

Ansätze zur datengetriebenen Formulierung von Strukturhypothesen für dynamische Systeme

Christian Kühnert¹, Lutz Gröll², Michael Heizmann¹, Ralf Mikut²

¹Fraunhofer IOSB, Fraunhoferstraße 1, D-76131, Germany

Email: {christian.kuehnert, michael.heizmann}@iosb.fraunhofer.de

²Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Institut für Angewandte Informatik (IAI),

D-76021 Karlsruhe, P.O. Box 3640, Germany

Phone: (0721) 608-25731, Fax: (0721) 608-25702,

Email: {lutz.groell, ralf.mikut}@kit.edu

1 Einleitung

Ein wichtiger Teil der Systemtheorie beschäftigt sich mit der Modellierung und Identifikation dynamischer Systeme mit Anwendungen z. B. in der Systembiologie, Verfahrenstechnik oder für autonome Systeme. Modelle für diese Systeme sind durch Modellstruktur und Modellparameter charakterisiert. In der Regel wird eine Gütefunktion definiert, für die mit einer von vielen etablierten Methoden optimale Modellparameter bestimmt werden. Im Gegensatz hierzu basiert die Identifikation der Modellstruktur normalerweise auf dem Systemwissen eines Experten bzw. dem manuellen iterativen Prüfen und Verfeinern von Strukturhypothesen. Diese Vorgehensweise ist für komplexe Systeme und für Systeme, bei denen kaum Expertenwissen vorliegt, recht aufwändig. Deshalb ist ein automatisiertes Erkennen von Strukturen anhand von Messdaten erwünscht.

Vollautomatische Lösungen zur datengetriebenen Struktursuche (siehe Übersichten für nichtlineare Problemstellungen in [1, 2, 3]) basierend auf Zeitreihen aus Messdaten sind allerdings in der Praxis oftmals nicht nutzbar. Auftretende Probleme sind die Verletzung der rigiden Voraussetzungen zur Anwendbarkeit der Struktursucheverfahren, eine starke Variabilität des Systems (z. B. Zeitvarianz, komplizierte Nichtlinearitäten) sowie eine zu niedrige Qualität der Messdaten (z. B. wegen des Fehlens oder der Unterrepräsentation wesentlicher Arbeitspunkte und Dynamikbereiche). Bei solchen Systemen ist es allerdings möglich, anstelle der vollautomatisierten Lösung zum Erkennen der unterliegenden Struktur zumindest Strukturhypothesen zu generieren und bezüglich ihrer Prognosefähigkeit und Widerspruchsfreiheit anhand der Messdaten zu untersuchen. Das Ziel ist es hierbei, quantitative Aussagen zu möglichen Strukturen des zu identifizierenden Systems zu treffen und darauf aufbauend weitere Analysen durchzuführen. Mögliche Strukturhypothesen beinhalten beispielsweise paarweise (Un-)Abhängigkeiten der Prozessgrößen, Open- und Closed-loop-Strukturen, die Existenz dominanter Einflussgrößen oder kausale Abhängigkeiten.

Eine erste grundlegende Strukturinformation ist die Festlegung von Ein- und Ausgangsgrößen sowie von irrelevanten Größen des Systems und damit von Kausalitäten. Diese Festlegung bildet die Basis für alle folgenden Strukturhypothesen zur Systemordnung, zu Zeitverzögerungen und internen Strukturen sowie für die nachfolgenden Parameterschätzungen. Viele Verfahren, die interne Strukturen und Modellparameter bestimmen (wie z. B. Verfahren der Computational Intelligence wie Künstliche Neuronale Netze und Fuzzy-Systeme), setzen deshalb A-priori-Wissen über Ein- und Ausgangsgrößen voraus.

Beim Fehlen dieses A-priori-Wissens sind somit spezialisierte Verfahren für Kausalitätsuntersuchungen eine Möglichkeit, entsprechende Hypothesen aus Messdaten zu generieren.

Das Ziel dieses Beitrags besteht darin

- eine Übersicht über relevante Grundlagen und Methoden zu geben (Abschnitt 2), wobei insbesondere drei aus der Systemtheorie stammende Verfahren zur Untersuchung der Kausalität vorgestellt werden, und
- die Methoden anhand eines Benchmarks zu testen (Abschnitt 3), wobei bewusst auch Varianten unter Verletzung der Voraussetzung der Verfahren mit untersucht werden.

2 Grundlagen und Methoden

Im folgenden Abschnitt wird zunächst die hier verwendete Kausalitätsdefinition erläutert (Abschnitt 2.1). Diese Definition bildet die Basis für systemtheoretisch motivierte Verfahren: Kreuzkovarianzfunktionen (Abschnitt 2.2), Granger-Verfahren (Abschnitt 2.3) und n4sid (Abschnitt 2.4). Anschließend stellt Abschnitt 2.5 weitere existierende Verfahren, bisherige Anwendungen und Software vor.

2.1 Definition Kausalität und systemtheoretische Konsequenzen

Definition (kausales System): Ein zeitinvariantes System heißt kausal, wenn für alle Eingangssignale mit der Eigenschaft $u_1(t) \equiv u_2(t)$ für $t \leq t_1$ bei beliebigem t_1 die entsprechenden Ausgangssignale für $0 \leq t \leq t_1$ die Eigenschaft $y_1\{x_0, u_1(t)\} \equiv y_2\{x_0, u_2(t)\}$ haben (x_0 : Anfangszustand). Systeme, die nicht kausal sind, werden auch akausal genannt.

Bei kausalen Systemen dürfen also die Werte der Eingangssignale in $t > t_1$ keinen Einfluss auf den Verlauf der Ausgangssignale bis t_1 haben. Außerdem ist ein System genau dann kausal, wenn die Impulsantwort für $t < 0$ Null ist.

Diese Kausalitätsdefinition hat eine Reihe systemtheoretischer Konsequenzen. Für alle statischen Abbildungen $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ liegt Kausalität vor, egal ob u oder y als Eingang betrachtet wird, da in beiden Fällen der Verlauf des jeweiligen Ausgangssignals nicht von zukünftigen Werten, sondern ausschließlich vom aktuellen Wert abhängt. Auch bei einem idealen Differenzierer oder Integrierer kann keine Ursache-Wirkungs-Beziehung allein aus den Daten abgeleitet werden. $y(t) = \frac{d}{dt}u(t)$ als auch $u(t) = \int_0^t y(\tau)d\tau$ sind gleichermaßen kausale Systeme, die den Daten genügen. Außerdem sind alle linearen zeitkontinuierlichen Systeme mit einem Ein- und einem Ausgang ohne Totzeitelemente kausal, weil $Y(s) = G(s)U(s)$ und $U(s) = G^{-1}(s)Y(s)$ gleichermaßen die Daten erklären ($U(s), Y(s)$: Laplace-transformierte Eingangs- und Ausgangssignale). Hier kann nur die Realisierbarkeit der Übertragungsfunktion $G(s)$ untersucht werden (Ordnung des Zählerpolynoms \leq Ordnung des Nennerpolynoms), was aber zunächst keine Aussage bezüglich kausaler Eigenschaften beinhaltet.

Solche Schwierigkeiten, für einige Systeme sinnvolle physikalisch motivierte Festlegungen zu Ein- und Ausgangsgrößen zu treffen, führten in der Systemtheorie zur Einführung

des Behavioral Approaches [4], der eine stärkere Orientierung an physikalischen Realitäten via bidirektionalen Schnittstellen und deren strukturierter Zusammenschaltung vorschlägt. Leider gibt es dazu bislang kaum Verfahren zur Identifikation aus Daten (außer in Arbeiten zu linearen Systemen [5]), weshalb dieser Ansatz hier nicht weiter verfolgt wird.

Eine andere Sichtweise auf den Begriff der Kausalität eröffnet das probabilistische Kausalprinzip. Dessen zentrale Idee ist, dass eine Ursache C die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten des Effekts E erhöht. Somit kann C nur dann eine Ursache von E sein, wenn $P(E = 1|C = 1) > P(E = 1|C = 0)$ gilt. Pearl [6] weist allerdings darauf hin, dass ein Erhöhen der Wahrscheinlichkeit nicht durch reine Beobachtungen beschrieben werden kann, sondern nur durch eine externe Intervention. Deshalb führt er den do-Operator ein, der C von außen auf einen festen Wert zwingt. C hat somit einen kausalen Einfluss auf E , wenn $P(E = 1|\text{do}(C = 1)) > P(E = 1|\text{do}(C = 0))$ gilt.

2.2 Kausalitätsuntersuchungen mit Kreuzkovarianzfunktionen

Die Kreuzkovarianzfunktion (KKF) ist ein klassisches Maß für die Abhängigkeit zweier Zeitreihen. Sie bewertet die lineare Korrelation zweier Signale u und y mit einer diskreten Zeitverzögerung λ . Unter den Voraussetzungen, dass

- das Signal u eine Realisierung eines stationären, weißen Rauschprozesses ist und
- das u und y verbindende System linear und stabil ist,

kann aus einer kausalen KKF (Null für negative λ , ungleich Null für mindestens ein nichtnegatives λ) auf die Kausalität des Systems geschlossen werden. Eine Umkehr (Null für positive λ , ungleich Null für mindestens ein nichtpositives λ) steht für ein kausales System mit Eingang y (mit stationärem, weißen Rauschen für y) und Ausgang u . In der Praxis muss die Kreuzkovarianzfunktion $\hat{c}_{UY}[\lambda]$ meist aber aus einer einzigen Messung der Zeitreihen von $\{u[1], \dots, u[N]\}; \{y[1], \dots, y[N]\}$ mit N Abtastzeitpunkten geschätzt werden. Hierfür bietet sich für ergodische Prozesse (Mittelwert und Varianz für u und y sind stationär, Zeit- und Ensemblemittelung sind gleich) eine Schätzung über Zeitmitteilung an:

$$\hat{c}_{UY}[\lambda] = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N-\lambda} (u[k] - \hat{\mu}_U)(y[k + \lambda] - \hat{\mu}_Y) \quad \lambda = 0, \dots, N - 1 \quad (1)$$

mit

$$\hat{\mu}_U = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N u[k], \quad \hat{\mu}_Y = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N y[k]. \quad (2)$$

Alternative Definitionen, die in (1) statt des Faktors $1/N$ den Faktor $1/(N - \lambda)$ oder $1/(N - \lambda - 1)$ bzw. für jedes λ separate Mittelwerte verwenden, weisen Artefakte (z. B. betragsgroße Werte, hohe Varianz) für betragsgroße λ auf. Dafür unterdrücken sie die Auswirkungen von Instationaritäten im Signal und Senken den Bias insbesondere für betragsgroße λ . In Abschnitt 3 wird untersucht, inwiefern Verletzungen der Bedingungen, welche in der Praxis immer der Fall sind, zu irreführenden Ergebnisse aus der Schätzung in (1) führen können.

Die KKF nach (1) ist in MATLAB und Gait-CAD mit der Funktion xcorr (Einstellung "biased") implementiert. Ferner werden zur vereinfachten Interpretation der Ergebnisse die Kreuzkovarianzfunktionen bezüglich der Varianz normiert.

2.3 Kausalitätsuntersuchungen mit dem Granger-Verfahren

Die ursprüngliche Idee der Granger-Kausalität stammt aus dem Bereich der Ökonometrie und wurde von Clive Granger [7] entwickelt. Hierbei wird angenommen, dass ein Signal u kausalen Einfluss auf ein zweites Signal y hat, wenn die Vergangenheitswerte von u und y einen zukünftigen Wert von y besser prognostizieren können als nur unter Verwendung vergangener Werte von y . Dies kann unter Berechnung von autoregressiven Modellen und mittels Out-of-sample-Tests überprüft werden [8]. Bei diesen Tests wird angenommen, dass $y[k]$ unbekannt ist und anhand von vorhergehenden Werten prädiziert wird. Wenn die Summe der Prädiktionsfehlerquadrate $|y[k] - \hat{y}[k]|^2$ unter zusätzlicher Verwendung von u signifikant geringer ist, beeinflusst u die Variable y Granger-kausal:

$$\varepsilon_1[k] = y[k] - \hat{y}_1[k] = y[k] - \hat{a}_{10} - \sum_{i=1}^n \hat{a}_{1i}y[k-i], \quad (3)$$

$$\varepsilon_2[k] = y[k] - \hat{y}_2[k] = y[k] - \hat{a}_{20} - \sum_{i=1}^n \hat{a}_{2i}y[k-i] - \sum_{i=1}^n \hat{b}_{2i}u[k-i] \quad (4)$$

mit geschätzten Parametern \hat{a}_{1i} , \hat{a}_{2i} , \hat{b}_{2i} und der Ordnung n , welche über das AIC (Akaike-Informationskriterium, [9]) unter Vorgabe einer minimalen und einer maximalen Ordnung bestimmt wird. Wenn hierbei die Differenz

$$Q_{G,12} = \sum_{k=n+1}^N \varepsilon_1^2[k] - \sum_{k=n+1}^N \varepsilon_2^2[k] \quad (5)$$

signifikant größer Null ist, übt u kausalen Einfluss auf y aus. Für den Test auf einen direkten kausalen Einfluss von u auf y unter Kenntnis eines dritten Signals z wird das Modell durch

$$\varepsilon_3[k] = y[k] - \hat{y}_3[k] = y[k] - \hat{a}_{30} - \sum_{i=1}^n \hat{a}_{3i}y[k-i] - \sum_{i=1}^n \hat{b}_{3i}u[k-i] - \sum_{i=1}^n \hat{c}_{3i}z[k-i] \quad (6)$$

erweitert. Entsprechend wird die Differenz $Q_{G,23} = \sum_{k=n+1}^N \varepsilon_2^2[k] - \sum_{k=n+1}^N \varepsilon_3^2[k]$ ausgewertet. Dabei ist in der Praxis zu prüfen, inwieweit das Erweitern der Modelle um die Terme $\hat{b}_{20}u[k]$ bzw. $\hat{b}_{30}u[k]$, $\hat{c}_{30}z[k]$ für sprunghafte Systeme die Ergebnisse verbessert.

Die Auswertungen in Abschnitt 3 erfolgen mittels MATLAB und Gait-CAD unter Einbindung der GCCA-Toolbox [9].

2.4 Kausalitätsuntersuchungen mit dem n4sid-Verfahren

Das n4sid-Verfahren (Numerical algorithms for subspace state space system identification) [10] gehört zur Klasse der sogenannten Unterraum-Verfahren. Der Algorithmus bestimmt in einem ersten Schritt eine Zustandsfolge durch Projektion der Ein-Ausgangs-Daten. Anhand der Singulärwerte, die ein Maß für die Dimension des Raumes sind, in dem die Zustandstrajektorien liegen, wird die Systemordnung bestimmt. Mit Hilfe des auf diese Dimension reduzierten Zustandsraums werden die Systemmatrizen geschätzt. Hierbei können diverse Optionen etwa zum Garantieren der Stabilität integriert werden. Bei der Anwendung für Kausalitätsuntersuchungen muss zunächst eine hypothetische Zuordnung

von Ein- und Ausgangsgrößen erfolgen, die dann über die Prognosefehler der geschätzten Modelle überprüfbar ist. In MATLAB/Gait-CAD wird die Funktion "n4sid" der MATLAB System Identification Toolbox in der Option automatischer Ordnungssuche verwendet. Damit werden Totzeiten automatisch mit abgedeckt.

2.5 Übersicht über weitere existierende Verfahren, Anwendungen und Software

Die in den Abschnitten 2.2 bis 2.4 vorgestellten Verfahren beruhen auf linearen Modellansätzen. Nichtlinearitäten können nur extern durch statische nichtlineare Transformationen der Zeitreihen berücksichtigt werden. Das schränkt die Erweiterbarkeit auf die Klasse der Wiener- und Hammerstein-Modelle (Reihenschaltungen einer statischen Nichtlinearität und eines linearen zeitinvarianten dynamischen Systems) ein. Allerdings müssen "passende" statische Nichtlinearitäten vorgegeben werden, wobei auch bei Fehlen der exakten Nichtlinearitäten u. U. vereinfachte Zusammenhänge erkannt werden (z. B. Erkennung der Kausalität bei statischen kubischen Termen am Systemausgang durch lineare Schätzer). Die numerische Gutartigkeit und die numerische Effizienz der Verfahren bleibt bei den statischen nichtlinearen Erweiterungen im Wesentlichen erhalten.

Außerdem gibt es eine Reihe weiterer Zugänge, die in parametrische und nichtparametrische Zugänge eingeteilt werden. Parametrische Verfahren schätzen wie das Granger-Verfahren oder n4sid die Parameter für ein Modell aus einer vorgegebenen Modellklasse. Beispiele sind Verfahren wie LOLIMOT und CART, die mit Hilfe einer baumbasierten Heuristik Bereiche mit großen Modellfehlern sukzessive in separate Teilmodelle mit linearer Modellstruktur aufteilen [11, 12, 13]. Diese Heuristik bewirkt letztlich eine Strukturierung, weil bestimmte Eingangsgrößen nicht zur Aufteilung der Bereiche verwendet werden. Ähnlich funktioniert die Identifikation von Fuzzy-Regressionsmodellen über Takagi-Sugeno-Modelle. Hierbei wird meist im Raum der Ein- und Ausgangsgrößen geclustert und für jedes der Cluster ein einfaches lokal gültiges lineares Modell angelehrt (siehe z. B. [14, 15]). Genetische Algorithmen (siehe z. B. [16, 17, 18]) kodieren zunächst unterschiedliche Varianten der Modellstruktur und die zugehörigen Parameter. Die Bewertung basiert auf der Übereinstimmung mit Daten anhand von Prognosefehlern oder ähnlichen Maßen sowie Straffunktionen für zu hohe Komplexität. Problematisch ist hier insbesondere der sich ergebende große Suchraum, der die Konvergenz gegen gute Lösungen erschwert.

Eine weitere Möglichkeit zum Erkennen kausaler Abhängigkeiten bieten Bayes-Netze (siehe z. B. [19], [20]). Hierbei handelt es sich um gerichtete azyklische Graphen, bei denen die Knoten Zufallsvariablen und die Kanten jeweils bedingte Abhängigkeiten zwischen den Variablen darstellen. Jeder Knoten des Netzes wird durch eine bedingte Wahrscheinlichkeitsverteilung beschrieben, wobei die Werte der Zeitreihen in der Regel diskretisiert werden. Werden die bedingten Wahrscheinlichkeitsverteilungen der einzelnen Knoten miteinander multipliziert, so entsteht die gemeinsame Wahrscheinlichkeitsverteilung des azyklischen Graphen. Durch den Einsatz von Suchverfahren (siehe z. B. [21, 22]) lässt sich die wahrscheinlichste Struktur des Graphen bestimmen. Die gefundenen Kanten können als Kausalitätsrichtungen interpretiert werden.

Für viele der genannten Verfahren existieren verschiedene Software-Pakete, die das Testen von Strukturhypothesen unterstützen, siehe z. B.

- Granger Causal Connectivity Analysis (GCCA)¹ (Algorithmen für das Testen der Granger-Kausalität im Zeit- und Frequenzbereich; MATLAB-basiert, open source, Beschreibung siehe [9]),
- System Identification Toolbox (kommerzielle MATLAB-Toolbox, ARMAX-Modelle, Unterraummethoden wie "n4sid", Implementierung der Algorithmen aus [23]),
- Tstool² (Softwarepaket für die nichtlineare Zeitreihenanalyse inkl. der Rekonstruktion von Totzeiten, Lyapunov-Exponenten, fraktalen Dimensionen, Informationstheoretische Maße, Surrogate data tests, Nearest-Neighbor-Verfahren, Return times, Poincaré-Schnitt; MATLAB-basiert, open source, Beschreibung siehe [2]),
- TISEAN³ (stand-alone, open source, [24]),
- Eureqa⁴ (stand-alone, open source, [2]),
- PottersWheel⁵ (Struktursuche und Parameteridentifikation für die Systembiologie und Chemie; MATLAB-basiert, frei für Forschung und Lehre, Beschreibung siehe [25]) und
- Bayes Net Toolbox⁶ (Erstellen von dynamischen und statischen Bayes-Netzen, MATLAB-basiert, open-source, Beschreibung unter [20]).

Andere Toolboxen sind stärker auf einzelne Anwendungen konzentriert, wie z. B. EEGLAB⁷ für die Analyse von elektroenzephalographischen Daten (EEG), oder enthalten lediglich einzelne Verfahren wie nichtlineare Abhängigkeitsmaße⁸ [26]. Außerdem existieren zahlreiche Data-Mining-Verfahren und -Tools (siehe Übersichten in [27, 28]), die aber eher auf die Mustererkennung in Einzelmerkmalen und Zeitreihen zielen.

Praktische Anwendungen der Struktursuche beschränken sich bislang meist auf relativ einfache Benchmarks mit bekanntem Verhalten und wenigen Ein- und Ausgangsgrößen oder auf ausgewählte Aspekte aus größeren Anwendungsbereichen mit unbekannter Struktur, wie z. B. für die Modellierung eines Pendels [2, 29], eines Hydraulikventils [30], Biotechnologische Prozesse [16, 17], Chemische Prozesse [31], Fragestellungen in der Systembiologie [29, 32, 33, 34], Ökologie [29] und Epilepsie-Simulation in der Schwangerschaft [35]. Eine Übersicht über verschiedene Benchmarkdatensätze für die Struktur- und Parameteridentifikation von biologisch motivierten (meist nichtlinearen Systemen) aus Zeitreihen findet sich in [36]⁹. Einige Arbeiten versuchen, verschiedene Struktursucheverfahren anhand solcher Benchmarks zu vergleichen, siehe z. B. [34] für einen Vergleich von Granger-Kausalität und Dynamischen Bayes-Netzen und [36] für eine Auflistung bester bislang gefundener Ergebnisse für verschiedene Benchmarks verbunden mit den jeweiligen Verfahren.

3 Anwendung auf Testsystem

Da die vorgestellten Verfahren jeweils unterschiedliche Voraussetzungen bezüglich der System- und Signalstruktur annehmen, wird zur Untersuchung ein System verwendet,

¹<http://www.informatics.sussex.ac.uk/users/anils>

²<http://www.physik3.gwdg.de/tstool/>

³http://www.mpipks-dresden.mpg.de/~tisean/Tisean_3.0.1/index.html

⁴http://creativemachines.cornell.edu/eureqa_download

⁵<http://www.potterswheel.de>

⁶<http://www.cs.ubc.ca/~murphyk/Software/BNT/bnt.html>

⁷<http://sccn.ucsd.edu/eeglab/>

⁸<http://www.vis.caltech.edu/~rodri/software.htm>

⁹<http://www.odeidentification.org>

welches mit für die Verfahren nicht-idealen Eingangssignalen angeregt und bezüglich seiner Systemstruktur verändert wird. Das Ziel ist zu untersuchen, welche der drei vorgestellten Verfahren bei den jeweiligen Eingangssignalen und Systemstrukturen verlässliche Kausalhypothesen generieren.

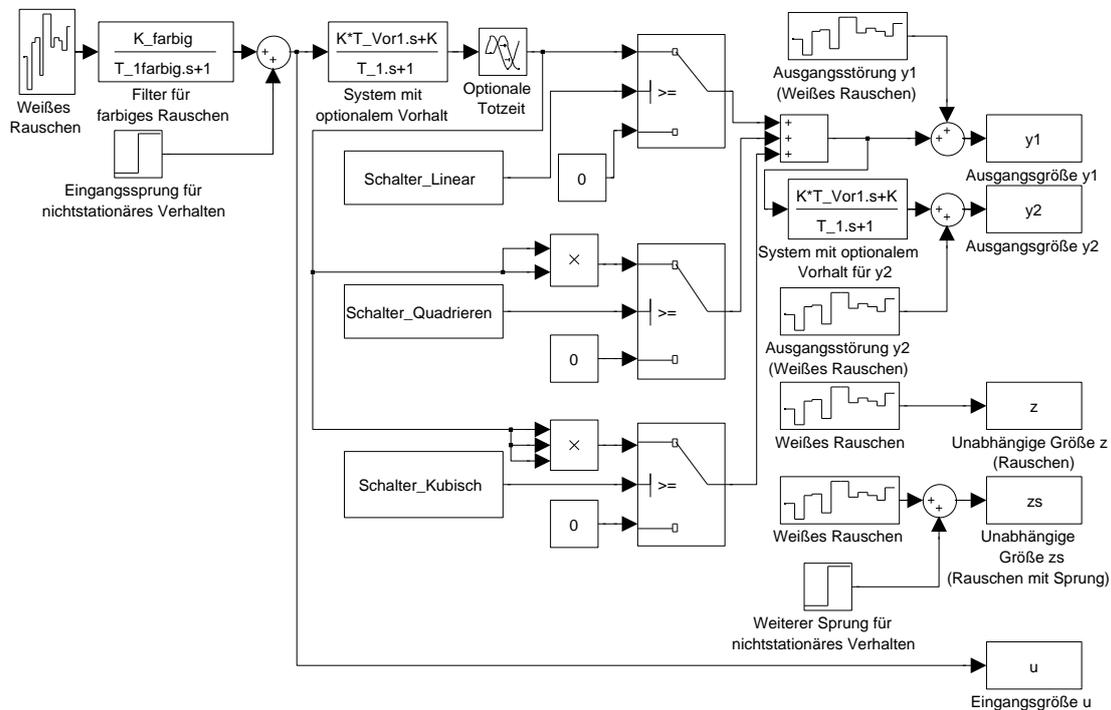


Abbildung 1: Simulink-Modell des Testsystems

Das verwendete System gemäß Abb. 1 wird in Simulink simuliert. In der Basiskonfiguration besteht es aus einem PT1-System ($K = 10, T_1 = 1$) mit der in allen Varianten gültigen Abtastzeit für die Zeitreihen $T_A = 0.3$. Am Eingang wirkt weißes Rauschen (Leistung 0.1, Abtastzeit für das weiße Rauschen $T_{AWR} = 0.1$); dem Ausgang y_1 wird weißes Rauschen überlagert (Leistung 0.01, $T_{AWR} = 0.1$). Ein zweiter Ausgang y_2 schließt sich an y_1 an und verwendet ein weiteres PT1-System mit den gleichen Parametern wie das erste. Auch diesem Eingang wird weißes Rauschen überlagert (Leistung 0.01, $T_{AWR} = 0.1$). Außerdem existieren zwei nicht mit den anderen Größen verbundene separate Quellen mit weißem Rauschen z und z_s (Leistung 0.1, Abtastzeit für das weiße Rauschen $T_{AWR} = 0.1$), wobei auf z_s zusätzlich zum Zeitpunkt $t = 250$ ein Sprung mit der Amplitude $z_{s,Sprung} = 10$ additiv aufgeschaltet wird.

Im Folgenden werden mehrere Varianten untersucht:

- Basiskonfiguration,
- zusätzliche Totzeit $T_{Tot} = 1$ ($T_{Tot} = 0$ in allen anderem Varianten),
- farbiges Eingangsruschen durch ein zusätzliches Tiefpassfilter 1. Ordnung ($K_{farbig} = 1, T_{1farbig} = 5; T_{1farbig} = 0$ in allen anderen Varianten),
- überlagerter Eingangssprung der Amplitude $u_{Sprung} = 10$ nach $t = 500$, um ein nichtstationäres Verhalten zu erzielen ($u_{Sprung} = 0$ in allen anderem Varianten),
- zusätzlicher Vorhalt 1. Ordnung für beide PT1-Systeme ($T_{Vor1} = 5; T_{Vor1} = 0$ in allen anderen Varianten) zum Erzeugen eines sprunghaften Verhaltens,

- f. Quadrierer vor y_1 zur Erzeugung eines nichtlinearen Verhaltens,
- g. Kubierer vor y_1 zur Erzeugung eines nichtlinearen Verhaltens und
- h. Quadrierer + Kubierer vor y_1 zur Erzeugung eines nichtlinearen Verhaltens.

Alle folgenden Auswertungen wurden mit der MATLAB-Toolbox Gait-CAD [37] unter Verwendung der GCCA-Toolbox [9] durchgeführt.

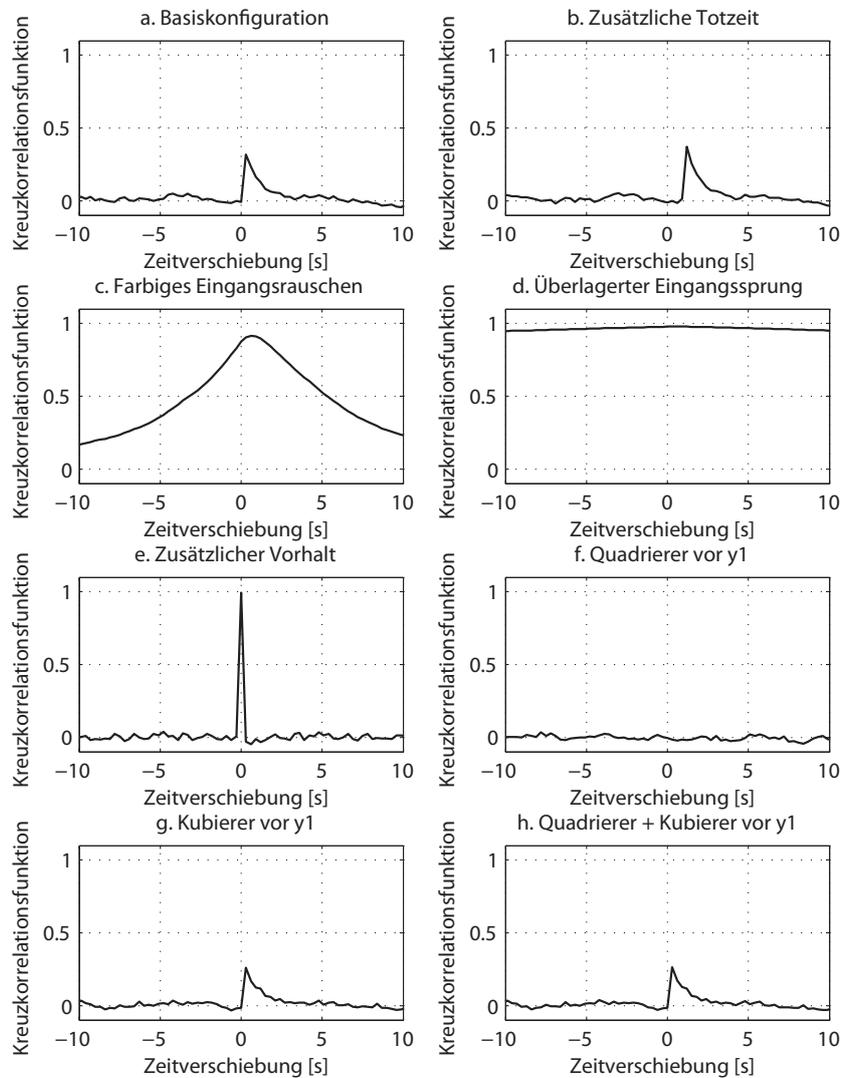


Abbildung 2: Normalisierte Kreuzkovarianzfunktionen zwischen u und y_1 für die Varianten a. bis h.

Die gemäß (1) geschätzten und normalisierten Kreuzkovarianzfunktionen zeigt Abb. 2. Systemtheoretisch ist die Kreuzkovarianzfunktion im Fall weißen Eingangsrauschens proportional zur Gewichtsfunktion (je nach Normierung). Dieser Sachverhalt ist in den Varianten a. und b. gut zu erkennen, weshalb die Richtung der Kausalität direkt ablesbar ist. In Variante c. überträgt sich das stark autokorrelierte farbige Eingangsrauschen auf den Ausgang, so dass die systembedingte Verschiebung in der KKF nur schwer erkennbar ist. Bei

Variante d. verursacht der Sprung hohe KKF-Werte in beide Richtungen der Zeitverschiebung, die Kausalität ist praktisch nicht erkennbar. Das Verhalten bei den Varianten c. und d. zeigt, dass das Erkennen von Kausalitäten in Messdaten mittels KKF bei Verletzung der vorausgesetzten Signal- und Systemstrukturen schnell zu irreführenden Ergebnissen führen kann. In Variante e. dominiert der direkte Durchgriff des sprungfähigen Systems. In Variante f. scheitert die lineare KKF verfahrensbedingt an der für sie nicht erkennbaren Nichtlinearität. In den Varianten g. und h. profitiert sie von der Tatsache, dass lineare und kubische Funktionen miteinander korrelieren und so zumindest die richtige Kausalitätsrichtung erkannt wird, obwohl es sich um ein nichtlineares System handelt.

Das Erkennen quadratischer Nichtlinearitäten setzt A-priori-Wissen voraus, indem die Zeitreihe $u^2[k]$ als zusätzliche Zeitreihe berechnet wird. Bei der Berechnung der Kreuzkovarianzfunktion zwischen u^2 und y_1 kann nun in der Variante f. der lineare Zusammenhang zwischen u^2 und y_1 erkannt werden, während umgekehrt der nichtlineare Zusammenhang zwischen u^2 und y_1 in der Basiskonfiguration unentdeckt bleibt (Abb. 3).

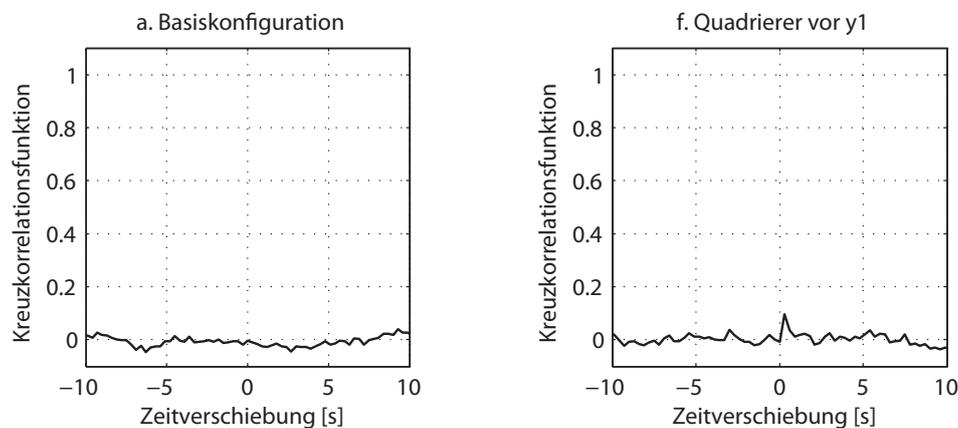


Abbildung 3: Normalisierte Kreuzkovarianzfunktionen zwischen u^2 und y_1 für die Varianten a. und f.

Die Ergebnisse der Kausalitätsuntersuchungen mit dem Granger-Verfahren zeigt Abb. 4. Zunächst werden mögliche Paare von Ein- und Ausgangsgrößen als Single-Input-Single-Output-Systeme (SISO) untersucht. Die Kausalitätsdiagramme enthalten auf der x -Achse potenzielle Eingangs-, auf der y -Achse potenzielle Ausgangsgrößen. Dunkel eingefärbte Felder kennzeichnen die Relevanz der Kausalitätsrichtung gemessen durch $Q_{G,12}$ in (5). Für die maximale Systemordnung wurde ein Wert von $n_{max} = 12$ gewählt. Die Simulationsuntersuchungen zeigen, dass zu große Werte für die maximale Systemordnung (ab ca. 20) numerische Probleme und ein Nichterkennen kausaler Zusammenhänge bewirken. In allen Varianten mit linearen Systemen (a.-e.) zeigt das Granger-Verfahren seine Leistungsfähigkeit, indem es die richtige Kausalitätsrichtung erkennt. Für das nichtlineare System (f.) ist das Verfahren aufgrund der linearen Struktur in den Gleichungen (3) und (4) nicht geeignet. Allerdings wird der Zusammenhang zur quadrierten Zeitreihe u^2 sicher erkannt. Für g. und h. wird wie in der Kreuzkovarianzanalyse der kubische Term erfolgreich durch einen linearen approximiert, so dass zumindest die Kausalitätsrichtung erkannt wird.

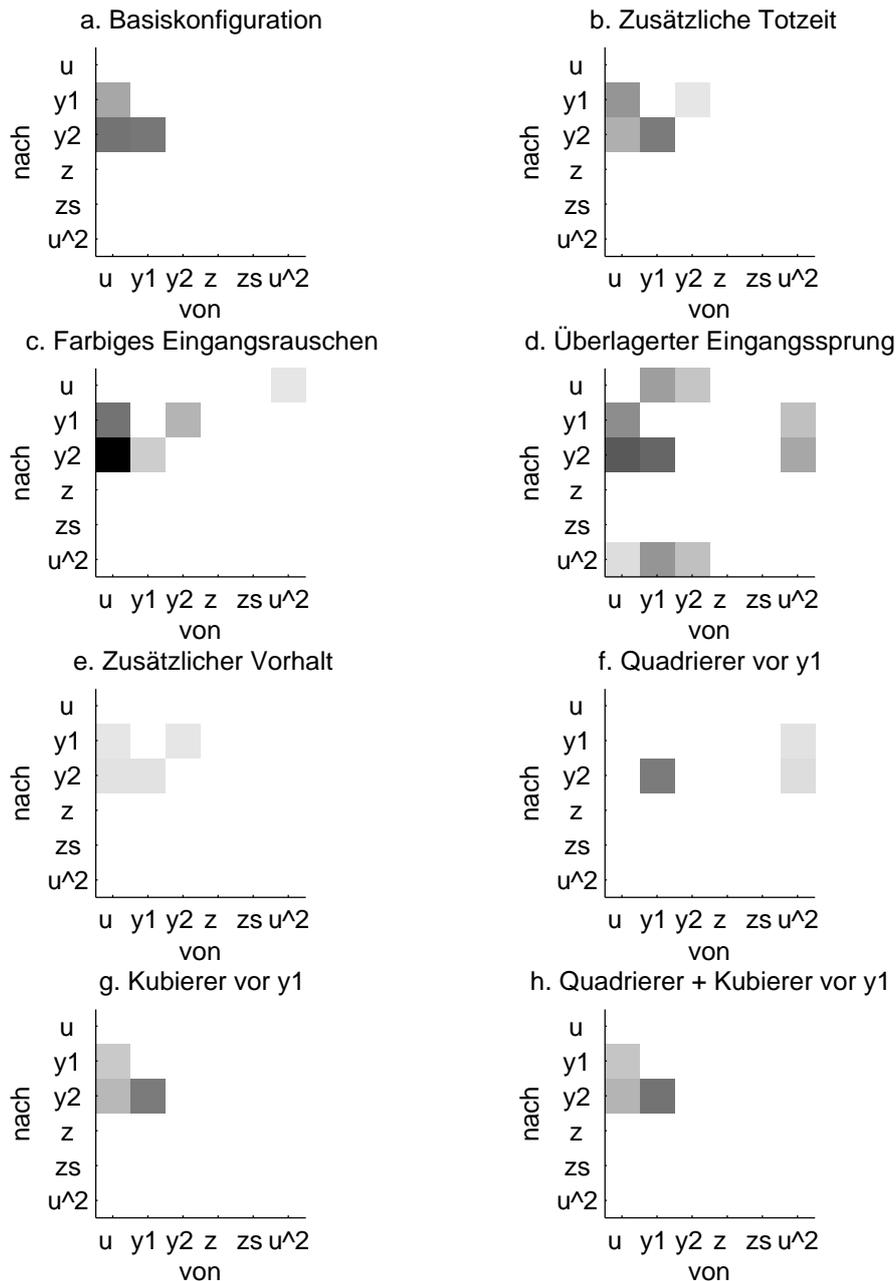


Abbildung 4: Granger-Verfahren (SISO-Systeme) für die Varianten a. bis h.

Die Unterschiede zur Untersuchung kompletter Multiple-Input-Multiple-Output-Systeme (MIMO) mit dem Granger-Verfahren zeigt Abb. 5. Dabei werden parallel alle Größen auf die Eignung als Ein- und Ausgangsgrößen untersucht, wobei Redundanzen berücksichtigt werden. Zunächst bleibt festzuhalten, dass in allen Fällen nicht erkannt wird, dass u nur indirekten Einfluss auf y_2 über y_1 besitzt. Dies lässt sich dadurch begründen, dass das Testsystem keine additiven Störungen zwischen Eingang und Ausgang besitzt und somit keine bedingten Abhängigkeiten erkannt werden können. Des Weiteren wird in allen Fällen erkannt, dass die zwei Rauschquellen z, z_s weder Eingangs- noch Ausgangsgrößen des Systems darstellen. Im Vergleich zum SISO-System ist besonders Fall d. interessant, da die dort falsch erkannten Einflüsse herausgerechnet werden. In Fall e. werden aller-

dings die im SISO-System noch schwach erkannten Einflüsse als nicht mehr signifikant festgestellt.

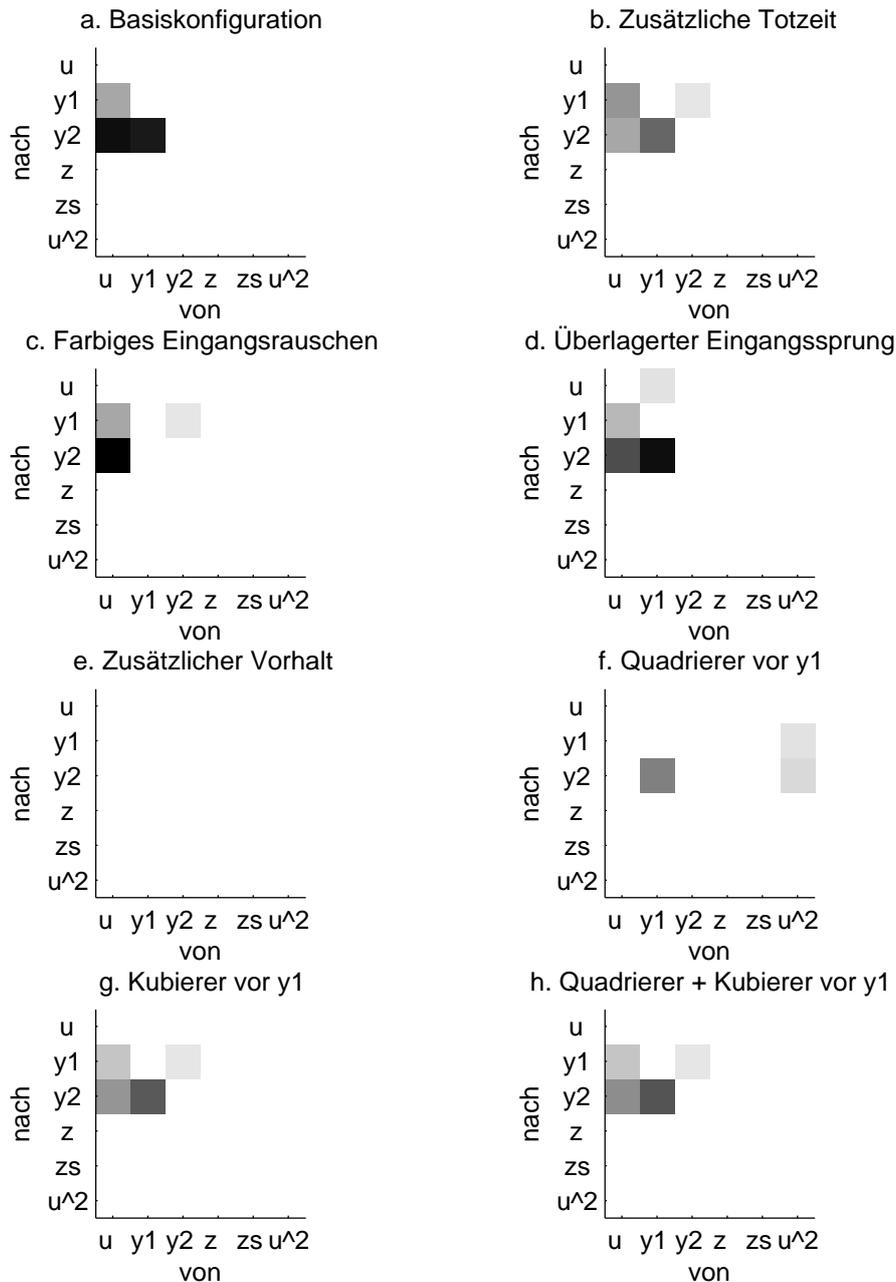


Abbildung 5: Granger-Verfahren (MIMO-Systeme) für die Varianten a. bis h.

Die Ergebnisse der Kausalitätsuntersuchungen mit dem n4sid-Verfahren ohne die Ausgangsgröße y_2 zeigt Abb. 6. Die Kausalitätsdiagramme enthalten auf der x -Achse potenzielle Ausgangsgrößen, die y -Achse zeigt die prozentuale Verbesserung einer Einschrittprognose mit allen anderen Größen als Eingangsgrößen gegenüber einer Schätzung mit einem rein autoregressiven Modell (3). n4sid erkennt die Ausgangsgröße y_1 in den Varianten a.-d., g.-h. In der Variante e. liefert wegen der starken autokorrelativen Kopplung von y_1 kein weiterer Eingang eine relevante Verbesserung, weswegen der Ausgang nicht

erkannt wird. Für das nichtlineare System (f.) ist das Verfahren aufgrund der angenommenen linearen Zustandsraumstruktur ungeeignet. Wenn die zweite Ausgangsgröße y_2 mit aufgenommen wird (nicht bildlich dargestellt), erkennt n4sid wegen der starken Kopplung zwischen y_1 und y_2 in den Varianten a., b., d., f.-h. nur noch y_2 als Ausgangsgröße. In der Variante e. wird kein Ausgang, in der Variante c. werden y_1 und y_2 als relevante Ausgänge erkannt.

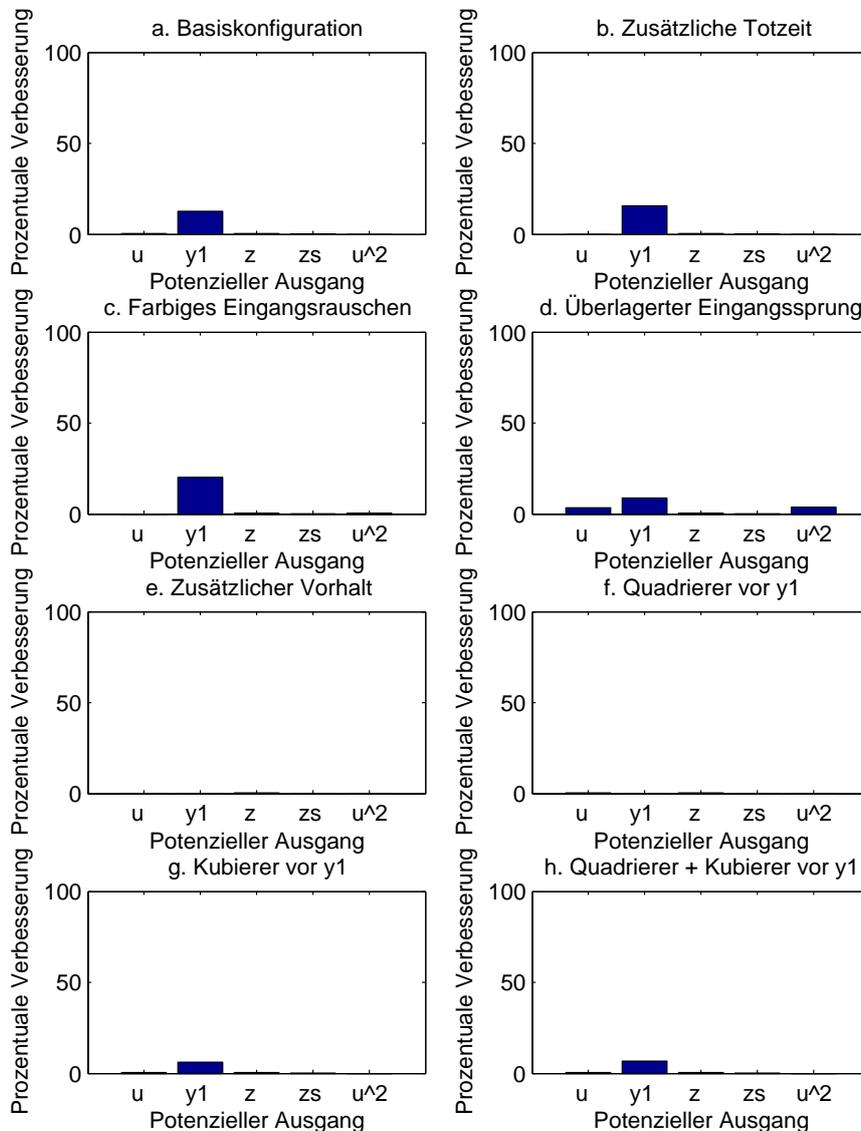


Abbildung 6: n4sid-Verfahren für die Varianten a. bis h. ohne y_2

Tabelle 1 fasst die Ergebnisse des vorherigen Abschnitts zusammen. Bei dem verwendeten Simulink-Modell können alle drei untersuchten Verfahren kausale Abhängigkeiten in der Basiskonfiguration, bei vorhandenem Kubierer und bei vorhandenen Totzeiten erkennen. Zudem zeigen alle Verfahren Probleme bei zusätzlichem Vorhaltglied und bei quadratischer Nichtlinearität. Im Vergleich der Verfahren untereinander zeigt sich, dass die Granger-Kausalität gegenüber KKF und n4sid robuster gegenüber nicht idealen Voraussetzungen ist. Trotz überlagertem Eingangssprung wird von der Granger-Kausalität als einziges die richtige Kausalrichtung erkannt, im Vergleich zu n4sid ist es noch bedingt

möglich einen zusätzlichen Vorhalt zu erkennen. Die KKF zeigt bei der Verletzung der erwarteten Signal- und Systemannahmen die meisten Probleme, da in den meisten Fällen der kausale Einfluss entweder kaum oder gar nicht mehr aus den Daten ablesbar ist. Der Vorteil der KKF liegt aber darin, dass sie ein einfach zu interpretierendes Ergebnis liefert. Bei der Granger-Kausalität und bei n4sid müssen hingegen Prognosefehler berechnet und ausgewertet werden.

Tabelle 1: Möglichkeiten zum eindeutigen Erkennen kausaler Abhängigkeiten in dynamischen Systemen am Beispiel des Benchmarks. ✓: gute Erkennung, (✓): bedingt taugliche Erkennung, -: keine Erkennung, (*): Erkennung bei zusätzlichen A-priori-Informationen, hier: Wissen über mögliche statische Nichtlinearitäten

| | KKF | Granger-Kausalität | n4sid |
|---------------------------------|-------|--------------------|-------|
| Basiskonfiguration | ✓ | ✓ | ✓ |
| Zusätzliche Totzeit | ✓ | ✓ | ✓ |
| Farbiges Eingangsruschen | (✓) | ✓ | ✓ |
| Überlagerter Eingangssprung | (✓) | ✓ | (✓) |
| Zusätzlicher Vorhalt | (✓) | (✓) | - |
| Quadrierer vor y_1 | - (*) | - (*) | - |
| Kubierer vor y_1 | ✓ | ✓ | ✓ |
| Quadrierer + Kubierer vor y_1 | ✓ | ✓ | ✓ |

Tabelle 2 vergleicht die Verfahren bezüglich der zulässigen Systemklassen und der generierten Ergebnisse. Bei der KKF ist insbesondere die fehlende Ordnungsschätzung sowie die aufwändige Visualisierung und Behandlung von Mehrgrößensystemen problematisch. Hier zeigen sich die Vorteile des n4sid-Verfahrens, das beide Aufgaben direkt integriert.

Tabelle 2: Vergleich der zulässigen Systemklassen und der generierten Ergebnisse, ✓: ja, (✓): bedingt möglich, -: nein

| | KKF | Granger-Kausalität | n4sid |
|---------------------------------|-----|--------------------|--------------|
| Lineare Systeme | ✓ | ✓ | ✓ |
| Wiener- und Hammerstein-Systeme | (✓) | (✓) | (✓) |
| Integrierte Ordnungsschätzung | - | (✓) (mit AIC) | ✓ |
| Umgang mit Mehrgrößensystemen | - | (✓) | ✓ |
| Schätzung Totzeit | ✓ | (✓) (indirekt) | ✓ (indirekt) |
| Einfache Parametrierung | ✓ | (✓) | ✓ |

4 Zusammenfassung und Ausblick

Der vorliegende Beitrag gibt eine Übersicht über Verfahren zur Bestimmung von kausalen Zusammenhängen aus Messdaten und konzentriert sich dabei insbesondere auf Methoden aus der Systemtheorie. Als beispielhafte Verfahren wurden die Kreuzkovarianzfunktion (KKF), das Granger-Verfahren und das n4sid-Verfahren ausgewählt und an einem PT1-basierten System mit verschiedenen Eingangssignalen und ausgewählten (nichtlinearen)

Modifikationen evaluiert. Somit wird untersucht, inwieweit kausale Abhängigkeiten in Messdaten auch dann erkannt werden, wenn die rigiden Anforderung an die einzelnen Struktursucheverfahren verletzt werden. Bei der KKF lässt sich zusammenfassend sagen, dass sie lediglich im optimalen Fall und bei Systemen mit Totzeit einwandfrei funktioniert. Die Granger-Kausalität erweist sich als robuster gegenüber einer niedrigen Messdatenqualität. Beim n4sid-Verfahren ist problematisch, dass die Kausalitätsinformationen wieder mit nachfolgenden Bewertungsmaßen für die entworfenen Modelle extrahiert werden müssen, wodurch Informationen verlorengehen.

Dennoch bleibt eine Reihe offener Fragen. Ein erster Fragenkomplex betrifft die Eignung weiterer Verfahren wie z. B. Dynamischer Bayes-Netze. Hier ist zu untersuchen, ob und in welchen Fällen die Vorteile aus der direkten Erkennung nichtlinearer Zusammenhänge gegenüber den Nachteilen durch die Informationsverluste wegen der notwendigen Diskretisierung überwiegen. Ein zweiter Fragenkomplex betrifft die Einflüsse von Langzeittrends, kleinen Datensätzen (z. B. wegen teurer Datenerfassung oder aktiven Experimenten), anderen Nichtlinearitäten, Systemen mit vielen Größen, periodischen Eingangssignalen, dominanten Einflussgrößen, Closed-loop-Strukturen, zeitvariantem Systemverhalten, unentdeckten Aliasing-Effekten usw. Hier ist zwar kaum mit generell gültigen Aussagen zu rechnen, Hinweise für die Eignung einzelner Verfahren haben aber das Potenzial, die Arbeit in der Praxis zu erleichtern. Des Weiteren ist bisher ungeklärt, inwiefern die einzelnen Verfahren bei der Struktursuche vom Nutzer unterstützt werden können (z. B. anhand von A-priori-Wissen oder aktiver Exploration) und wie der Nutzer wiederum Rückmeldung durch eine geeignete Visualisierung erhalten kann.

Literatur

- [1] Hong, X.; Mitchell, R.; Chen, S.; Harris, C.; Li, K.; Irwin, G.: Model Selection Approaches for Non-linear System Identification: A Review. *International Journal of Systems Science* 39 (2008) 10, S. 925–946.
- [2] Schmidt, M.; Lipson, H.: Distilling Free-form Natural Laws from Experimental Data. *Science* 324 (2009) 5923, S. 81–85.
- [3] Pereda, E.; Quiroga, R.; Bhattacharya, J.: Nonlinear Multivariate Analysis of Neurophysiological Signals. *Progress in Neurobiology* 77 (2005) 1-2, S. 1–37.
- [4] Willems, J.: The Behavioral Approach to Open and Interconnected Systems. *IEEE Control Systems Magazine* 1066 (2007) 033X/07.
- [5] Markovskiy, I.; Willems, J.; Rapisarda, P.; De Moor, B.: Algorithms for Deterministic Balanced Subspace Identification. *Automatica* 41 (2005) 5, S. 755–766.
- [6] Pearl, J.: Causal Inference in Statistics: An Overview. *Statistics Surveys* 3 (2009), S. 96–146.
- [7] Granger, C.: Investigating Causal Relations by Econometric Models and Cross-spectral Methods. *Econometrica* 37 (1969) 1, S. 424–438.
- [8] Friedman, N.; Koller, D.: Multivariate Out-of-Sample Tests for Granger Causality. *Computational Statistics and Data Analysis* 51 (2007), S. 3319–3329.
- [9] Seth, A.: A MATLAB Toolbox for Granger Causal Connectivity Analysis. *Journal of Neuroscience Methods* 186 (2010) 2, S. 262–273.
- [10] Van Overschee, P.; De Moor, B.: N4SID: Subspace Algorithms for the Identification of Combined Deterministic-stochastic Systems. *Automatica* 30 (1994), S. 75–93.
- [11] Nelles, O.; Fischer, M.: Local Linear Model Trees (LOLIMOT) for Nonlinear System Identification of a Cooling Blast. In: *Proc., 4th European Congress on Intelligent Techniques and Soft Computing EUFIT'96*, S. 1187–1191. Aachen. 1996.
- [12] Nelles, O.; Hecker, O.; Isermann, R.: Automatische Strukturselektion für Fuzzy-Modelle zur Identifikation nichtlinearer, dynamischer Prozesse. *at - Automatisierungstechnik* 46(6) (1998), S. 302–311.

- [13] Breiman, L.; Friedman, J. H.; Olshen, R. A.; Stone, C. J.: *Classification and Regression Trees*. Belmont, CA: Wadsworth. 1984.
- [14] Angelov, P.; Filev, D.: An Approach to Online Identification of Takagi-Sugeno Fuzzy Models. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, Part B: Cybernetics* 34 (2004) 1, S. 484–498.
- [15] Kroll, A.: Zur Modellierung un stetiger sowie heterogener nichtlinearer Systeme mittels Takagi-Sugeno-Systemen. In: *Proc. 20. Workshop Computational Intelligence, Bommerholz*, S. 64–79. KIT Scientific Publishing. 2010.
- [16] Marenbach, P.; Bettenhausen, K. D.; Cuno, B.: Selbstorganisierende Generierung strukturierter Prozeßmodelle. *at - Automatisierungstechnik* 43 (1995) 6, S. 277–288.
- [17] Marenbach, P.; Bettenhausen, K. D.; Freyer, S.: Signal Path Oriented Approach for Generation of Dynamic Process Modes. In: *Proc., 1st Conference on Genetic Programming (GP-96)*. The MIT Press. 1996.
- [18] Gray, G.; Murray-Smith, D.; Li, Y.; Sharman, K.; Weinbrenner, T.: Nonlinear Model Structure Identification using Genetic Programming. *Control Engineering Practice* 6 (1998) 11, S. 1341–1352.
- [19] Mihajlovic, V.; Petkovic, M.: Dynamic Bayesian Networks: A State of the Art. URL <http://doc.utwente.nl/36632/>. DMW-project. 2001.
- [20] Murphy, K. P.: The Bayes Net Toolbox for MATLAB. *Computing Science and Statistics* 33 (2001), S. 2001.
- [21] Tsamardinos, I.: The Min-max Hill-climbing Bayesian Network Learning Algorithm. *Machine Learning Journal* (2006).
- [22] Chickering, D.: Learning Equivalence Classes of Bayesian-Network Structures. *Journal of Machine Learning Research* 2 (2002), S. 445–498.
- [23] Ljung, L.: *System Identification - Theory for the User*. Prentice Hall. 1999.
- [24] Hegger, R.; Kantz, H.; Schreiber, T.: Practical Implementation of Nonlinear Time Series Methods: The TISEAN Package. *Chaos* 9 (1999), S. 413–435.
- [25] Maiwald, T.; Timmer, J.: Dynamical Modeling and Multi-experiment Fitting with PottersWheel. *Bioinformatics* 24 (2008) 18, S. 2037–2043.
- [26] Quian Quiroga, R.; Kraskov, A.; Kreuz, T.; Grassberger, P.: Performance of Different Synchronization Measures in Real Data: A Case Study on Electroencephalographic Signals. *Physical Review E* 65 (2002) 4, S. 041903.
- [27] Mikut, R.: *Data Mining in der Medizin und Medizintechnik*. Universitätsverlag Karlsruhe. 2008.
- [28] Mikut, R.; Reischl, M.: Data Mining Tools. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Data Mining and Knowledge Discovery* 1 (5) (2011), S. 431 – 443.
- [29] Bongard, J.; Lipson, H.: Automated Reverse Engineering of Nonlinear Dynamical Systems. *Proceedings of the National Academy of Sciences* 104 (2007) 24, S. 9943.
- [30] Braun, J.; Krettek, J.; Hoffmann, F.; Bertram, T.; Lausch, H.; Schoppel, G.: Struktur- und Parameteridentifikation mit Evolutionären Algorithmen. *at - Automatisierungstechnik* 59 (2011) 6, S. 340–352.
- [31] Menold, P.; Allgöwer, F.; Pearson, R.: Nonlinear Structure Identification of Chemical Processes. *Computers & Chemical Engineering* 21 (1997), S. S137–S142.
- [32] Chou, I.; et al.: Recent Developments in Parameter Estimation and Structure Identification of Biochemical and Genomic Systems. *Mathematical Biosciences* 219 (2009) 2, S. 57–83.
- [33] Sima, C.; Hua, J.; Jung, S.: Inference of Gene Regulatory Networks using Time-series Data: A Survey. *Current Genomics* 10 (2009) 6, S. 416–429.
- [34] Zou, C.; Feng, J.: Granger Causality vs. Dynamic Bayesian Network Inference: A Comparative Study. *BMC Bioinformatics* 10 (2009) 122, S. 1–17.
- [35] Beligiannis, G.; Skarlas, L.; Likothanassis, S.; Perdikouri, K.: Nonlinear Model Structure Identification of Complex Biomedical Data using a Genetic-programming-based Technique. *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement* 54 (2005) 6, S. 2184–2190.
- [36] Gennemark, P.; Wedelin, D.: Benchmarks for Identification of Ordinary Differential Equations from Time Series Data. *Bioinformatics* 25 (2009) 6, S. 780.
- [37] Mikut, R.; Burmeister, O.; Braun, S.; Reischl, M.: The Open Source Matlab Toolbox Gait-CAD and its Application to Bioelectric Signal Processing. In: *Proc., DGBMT-Workshop Biosignalverarbeitung, Potsdam*, S. 109–111. 2008.