^N[v_j] &= \mu \cdot (N+1), \\ J_{n',1}^N[\psi_0] &= \mu \cdot \binom{N+n'}{n'}, \end{aligned} \quad (5.24)$$

jeweils für alle  $1 \leq i \leq n$  und  $1 \leq j \leq n'$ . Für die globale Input-Output Relation  $h$  erhalten wir aber

$$J_{n,1}^N[h] = \mu \cdot \binom{N+n}{n} \leq J_{n',1}^N[\psi_0]. \quad (5.25)$$

Insgesamt dürfen wir deshalb auf der Referenz-Lösung  $u^*$  und für  $u \neq u^*$  Surjektivität von  $D_{\psi_0}R$  annehmen, also erst recht von  $D_\psi R$ . Satz 3.1 zeigt dann die generische Eindeutigkeit der Lösung  $u = u^*$ , wenn

$$r_u < r_\psi. \quad (5.26)$$

Eine hinreichende Bedingung für (5.26) ist das Bestehen der Ungleichung

$$\binom{N+n}{n} > (N+1)n'(1 + \sum_{i=1}^n \mu_i/\mu). \quad (5.27)$$

In der Tat folgt aus (5.24) und (5.27)

$$\begin{aligned} r_u &\leq \sum_{j=1}^{n'} \dim J_{1,1}^N[v_j] + \sum_{j=1}^{n'} \sum_{i=1}^n \dim J_{1,1}^N[u_{j,i}] \\ &= \sum_{j=1}^{n'} \left( \mu(N+1) + \sum_{i=1}^n \mu_i(N+1) \right) \\ &= \mu(N+1)n' \left( 1 + \sum_i \mu_i/\mu \right) \\ &< \mu \binom{N+n}{n} = r_\psi. \end{aligned} \quad (5.28)$$

Wählen wir  $\mu_i$  groß genug, so dass etwa  $(N+1)n' \sum_i \mu_i/\mu < 1$ , dann genügt es,  $N$  so groß gewählt zu haben, dass

$$\frac{1}{n!} (N+2) \cdot \dots \cdot (N+n) > n'. \quad (5.29)$$

Kurioserweise ist der Fall  $n = 2$  minimaler Black-Box-Anzahl im Kolmogorov-Problem besonders heikel. Es sind dann gemäß (5.29) mindestens

$$N \geq 2n' - 1 \quad (5.30)$$

Ableitungen zur Konstruktion der Jet-Räume  $J^N$  erforderlich; für  $n' = 2n + 1 = 5$  also  $N \geq 9$ . Zweite Ableitungen,  $N = 2$ , genügen in diesem Fall für  $n \geq 10$  Inputs  $x_i$ .

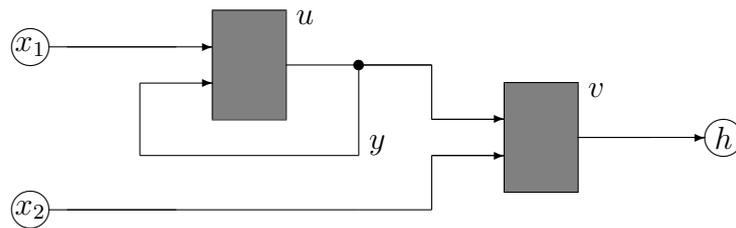


Abbildung 6.1: Elementare Struktur mit Rückführung.

Um zu illustrieren, wie prohibitiv der scheinbar „unschuldige“ Fall  $n = 2$  konkret ist, sind im Anhang 3 je ein Ausdruck einer ersten bis vierten Ableitung dieses Beispiels zu finden. Die fünfte Ableitung  $h_{(3,2)} = \partial_{x_1}^3 \partial_{x_2}^2 h$  enthält 8065 Produkt-Terme, die sechste Ableitung  $h_{(3,3)}$  schon 44840. Ableitungen der Ordnung  $N = 9$  würden etwa  $10^7$  Terme enthalten.

## 6 Strukturen mit Rückführung

### 6.1 Elementare (nicht überlappende) Rückführungen

Ziel ist die Reduktion der elementaren, aber vektoriellen Struktur mit Rückführung aus Abbildung 6.1 auf eine ebenfalls vektorielle Baumstruktur. Nach Abschnitt 4.4 kann damit — analog zu den Resultaten [Sch00] und [FS03] von Schuppert und Fiedler für skalare Baumstrukturen — generische Eindeutigkeit und zugleich der Wegfall der Problematik nichttrivialer Kalibrierungen garantiert werden.

In Gleichungsform lautet die elementare Struktur mit Rückführung aus Abb. 6.1

$$\begin{aligned} h &= v(y, x_2) \\ y &= u(x_1, y) \end{aligned} \tag{6.1}$$

mit globaler Input-Output Relation  $h = h(x_1, x_2)$  und Black- oder White-Boxes  $u$  und  $v$ . Unabhängig von der Frage, ob nun die Box  $u$  mit Rückführung  $y$  eine Black-Box oder eine White-Box ist, denken wir uns die Fixpunkt-Gleichung  $y = u(x_1, y)$  mit Parameter  $x_1$  nach  $y$  aufgelöst:

$$y = \tilde{u}(x_1). \tag{6.2}$$

Falls  $u$  eine White-Box ist, kann die Auflösung durch Fixpunkt-Iteration, Newton-Iteration zum Satz über implizite Funktionen, oder Varianten davon erfolgen. In der Aachener Arbeitsgruppe ist dieses Verfahren bereits erfolgreich durchgeführt worden. Wir erhalten dann aus der White-Box  $u$  in (6.1) eine White-Box  $\tilde{u}$  in (6.2).

Für Black-Boxes  $u$  können wir — Auflösbarkeit vorausgesetzt — ebenfalls die Fixpunkt-Gleichung  $y = u(x_1, y)$  wie in (6.2) darstellen. Allerdings ist dann  $\tilde{u}$  eine „effektive“

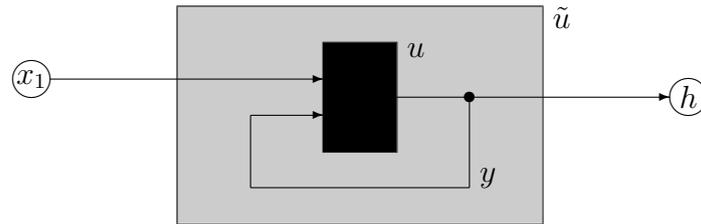


Abbildung 6.2: Kapselung der Rückführung  $(u, y)$  durch eine effektive Black-Box  $\tilde{u}$ .

Black-Box, welche die Black-Box  $u$  ersetzt. Vorteilhaft ist dabei die Reduktion der Anzahl der Inputvariablen von  $\dim x_1 + \dim y$  für  $u$  auf  $\dim x_1$  für  $\tilde{u}$ . Nachteilig wirkt sich unter Umständen aus, dass die effektive Black-Box  $\tilde{u}$  keine Rückschlüsse mehr darauf zulässt, wie ein konstruktiver Eingriff auf den Rückführungszweig  $y$  das Prozess-Geschehen ändert. Im Sinne von Abbildung 6.2 ist der Rückführungszweig  $\{u, y\}$  im Ersatzschaltbild der Black-Box  $\tilde{u}$  von außen unzugänglich gekapselt. Tatsächlich steht als Input-Raum der Black-Box  $u$  nur der Funktionsgraph  $(x_1, y) \in \text{graph}(\tilde{u})$  zur Verfügung. Deshalb kann die Black-Box  $u$  prinzipiell nicht auf extrapolierbare Weise identifiziert werden — selbst dann nicht, wenn der Output  $h(x_1, x_2)$  global für alle  $(x_1, x_2)$  bekannt ist. Für White-Boxes  $u$  entfällt dieses Problem natürlich.

Als caveat sei noch bemerkt, dass selbst im Fall streng monotoner Black- oder White-Boxes Mehrdeutigkeiten der Lösung  $y = \tilde{u}(x_1)$  in Abhängigkeit von Input-Parametern  $x_1$  auftreten können. Der interne Zustand der Rückführungsschleife  $y$  ist dann aus dem Input  $x_1$  nicht mehr feststellbar. Als Anzeichen sollte sich ein hysteretischer Verlauf auch der globalen Input-Output Funktion  $h = h(x_1, x_2)$  ergeben. Obwohl Hysterese-Effekte besonders in biologischen Systemen außerordentlich bedeutsam sind, weil sie beispielsweise Umstellungen des Gesamt-Stoffwechsels beschreiben können, werden wir im vorliegenden Bericht zu rückgeführten Hybridmodellen Hysterese-Effekte ausklammern und die eindeutige Auflösbarkeit der jeweiligen Fixpunkt-Gleichung vom Typ (6.2) fordern.

Setzen wir die effektive Black-Box  $y = \tilde{u}(x_1)$  aus (6.2) in (6.1) ein, so erhalten wir das *reduzierte Modell*

$$h = v(\tilde{u}(x_1), x_2) \quad (6.3)$$

siehe Abbildung 6.3. Falls mindestens eine der Boxes  $\tilde{u}, v$  eine Black-Box ist, sind die entsprechenden Fälle in Kapitel 4 diskutiert. Der verbleibende Fall eines reinen White-Box-Modells ist Standard und wird hier nicht weiter diskutiert.

Die Übertragung der Resultate auf den Fall mehrfacher, nicht-überlappender Rückführung gelingt leicht. Wir betrachten zunächst eine endliche Kollektion

$$y_i = u_i(x_i, y_i) \quad (6.4)$$

von Rückführungen  $y_i$ , wie in (6.1). Dabei bezeichnen nun  $x_i$  und  $y_i$  die vektoriellen Inputs der Box  $u_i$ . Zugleich ist  $y_i$  auch der Output von  $u_i$ . Wie in (6.1) ersetzen wir jede

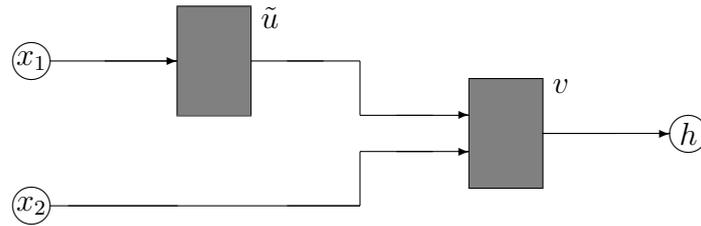
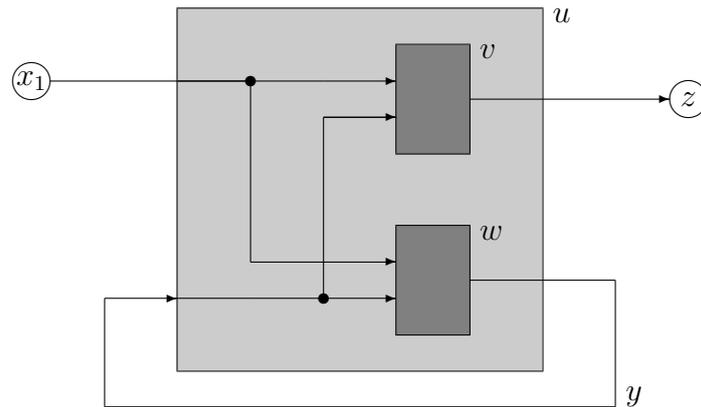


Abbildung 6.3: Reduziertes Modell (6.3) zur elementaren Rückführung, vgl. (6.1).

Abbildung 6.4: Nicht-überlappende teilweise Rückführung, separierte Outputs  $u = (v, w)$ .

Rückführungsschleife durch eine äquivalente gekapselte Box

$$y_i = \tilde{u}(x_i), \quad (6.5)$$

indem wir uns die Fixpunkt-Gleichung (6.4) für  $y_i$  nach  $y_i$  aufgelöst denken. So erhalten wir unmittelbar ein SHM

$$h = H(\psi, \tilde{u}) \quad (6.6)$$

ohne Rückführungen. Wir schreiben dabei  $\psi$  für alle nach Kapselung entstehenden oder unveränderten White-Boxes und  $\tilde{u}$  für alle entstandenen oder unverändert gelassenen Black-Boxes. Nach Kapselung gelten für das SHM (6.6) wieder Satz 3.1 und alle Resultate des Kapitels 5.

Es ist nicht erforderlich, dass sämtliche Outputs von  $u_i$  rückgekoppelt sind. Wir betrachten etwa eine einzige Box  $u$  mit Input  $x$  und partieller Rückführung  $y$ . Wir separieren die in folgende Boxes weitergeführten, nicht rückgeführten Output-Komponenten  $z$  von  $u$  als  $v$  und die Rückführung-Komponenten als  $w$ , also  $u = (v, w)$  mit

$$\begin{aligned} z &= v(x, y) \\ y &= w(x, y) \end{aligned} \quad (6.7)$$

vgl. Abbildung 6.4. Wie zuvor lösen wir dann die Fixpunkt-Gleichung  $y = w(x, y)$  auf:

$$y = \tilde{w}(x). \quad (6.8)$$

Eingesetzt in die erste Gleichung von (6.7) ergibt sich

$$z = \tilde{u}(x) := v(x, \tilde{w}(x)) \quad (6.9)$$

analog zur gekapselten Box  $\tilde{u}$  in (6.2) bzw.  $\tilde{u}_i$  in (6.5). Damit ist auch der Fall teilweiser, nicht-überlappender Rückführungen auf Satz 3.1 und Kapitel 5 zurück geführt.

## 6.2 Äquivalente Strukturen

Im Folgenden fassen wir Hybridstrukturen als gerichtete Graphen mit Mehrfachkanten auf. Jede Kante entspricht dabei einem *eindimensionalen* reellen Datenwert, der vom Ausgang einer Box zum Eingang der nächsten Box übergeben wird. Als Ecken oder Knoten des Graphen sind dabei ausschließlich Input- bzw. Output-Punkte, Black- und White-Boxes sowie Gabelungen erlaubt.

**Definition 6.1** Eine **Hybridstruktur** ist ein (zusammenhängender) gerichteter Graph (ggf. mit Mehrfachkanten), dessen Ecken folgenden Klassen zugeordnet sind:

**Randknoten** sind solche Knoten mit genau einer Kante. Sie stellen die Input-Größen (eine ausgehende Kante) und die Output-Größen (eine eingehende Kante) des Hybridmodells dar.

**Innere Knoten** sind Knoten mit mindestens einer Eingangs- und mindestens einer Ausgangskante. Darunter fallen Gabelungen mit genau einer eingehenden und zwei ausgehenden Kanten sowie die üblichen White-Boxes und Black-Boxes. Letzteren ist noch eine White-Box- bzw. Black-Box-Funktion zugeordnet.

Alle Hybridmodelle lassen sich durch Graphen dieser Form darstellen.

Ziel ist es nun, durch Umkehrung der Orientierung bestimmter Kanten im Graphen einer Hybridstruktur vom Standpunkt der Identifizierbarkeit äquivalente Strukturen zu generieren. Von fundamentaler Bedeutung dafür ist der Satz über implizite Funktionen. Er gestattet uns, Funktionen  $u : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ ,  $x \mapsto u(x)$ ,  $n > m$  nach einem Teil ihrer Eingangsvariablen passender Dimension auflösen, sofern eine Nichtausartungsbedingung erfüllt ist:

$$x_{1,\dots,m} = u^x(u, x_{m+1,\dots,n}). \quad (6.10)$$

Konkret ergibt sich damit folgender Äquivalenzbegriff für Hybridstrukturen.

**Definition 6.2** Zwei Hybridstrukturen heißen *äquivalent*, sofern folgende Bedingungen erfüllt sind.

- (i) Die zugeordneten Graphen sind als **ungerichtete** Graphen isomorph.
- (ii) Die unter der Isomorphie korrespondierenden **inneren** Knoten haben jeweils übereinstimmende Anzahlen eingehender und ausgehender Kanten.

(iii) *Den unter der Isomorphie korrespondierenden Knoten sind Black- bzw. White-Boxes zugeordnet, die unter Beachtung der Orientierung der Kanten durch den Satz über implizite Funktionen auseinander hervorgehen. Insbesondere korrespondieren Black-Boxes zu Black-Boxes, White-Boxes zu White-Boxes und Gabelungen zu Gabelungen.*

Als Handlungsanweisung ausgedrückt bedeutet dies folgendes. Um zu einer äquivalenten Struktur zu gelangen, dürfen beliebige Kanten in ihrer Orientierung umgekehrt werden, sofern sichergestellt ist, dass an jeder Box und jeder Gabelung genauso viele eingehende wie ausgehende Kanten umgekehrt werden. Die neuen Black- und White-Box-Funktionen sind dann durch den Satz über implizite Funktionen gegeben.

Äquivalente Strukturen müssen nicht die gleichen Input- und Output-Größen besitzen. Definition 6.2 impliziert allerdings, dass die Gesamtzahlen (d.h. die Gesamtdimensionen) der Input- und Output-Größen übereinstimmen.

Die Abbildung 6.5 zeigt ein Beispiel. Durch Umkehrung der markierten Kanten der Hybridstruktur mit überlappender Rückführung in Abb. 6.5a) entsteht eine reine vorwärts verzweigte Struktur ohne Rückführung in Abb. 6.5b). Die Identifikation beider Strukturen ist also durch die in den vorangegangenen Kapiteln entwickelte Theorie zugänglich.

**Definition 6.3** *Wir nennen eine Hybridstruktur mit Rückführung (d.h. mit einem gerichteten Zyklus) äquivalent auflösbar, wenn sie eine äquivalente rückführungsfreie Hybridstruktur besitzt.*

**Proposition 6.4** *Äquivalente Hybridstrukturen haben für generische Black- und White-Boxes die gleichen Identifizierbarkeitseigenschaften. Insbesondere stellen sie die gleiche Dimensionsanforderung an die Datenbasis, um eine Identifikation zu gewährleisten.*

Die Resultate für vorwärts verzweigte Strukturen sind somit auf äquivalent auflösbare Strukturen mit Rückführung ausgedehnt. In Kapitel 8 wird noch ein weiteres Beispiel ausführlich diskutiert. Dabei ist insbesondere zu bemerken, dass durch den Übergang zu äquivalenten Strukturen auf natürliche Weise Strukturen mit Zwischenmessungen auftreten können.

Es existieren allerdings auch nicht äquivalent auflösbare Strukturen. Abbildung 6.6 zeigt ein Beispiel einer nicht auflösbaren Hybridstruktur.

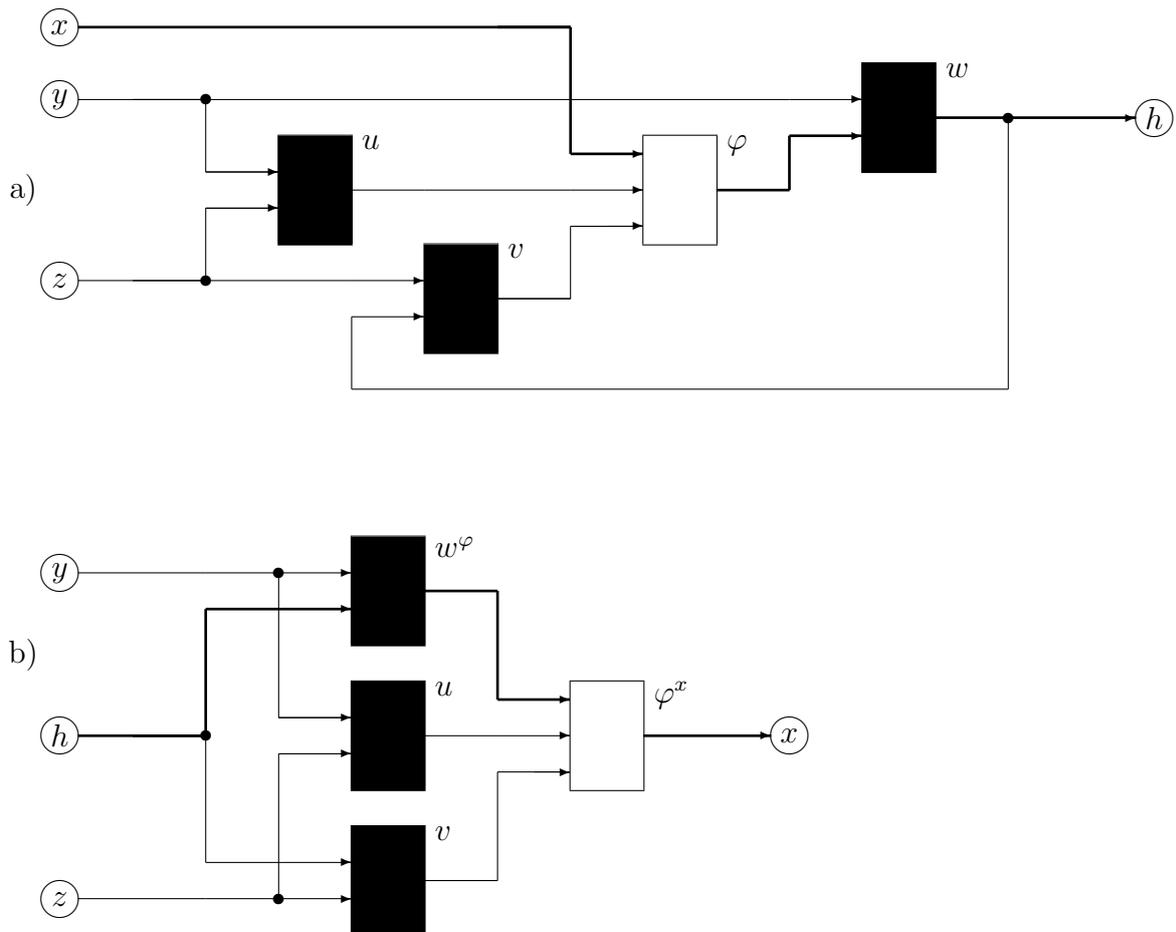


Abbildung 6.5: a) Hybridstruktur mit überlappender Rückführung und b) äquivalente vorwärts verzweigte Struktur ohne Rückführung. Beide Strukturen gehen durch Umkehrung der jeweils markierten Kanten auseinander hervor.

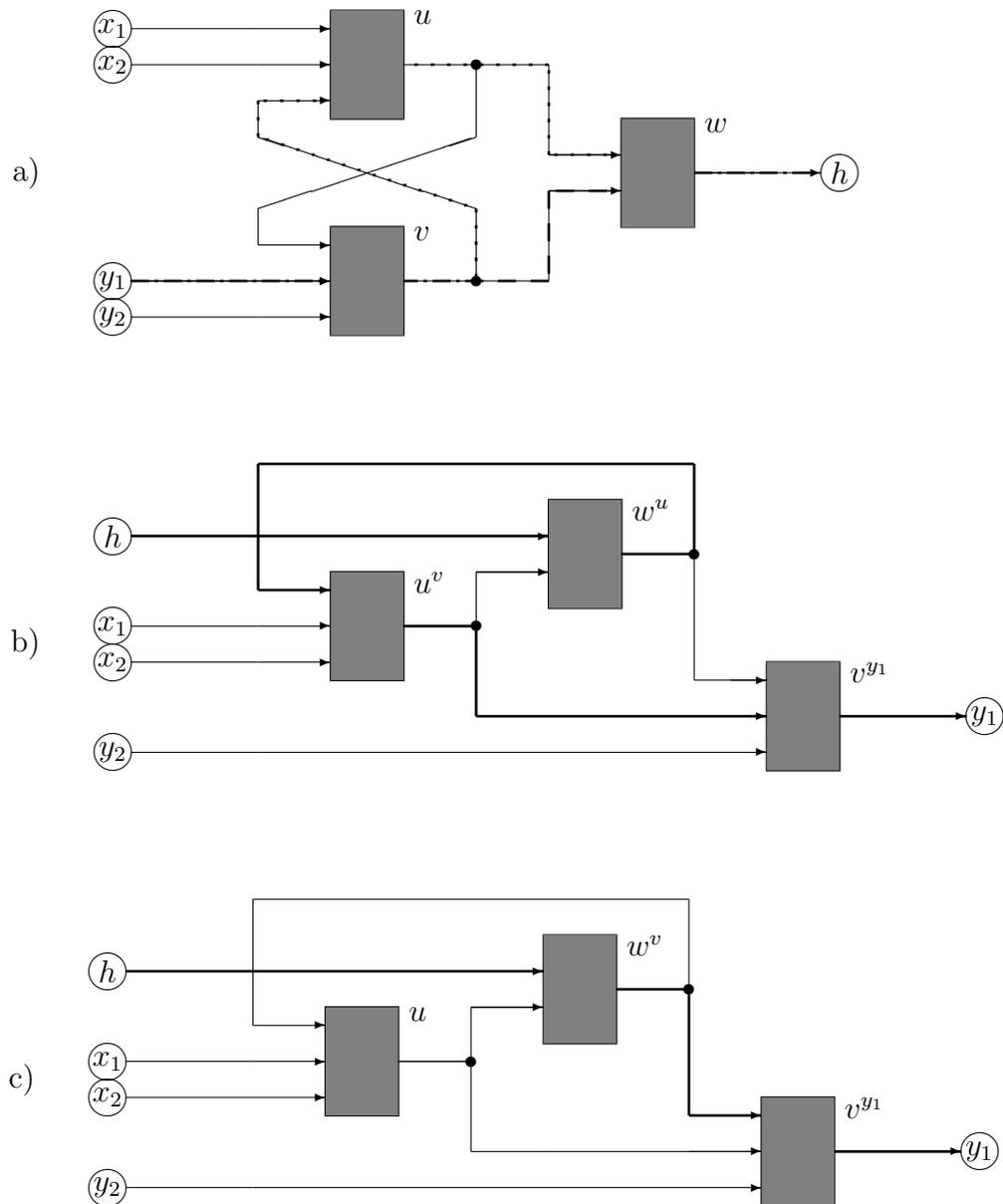
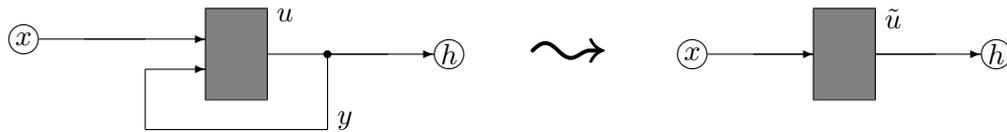


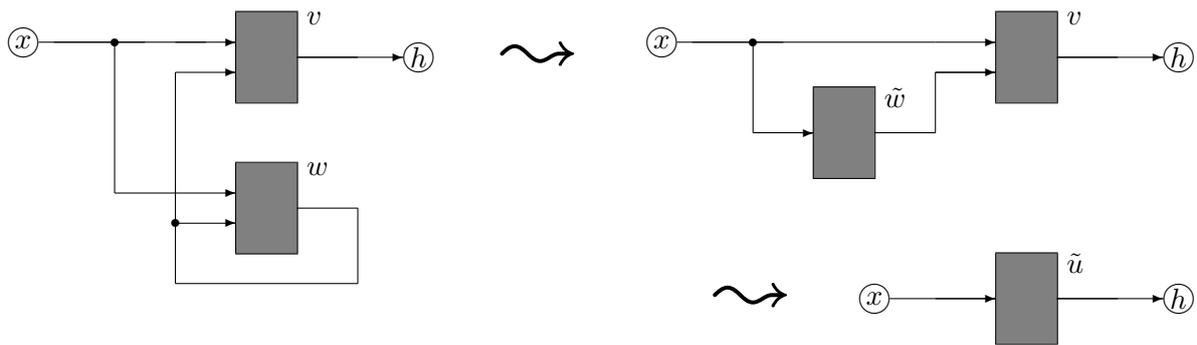
Abbildung 6.6: Struktur mit nicht äquivalent auflösbarer Rückführung: Um den Zyklus in Struktur a) aufzulösen, muss der Ausgang mindestens einer der beteiligten Boxen  $u$  und  $v$  umgekehrt werden, mindestens eine Kante muss unverändert bleiben. Aufgrund der Bedingung (ii) in Definition 6.2 zieht das — bis auf Symmetrien ( $x_1 \leftrightarrow x_2$ ,  $y_1 \leftrightarrow y_2$ ,  $x \leftrightarrow y$ ) — genau eine der äquivalenten Strukturen b) oder c) nach sich, die beide einen neuen Zyklus enthalten. Die umgekehrten Kanten sind jeweils markiert, wobei in Struktur a) die Umkehrung der gepunkteten Kanten auf Struktur b) und die Umkehrung der gestrichelten Kanten auf Struktur c) führt. (Alle Kanten stellen skalare Größen dar.)

### 6.3 Modellreduktionen

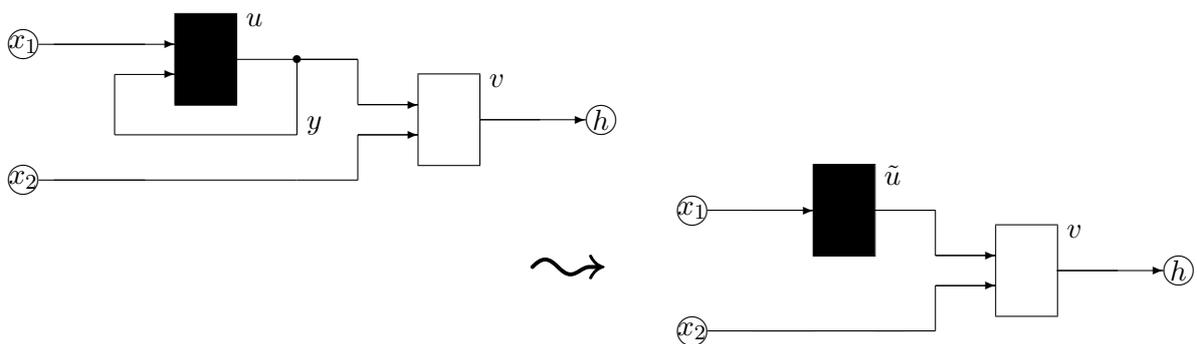
Die äquivalenten Transformationen des vorigen Abschnitts sind nicht die einzigen strukturellen Ersetzungen, die eine Identifikation von Hybridmodellen ermöglichen können. Die Kapselung  $\tilde{u}$  der direkten Rückführung  $u$  aus Abbildung 6.2 ersetzt zum Beispiel ganz direkt die White-Box oder Black-Box  $u$ :



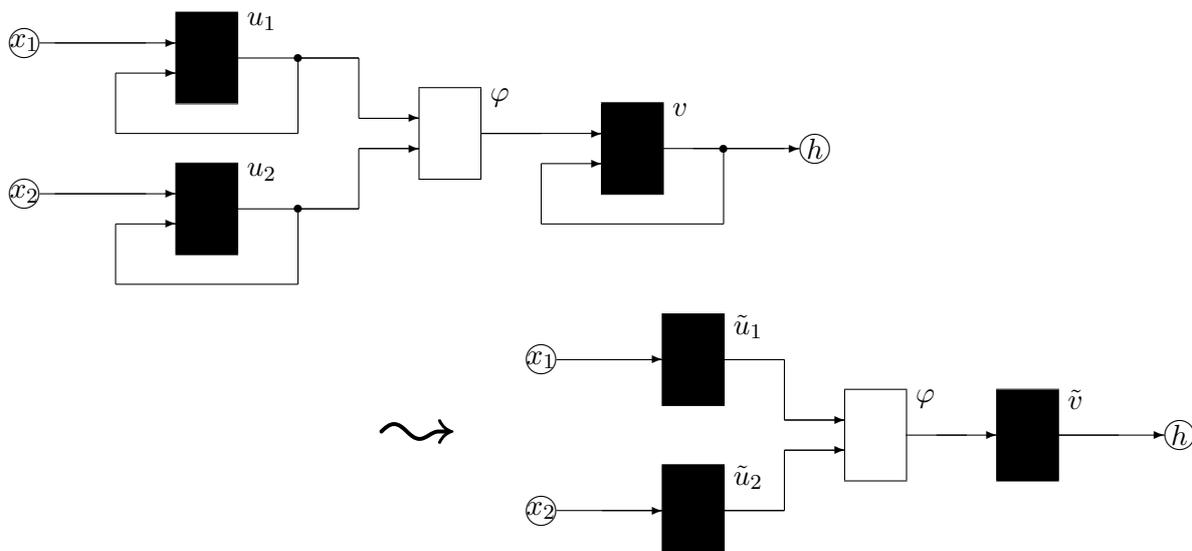
Der etwas komplexere Fall einer teilweisen Rückführung, aus Abbildung 6.4, liefert die zwei-stufige Substitution:



Die entsprechende Substitution in Abbildung 6.1 führt auf die Vereinfachung:



Das einfachste Black-White-Black-SHM, dessen allgemeine Form im Zentrum der Untersuchungen von Kapitel 4 und [FS03] steht, ergibt sich beispielsweise aus einer dreifachen Kapselung:



Entsprechend lassen sich mehrfache, nicht-überlappende Rückführungen in allgemeinen Graphen behandeln.

Auch bei mehrfach überlappenden Rückführungen gelingt in manchen Fällen eine Reduktion auf ein SHM ohne Rückführung. Eine exemplarische Struktur ist gegeben durch

$$\begin{aligned} h &= \mathbf{w}(u, v), \\ u &= \mathbf{u}(x, v), \\ v &= \mathbf{v}(y, u) \end{aligned} \quad (6.11)$$

mit  $x \in \mathbb{R}^{d_x}$ ,  $y \in \mathbb{R}^{d_y}$ ,  $u \in \mathbb{R}^{d_u}$ ,  $v \in \mathbb{R}^{d_v}$ ,  $h \in \mathbb{R}^{d_h}$ . Diese Struktur ist durch äquivalente Transformationen nicht auflösbar, siehe Abb. 6.6. Dabei nehmen wir an, dass  $\mathbf{v}, \mathbf{w}$  White-Boxes und  $\mathbf{u}$  eine Black-Box darstellen. Weiter sei  $d_u + d_v > d_h$ , da andernfalls die Black-Box bereits durch die Inverse von  $\mathbf{v}$  bestimmt ist. Außerdem können wir  $d_y > d_v$  annehmen, da wir sonst das gesamte Modell besser durch eine einzige Black-Box ersetzen.

Zu beachten ist außerdem, dass im Fall zweier Black-Boxes  $\mathbf{u}, \mathbf{v}$  strukturbedingte Kalibrierungen existieren. Konkret werden kalibrierte Black-Boxes

$$\begin{aligned} \tilde{u} &= \tilde{\mathbf{u}}(x, \tilde{v}), \\ \tilde{v} &= \tilde{\mathbf{v}}(y, \tilde{u}) \end{aligned} \quad (6.12)$$

durch Diffeomorphismen  $\rho : \mathbb{R}^{d_u+d_v} \rightarrow \mathbb{R}^{d_u+d_v}$  mit  $\mathbf{w} = \mathbf{w} \circ \rho$ , vermöge der (voneinander unabhängig zu lösenden) Fixpunktgleichungen

$$\begin{aligned} \tilde{u} &= (\rho^{-1})_1(\mathbf{v}(x, \rho_2(\tilde{u}, \tilde{v})), \rho_2(\tilde{u}, \tilde{v})), \\ \tilde{v} &= (\rho^{-1})_2(\rho_1(\tilde{u}, \tilde{v}), \mathbf{v}(y, \rho_1(\tilde{u}, \tilde{v}))) \end{aligned} \quad (6.13)$$

definiert. Die Fixpunktgleichungen (6.13) besitzen die durch das SHM definierten Lösungen für  $\rho = \text{id}$ , so dass für generische Systeme Lösungen von (6.13) zumindest für beliebige

Kalibrierungen  $\rho$  nahe der Identität durch den Satz über implizite Funktionen gesichert sind.

Betrachten wir deshalb das dargestellte Hybridmodell (6.11) mit verkreuzten Rückführungen und nur einer Black-Box  $\mathbf{u}$  sowie zwei White-Boxes  $\mathbf{v}$ ,  $\mathbf{w}$ . Im Fall  $\dim(v) = d_v = d_h = \dim(h)$  können wir unter Generizitätsannahmen die White-Box  $\mathbf{w}$  zumindest lokal invertieren

$$v = \mathbf{w}^v(u, h) \quad (6.14)$$

und erhalten somit eine Fixpunktgleichung für die Black-Box  $\mathbf{u}$ ,

$$u = \mathbf{u}(x, \mathbf{w}^v(u, h)). \quad (6.15)$$

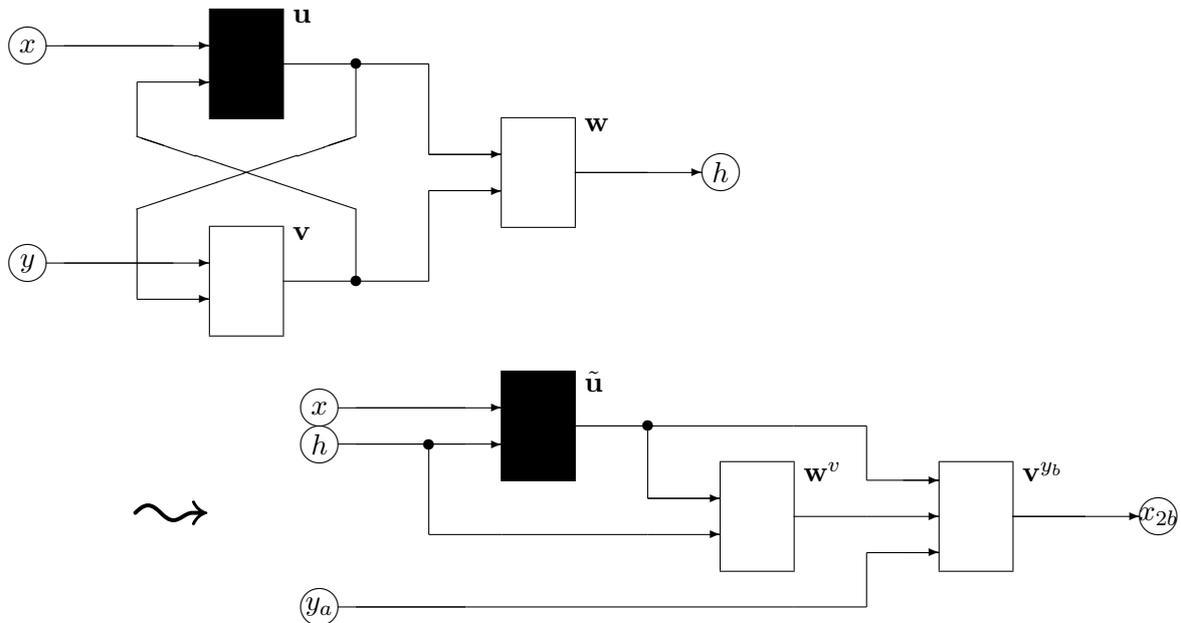
Wir bezeichnen die Lösung der Fixpunktgleichung mit  $\tilde{\mathbf{u}}(x, h)$ . Darüber hinaus zerlegen wir den Vektor  $y$  in zwei Komponenten  $y_a \in \mathbb{R}^{d_y - d_v}$  und  $y_b \in \mathbb{R}^{d_v}$ , wobei wir die Räume so wählen, dass die White-Box  $\mathbf{v}$  invertierbar wird

$$y_b = \mathbf{v}^{y_b}(y_a, u, v). \quad (6.16)$$

Dies ermöglicht es, ein neues Hybridmodell ohne Rückführungen

$$\begin{aligned} y_b &= \mathbf{v}^{y_b}(y_a, u, v), \\ v &= \mathbf{w}^v(u, h), \\ u &= \tilde{\mathbf{u}}(x, h) \end{aligned} \quad (6.17)$$

mit teilweise vertauschten Inputs und Outputs zu konstruieren.



Dieses System gestatten nun wieder die Anwendung von Satz 3.1 im Sinne von Kapitel 5. Eine Identifizierung der Black-Box  $\tilde{\mathbf{u}}$  im SHM (6.17) ist dabei äquivalent zu einer Identifizierung der Black-Box  $\mathbf{u}$  im Ausgangssystem (6.11).

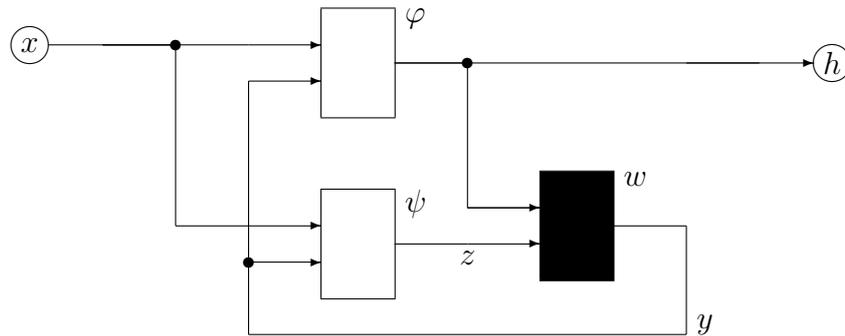


Abbildung 7.1: Beispiel einer mehrfach überlappenden, verzweigten Rückführung.

## 7 Fallbeispiel 1: Verzweigter Feedback

Um Größenordnungen verwickelter als in Abschnitt 6.1 liegen die Verhältnisse bei mehrfach überlappenden Rückführungen, die also gegebenenfalls vektoriell über mehrere Prozess-Stufen hinweg verkoppeln. Als Paradigma dient dabei in diesem Kapitel das von Kollegen Marquardt auf dem Arbeitstreffen vom 21. Oktober 2003 vorgeschlagene SHM, siehe Abbildung 7.1. Sämtliche dargestellten Größen sind vektoriell.

In Gleichungsform lautet das SHM

$$\begin{aligned} h &= \varphi(x, y) \in \mathbb{R}^n \\ z &= \psi(x, y) \in \mathbb{R}^{m-n} \\ y &= w(h, z) \in \mathbb{R}^m \end{aligned} \quad (7.1)$$

mit Input  $x \in \mathbb{R}^N$ , zurückgeführten Komponenten  $y \in \mathbb{R}^m$  und globalem Output  $h = h(x) \in \mathbb{R}^n$ . Dabei sind  $\varphi, \psi$  White-Boxes;  $w$  ist eine Black-Box. Obwohl diese Einschränkung nicht prinzipiell erforderlich ist, betrachten wir im folgenden zur Vereinfachung den von Kollegen Marquardt vorgeschlagenen Spezialfall

$$z \in \mathbb{R}^{m-n}, \quad (7.2)$$

also  $\dim y = \dim h + \dim z$  und insbesondere  $m > n$ . Außerdem betrachten wir nur den Fall  $\dim y < \dim x$ , also

$$m < N. \quad (7.3)$$

Sonst könnten wir die Zuordnung  $x \rightarrow h(x)$  besser durch eine einzige Black-Box  $u$  der Input-Dimension  $\dim x = N \leq m = \dim y = \dim h + \dim z$  beschreiben, als durch eine Black-Box  $w$  der Input-Dimension  $\dim h + \dim z = m$  in der Rückführung.

Auch diese Hybridstruktur gehört nicht zu den äquivalent auflösbaren Strukturen aus Abschnitt 6.2.

Ziel ist die eindeutige Identifikation der globalen Input-Output-Relation  $h = h(x)$

aus einer Datenbasis  $\mathcal{D}$  für die Input-Werte  $x$  der reduzierten Dimension

$$\dim \mathcal{D} = \dim h + \dim z = m < N. \quad (7.4)$$

Da  $m$  die Input-Dimension der einzigen Black-Box  $w$  ist, folgt dieses Ziel wiederum dem Prinzip von Schuppert [Sch00].

Unter den Dimensionsvoraussetzungen (7.2) und (7.3) zerlegen wir den Input-Vektor  $x$  geeignet in Komponenten

$$x = (\xi, \eta, \zeta) \in \mathbb{R}^{N-m} \times \mathbb{R}^{m-n} \times \mathbb{R}^n. \quad (7.5)$$

Insbesondere sind alle Dimensionen positiv. Es genügt, die Zerlegung lokal zu wählen, so dass die weiter unten formulierten Auflösbarkeits-Bedingungen im Sinne des Satzes über implizite Funktionen erfüllt sind; siehe (7.7), (7.8), (7.10), (7.15)–(7.17), (7.19). Wir werden im folgenden stets die Existenz und globale Konsistenz solcher Auflösungen voraussetzen.

Zunächst lösen wir das Teilsystem

$$\begin{aligned} h &= \varphi(x, y) \\ z &= \psi(x, y) \end{aligned} \quad (7.6)$$

lokal nach  $y$  auf. Das gelingt nach unserer (stillschweigenden) Auflösbarkeits-Bedingung und weil nach Voraussetzung (7.2) gilt:  $\dim y = m = n + (m - n) = \dim h + \dim z$ . Die äquivalente Auflösung bezeichnen wir mit

$$y = Y(x, z, h). \quad (7.7)$$

Da  $\varphi$ ,  $\psi$  als White-Boxes vorausgesetzt sind, ist auch  $Y$  als White-Box bekannt. Wir wählen jetzt die Koordinaten  $x = (\xi, \eta, \zeta)$  der lokalen Zerlegung (7.5) des Inputs  $x$  so, dass die Komponente  $\zeta \in \mathbb{R}^n$  genau den Werten  $h = h(x)$  entspricht, also

$$\zeta = h(x) = h(\xi, \eta, \zeta). \quad (7.8)$$

Damit ergeben die Auflösung (7.7) und die verbliebene dritte Gleichung des Marquardt-Modells (7.1) die Bestimmungs-Gleichung

$$w(\zeta, z) = y = Y(\xi, \eta, \zeta, z, \zeta). \quad (7.9)$$

Wir wollen diese Gleichung nach

$$z = Z(\xi, \eta, \zeta) \quad (7.10)$$

aufösen. Dann liefert Einsetzung von (7.2), (7.10) in die erste Gleichung  $h = \varphi(x, y)$  von (7.1) die komplette kalibrierungsfreie Identifikation des Marquardt-Modells vermöge

$$h(x) = h(\xi, \eta, \zeta) = \varphi(\xi, \eta, \zeta, w(\zeta, Z(\xi, \eta, \zeta))) \quad (7.11)$$

durch bekannte Funktionen  $\varphi, Y, Z$ .

Leider bezeichnet aber die Funktion  $w$ , die zur Auflösung von (7.9) benötigt wird, eine Black-Box. Sie ist also gar nicht bekannt! Um diese entscheidende Schwierigkeit zu überwinden, zerlegen wir die Gleichung

$$w = Y(\xi, \eta, \zeta, z, \zeta) \in \mathbb{R}^m \quad (7.12)$$

im Sinne einer Lyapunov-Schmidt-Reduktion [Van82]. Konkret zerlegen wir zugleich

$$\begin{aligned} Y &= (U, V) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^{m-n} \\ w &= (u, v) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^{m-n} \end{aligned} \quad (7.13)$$

(lokal) so in Komponenten, dass die  $v$ -Komponente

$$v = V(\xi, \eta, \zeta, z, \zeta) \in \mathbb{R}^{m-n} \quad (7.14)$$

von (7.12) mit der  $x$ -Zerlegung  $x = (\xi, \eta, \zeta)$  aus (7.5) nach  $\eta \in \mathbb{R}^{m-n}$  aufgelöst werden kann. Wir schreiben für die Auflösung

$$\eta = H(\xi, \zeta, z, v). \quad (7.15)$$

Wie  $Y$  selbst sind hier auch  $U, V, H$  von den White-Boxes  $\varphi, \psi$  her bekannte Funktionen. Einsetzen in die verbleibende  $u$ -Komponente von (7.12) liefert dann

$$u = F(\xi, \zeta, z, v) := U(\xi, H(\xi, \zeta, z, v), \zeta, z, \zeta). \quad (7.16)$$

Um  $w = (u, v)$  aus (7.16) zu bestimmen — und damit letztlich die gesuchte Black-Box-Funktion  $w = w(\zeta, z)$  aus (7.9) — bedenken wir, dass die Werte von  $(u, v)$  in der Bestimmungsgleichung

$$u = F(\xi, \zeta, z, v) \quad (7.17)$$

zwar von  $\zeta$  und  $z$  abhängen dürfen, aber nicht von  $\xi$ . Wir können etwa  $k$  verschiedene Werte  $\xi$  einsetzen, bis die Anzahl  $kn$  der unabhängigen Komponenten der Bestimmungsgleichungen (7.17) für immer dasselbe  $w = (u, v) \in \mathbb{R}^m$  groß genug ist, um Eindeutigkeit herzustellen. Generizitätsargumente wie in den Kapiteln 3, 4.4 sind hier möglich und liefern die Bedingung

$$k > \frac{2m}{n}. \quad (7.18)$$

Alternativ lassen sich (höhere) partielle Ableitungen von (7.17) in Richtung  $\xi$  heranziehen, um  $u$  sofort zu eliminieren und gleichzeitig  $v$  zu bestimmen. Durch Einsetzen in die rechte Seite von (7.17) ergibt sich dann  $u$ .

Nachdem der konkrete Wert von  $(u, v) = w = w(\zeta, z) \in \mathbb{R}^m$  aus (7.16) und (7.17) so bestimmt ist, lässt sich  $z \in \mathbb{R}^{m-n}$  durch (lokale) Auflösung der Gleichung

$$v = V(\xi, \eta, \zeta, z, \zeta) \in \mathbb{R}^{m-n} \quad (7.19)$$

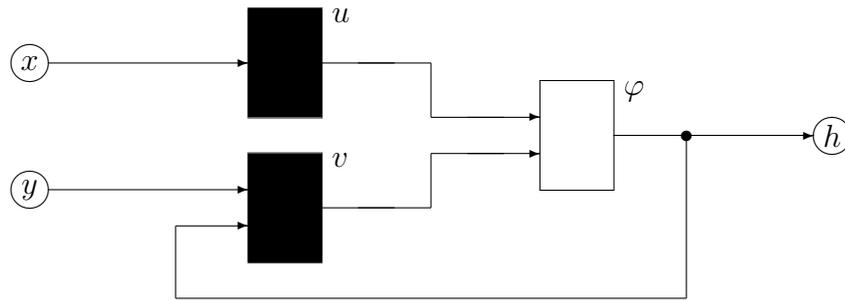


Abbildung 8.1: Hybridstruktur (8.1) mit Rückführung über zwei Boxen.

nach  $z$  bestimmen, wie in (7.10) gefordert. Durch (7.11) ist damit die eindeutige, kalibrierungsfreie Identifikation des Marquardt-Modells aus Abbildung 7.1 gewährleistet. In der Tat schöpft also eine nicht-ausgeartete Datenbasis  $\mathcal{D}$  der Dimension  $m$  den erforderlichen Input-Raum  $(h, z)$  der einzigen Black-Box  $w$  im Modell nach Voraussetzungen (7.2), (7.4) voll aus.

## 8 Fallbeispiel 2: Allgemeine Rückführung über zwei Boxen

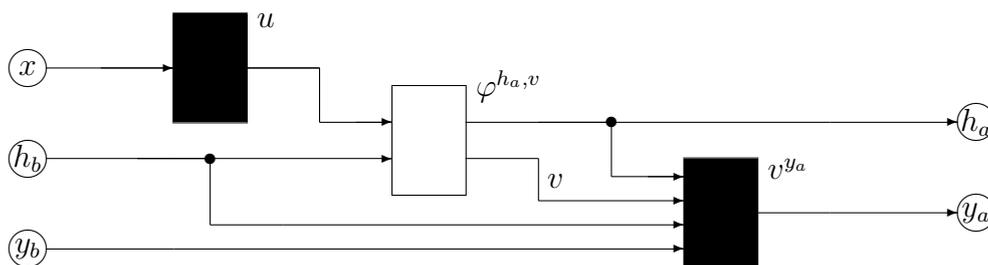
In diesem Kapitel untersuchen wir die in Abb. 8.1 dargestellte Hybridstruktur

$$\begin{aligned} u &= u(x), \\ v &= v(y, h), \\ h &= \varphi = \varphi(u, v) = \varphi(u(x), v(y, h)). \end{aligned} \tag{8.1}$$

Dabei sind alle Größen vektoriell,  $x \in \mathbb{R}^{d_x}$ ,  $y \in \mathbb{R}^{d_y}$ ,  $u \in \mathbb{R}^{d_u}$ ,  $v \in \mathbb{R}^{d_v}$ ,  $h \in \mathbb{R}^{d_h}$ . Die in den Abbildungen wiedergegebenen Kanten stellen daher Mehrfachkanten des Graphen entsprechen Definition 6.1 dar. Wir gehen von folgenden plausiblen Dimensionsannahmen aus:

- (i)  $d_x \geq d_u$  und  $d_y + d_h \geq d_v$ , d.h. die Black-Boxes vergrößern nicht die Dimension der Daten und sind daher für generische Modelle surjektiv.
- (ii)  $d_x > d_h$  (andernfalls kann die gesamte Struktur durch eine einzige Black-Box  $h = w(x, y)$  ersetzt werden, deren Urbild-Dimension nicht größer als die der Black-Box  $v$  ist).

Es folgt eine Untersuchung der Identifizierbarkeit generischer Strukturen der Form (8.1) in Form einer Fallunterscheidung nach den noch möglichen Dimensionsrelationen. Die Fälle 1, 2 und 3 gehören jeweils zu den Fällen  $d_h > d_v$ ,  $d_h = d_v$  und  $d_h < d_v$ . Sie werden je nach Bedarf durch weitere Ungleichungen unterteilt, um ein vollständiges Bild zu erhalten.

Abbildung 8.2: Zu (8.1) äquivalente Hybridstruktur im Fall 1.1:  $d_h > d_v$  und  $d_v \leq d_y$ .**Fall 1.1:  $d_h > d_v$  und  $d_v \leq d_y$** 

Unter diesen Dimensionsvoraussetzungen zerlegen wir die Vektoren

$$\begin{aligned} h &= (h_a, h_b), & h_a &\in \mathbb{R}^{d_h - d_v}, & h_b &\in \mathbb{R}^{d_v}, \\ y &= (y_a, y_b), & y_a &\in \mathbb{R}^{d_v}, & y_b &\in \mathbb{R}^{d_y - d_v}. \end{aligned}$$

Dies schließt auch den Fall  $d_v = d_y$  ein, d.h.  $y_a = y$ ,  $y_b = 0$ . Entsprechend der Zerlegung des  $h$ -Vektors wird auch die White-Box dargestellt:

$$\varphi = (\varphi_a, \varphi_b), \quad h_a = \varphi_a(u, v), \quad h_b = \varphi_b(u, v).$$

Mit dieser Zerlegung erhalten wir die zu (8.1) äquivalente Struktur

$$\begin{aligned} u &= & u(x), \\ v &= \varphi_b^v(u, h_b) & =: \varphi^v(u, h_b), \\ h_a &= \varphi_a(u, v) = \varphi_a(u, \varphi_b^v(u, h_b)) & =: \varphi^{h_a}(u, h_b), \\ y_a &= & v^{y_a}(y_b, h, v), \end{aligned} \tag{8.2}$$

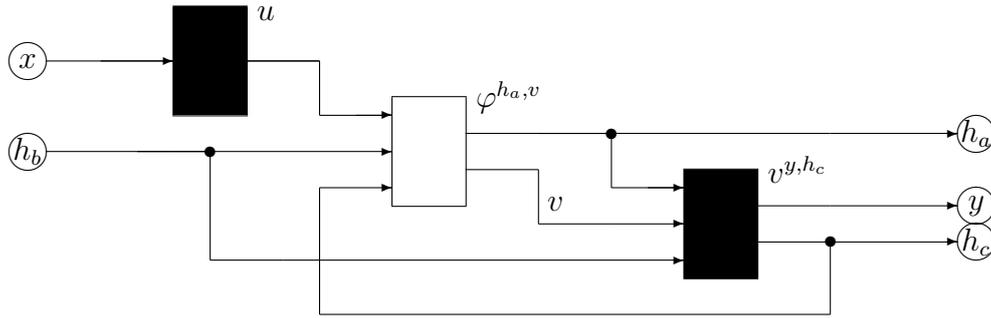
oder zusammengefasst

$$(h_a, y_a)(x, h_b, y_b) = \left( \varphi^{h_a}(u(x), h_b), v^{y_a}(y_b, \varphi^{h_a}(u(x), h_b), h_b, \varphi^v(u(x), h_b)) \right),$$

die in Abb. 8.2 dargestellt ist. Dabei wurde in System (8.1) zunächst  $h_b = \varphi_b(u, v)$  durch  $v = \varphi_b^v(u, h_b)$  nach  $v$  aufgelöst und in  $h_a = \varphi_a(u, v)$  eingesetzt. Anschließend haben wir  $v = v(y_a, y_b, h)$  durch  $y_a = v^{y_a}(y_b, h, v)$  nach  $y_a$  aufgelöst. Wir erhalten so eine rückführungsfreie vorwärts verzweigte Struktur.

Von besonderer Bedeutung ist die Zwischenmessung  $h_a$ . Sie ermöglicht die direkte Identifikation der Black-Box  $u$  in der Substruktur  $h_a = \varphi^{h_a}(u(x), h_b)$ . Mit identifizierter Black-Box-Funktion  $u$  ist dann auch die zweite Black-Box  $v$  identifizierbar.

Im Falle  $d_u < d_h$  ist jedoch der durch irgendeine Datenbasis prinzipiell erreichbare Urbildbereich von  $v$  auf eine  $(d_y + d_u)$ -dimensionale Untermenge eingeschränkt. Davon abgesehen ist eine vollständige und eindeutige Identifikation möglich, und die benötigte Dimension der Datenbasis ist durch die maximale Input-Dimension der Black-Boxes bestimmt.

Abbildung 8.3: Zu (8.1) äquivalente Hybridstruktur im Fall 1.2:  $d_h > d_v > d_y$ .**Fall 1.2:  $d_h > d_v$  und  $d_v > d_y$** 

Wir zerlegen diesmal

$$\begin{aligned} h &= (h_a, h_b, h_c), & h_a &\in \mathbb{R}^{d_h - d_v}, & h_b &\in \mathbb{R}^{d_y}, & h_c &\in \mathbb{R}^{d_v - d_y} \\ \varphi &= (\varphi_a, \varphi_b, \varphi_c), & h_a &= \varphi_a(u, v), & h_b &= \varphi_b(u, v), & h_c &= \varphi_c(u, v). \end{aligned}$$

und erhalten erneut eine zu (8.1) äquivalente Struktur:

$$\begin{aligned} u &= u(x), \\ v &= \varphi_{b,c}^v(u, h_b, h_c) =: \varphi^v(u, h_b, h_c), \\ h_a &= \varphi_a(u, v) = \varphi_a(u, \varphi_{b,c}^v(u, h_b, h_c)) =: \varphi^{h_a}(u, h_b, h_c), \\ y &= v^y(h_a, h_b, v), \\ h_c &= v^{h_c}(h_a, h_b, v), \end{aligned} \tag{8.3}$$

oder zusammengefasst

$$(h_a, y, h_c)(x, h_b, h_c) = \left( \varphi^{h_a}(u(x), h_b, h_c), v^{y, h_c}(\varphi^{h_a}(u(x), h_b, h_c), h_b, \varphi^v(u(x), h_b, h_c)) \right),$$

siehe Abb. 8.3. Analog zu Fall 1.1 haben wir hier  $(h_b, h_c) = (\varphi_b, \varphi_c)(u, v) = \varphi_{b,c}(u, v)$  zunächst durch  $v = \varphi_{b,c}^v(u, h_b, h_c)$  nach  $v$  aufgelöst und in  $h_a = \varphi_a(u, v)$  eingesetzt. Danach wurde  $v = v(y, h_a, h_b, h_c)$  durch  $(y, h_c) = v^{y, h_c}(h_a, h_b, v) = (v^y, v^{h_c})(h_a, h_b, v)$  gleichzeitig nach  $y$  und  $h_c$  aufgelöst. Diesmal konnten wir die Rückführung nicht komplett beseitigen. Es bleibt die  $(d_v - d_y)$ -dimensionale Rückführung  $h_c$  erhalten.

Trotzdem gelingt die Identifikation wie im vorangegangenen Fall 1.1. Die Zwischenmessung  $h_a$  identifiziert die Black-Box  $u$ . Danach ist auch die zweite Black-Box  $v$  zugänglich, ebenfalls mit der gleichen Einschränkung wie im Fall 1.1.

**Fall 2.1:  $d_h = d_v$  und  $d_h \geq d_u$** 

In diesem Fall existiert die folgende *nichttriviale* Kalibrierung: Seien  $u^* : \mathbb{R}^{d_x} \rightarrow \mathbb{R}^{d_u}$  und  $v^* : \mathbb{R}^{d_y} \times \mathbb{R}^{d_h} \rightarrow \mathbb{R}^{d_v}$  irgendwelche feste Black-Box-Funktionen, die der Input-Output-

Relation  $h^* : \mathbb{R}^{d_x} \times \mathbb{R}^{d_y} \rightarrow \mathbb{R}^{d_h}$  des Hybridmodells (8.1) genügen, d.h.

$$h^*(x, y) = \varphi(u^*(x), v^*(y, h^*(x, y))) \quad \text{für alle } x, y. \quad (8.4)$$

Sei ferner  $\rho : \mathbb{R}^{d_u} \rightarrow \mathbb{R}^{d_u}$  ein beliebiger Diffeomorphismus. Dann ist durch

$$\begin{aligned} u(x) &= (\rho \circ u)(x) \\ v(y, h) &= \varphi^v(\rho(\varphi^u(v^*(y, h), h)), h) \end{aligned} \quad (8.5)$$

eine weitere Lösung von (8.4) gegeben. Dabei existieren die Auflösungen  $\varphi^u, \varphi^v$  von  $\varphi$  nach  $u$  bzw.  $v$  für generische White-Boxes  $\varphi$ . Im Fall  $d_h > d_u$  muss  $h$  dazu allerdings auf den Bildbereich  $h^*(\mathbb{R}^{d_u}, y)$  eingeschränkt werden,  $v$  ist außerhalb dieses Bereiches unbestimmt (und beliebig).

Falls  $d_x = d_u$  bleibt also die Black-Box  $u$  sogar komplett unbestimmt. Wird hingegen  $u$  beliebig fixiert, kann  $v$  identifiziert werden.

### Fall 2.2.1: $d_h = d_v$ und $d_h < d_u$ und $d_v \leq d_y$

Wir lösen wieder wie im Fall 1.1 auf, diesmal allerdings ohne Zwischenmessung. Vielmehr erhalten wir mit der Zerlegung

$$y = (y_a, y_b), \quad y_a \in \mathbb{R}^{d_v}, \quad y_b \in \mathbb{R}^{d_y - d_v}.$$

die zu (8.1) äquivalente, rückführungsfreie, vorwärts verzweigte Struktur

$$\begin{aligned} u &= u(x), \\ v &= \varphi^v(u, h) = \varphi^v(u(x), h), \\ y_a &= v^{y_a}(y_b, h, v) = v^{y_a}(y_b, h, \varphi^v(u(x), h)), \end{aligned} \quad (8.6)$$

die in Abb. 8.4 dargestellt ist. Dabei ist auch wieder der Fall  $d_v = d_y$ , also  $y_a = y, y_b = 0$  eingeschlossen. Somit sind Satz 3.1 und Kapitel 5 anwendbar, wobei die Rang-Bedingung (5.10) gerade äquivalent zur in diesem Fall vorausgesetzten Dimensionsrelation  $d_h < d_u$  ist.

In der Tat gehen wir dazu analog Abschnitt 5.3 vor. Zunächst wählen wir aber  $y_b$  beliebig und halten es fest. Als Inputmenge wählen wir  $(x, h) \in \mathcal{M} = \mathcal{M}_x \times \mathcal{M}_h$  mit  $|\mathcal{M}_x| = \mu_x$  und  $|\mathcal{M}_h| = \mu_h$ . Insgesamt sind das also  $\mu = |\mathcal{M}| = \mu_x \mu_h$  Eingabewerte. Als Dimensionen der Jet-Räume bis zur N-ten Ordnung auf den endlichen Inputmengen, siehe (5.23), ergeben sich unter Beachtung von  $d_h = d_v$ :

$$\begin{aligned} J[u] &= \mu_x d_u \binom{N+d_x}{d_x}, \\ J[\varphi^v] &= \mu_x \mu_h d_h \binom{N+d_u+d_h}{d_u+d_h}, \\ J[v^{y_a}] &= \mu_x \mu_h d_h \binom{N+2d_h}{2d_h}. \end{aligned} \quad (8.7)$$

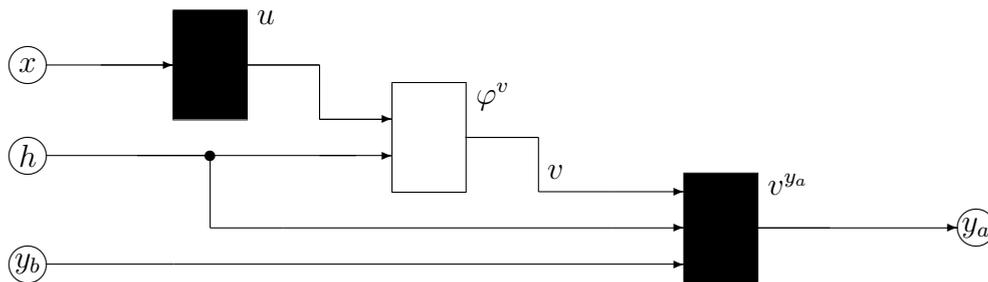


Abbildung 8.4: Zu (8.1) äquivalente Hybridstruktur im Fall 2.2.1:  $d_u > d_h = d_v \leq d_y$ .

Wir wissen schon aus Fall 2.1, dass  $d_u > d_h$  für die angestrebte Eindeutigkeit notwendig ist. Außerdem war es in diesem Fall vorausgesetzt. Daher können wir  $N$  groß genug wählen, so dass

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} N + d_u + d_h \\ d_u + d_h \end{pmatrix} > \begin{pmatrix} N + 2d_h \\ 2d_h \end{pmatrix}. \quad (8.8)$$

Danach wählen wir  $\mu_h$  groß genug, so dass

$$\frac{1}{2} \mu_h d_h \begin{pmatrix} N + d_u + d_h \\ d_u + d_h \end{pmatrix} > d_u \begin{pmatrix} N + d_x \\ d_x \end{pmatrix} \quad (8.9)$$

erfüllt ist. Zusammen implizieren die Bedingungen (8.8), (8.9) gerade die Rang-Bedingung aus Satz 3.1:

$$r \geq J[\varphi^v] > J[u] + J[v^{y_a}] \geq \max_{\varphi, u, v} r_{u, v} \quad (8.10)$$

für beliebige endliche Input-Mengen  $\mathcal{M}_x$  der Black-Box  $u$ . Somit ist die Black-Box  $u$  lokal eindeutig bestimmt für jede Wahl von  $y_b$  entlang der Datenbasis. Als benötigte Dimension ergibt sich wieder die Input-Dimension  $d_x$  der Black-Box  $u$ . Nach Bestimmung von  $u$  kann dann natürlich auch  $v$  per

$$v(y, h) = \varphi^v(u(x), h)$$

identifiziert werden. Die benötigte Datendimension ist  $d_y + d_h$ .

Im hier betrachteten Fall ist die Hybridstruktur (8.6) und somit auch (8.1) also für generische White-Box  $\varphi$  eindeutig identifizierbar. Wieder wird als Dimension der Datenbasis die maximale Dimension der zu identifizierenden Black-Boxes benötigt.

### Fall 2.2.2: $d_h = d_v$ und $d_h < d_u$ und $d_v > d_y$

In diesem Fall ist die Dimension des Inputs  $y$  nicht ausreichend, um wie im vorigen Fall eine äquivalente rückführungsfreie Struktur zu konstruieren. Eine rigorose Behandlung ist bisher nicht gelungen. Es liegt jedoch die Vermutung nahe, dass eine Abschätzung ähnlich dem vorigen Fall möglich bleibt und somit ebenfalls Eindeutigkeit der Identifizierung generisch gegeben ist.

**Fall 3.1:  $d_h < d_v$  und  $d_h \geq d_u$** 

In diesem Fall existiert dieselbe Kalibrierung wie im Fall 2.1. Zusätzlich ist die Auflösung von  $\varphi$  nach  $v$  in (8.5) mehrdeutig, so dass für gewähltes  $u$  eine  $(d_v - d_h)$ -dimensionale Familie von Auflösungen  $v$  existiert.

**Fall 3.2:  $d_h < d_v$  und  $d_h < d_u$** 

Auch dieser Fall hat sich bisher einer Klärung entzogen. Wieder ist keine äquivalente Auflösung möglich.

## Literatur

- [AR67] R. Abraham and J. Robbin. *Transversal Mappings and Flows*. Benjamin Inc., Amsterdam, 1967.
- [FGJ<sup>+</sup>02] B. Fiedler, V. Gelfreich, N. Jangle, S. Liebscher, and T. Marxen. *Strukturierte Hybridmodelle*. BMBF-Forschungsbericht, 2002.
- [FGM01] B. Fiedler, V. Gelfreich, and T. Marxen. *Strukturierte Hybridmodelle*. BMBF-Forschungsbericht, 2001.
- [FLA<sup>+</sup>03] B. Fiedler, S. Liebscher, A. Azouani, J. Blanca, S. Chen, and M. Georgi. *Strukturierte Hybridmodelle*. BMBF-Forschungsbericht, 2. Halbjahr 2003.
- [FLB<sup>+</sup>03] B. Fiedler, S. Liebscher, J. Blanca, M. Georgi, and N. Jangle. *Strukturierte Hybridmodelle*. BMBF-Forschungsbericht, 1. Halbjahr 2003.
- [FS03] B. Fiedler and A. Schuppert. *Local identification of scalar hybrid models with tree structure*. Technical Report A-03-03. Fachbereich Mathematik/Informatik der Freien Universität Berlin, 2003.
- [Sch96] A. Schuppert. New approaches to data-oriented reaction modelling. In *Proceedings of the 3rd Workshop on Modelling of Chemical Reaction Systems*. Springer-Verlag, Heidelberg, 1996.
- [Sch00] A. Schuppert. Extrapolability of structured hybrid models: A key to optimization of complex processes. In B. Fiedler et al., editor, *International Conference on Differential Equations*, pages 1135–1151. World Scientific Publ., Singapore, 2000.
- [Van82] A. Vanderbauwhede. *Local Bifurcation and Symmetry*. Pitman, Boston, 1982.