

Maschinelles Lernen Dynamischer Systeme aus Observablen

K. Janik[†], A. Othmane[‡], S. Yıldız[★], P. Benner[#]

[†]Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme Magdeburg, Sandtorstraße 1, 39114 Magdeburg, Tel: ++49(0)391/16110387, E-Mail: janik@mpi-magdeburg.mpg.de

[‡]Modellierung und Simulation technischer Systeme, Campus, Gebäude A 51, 66123 Saarbrücken, Tel: ++49(0)681/3023766, E-Mail: amine.othmane@uni-saarland.de

[★]Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme Magdeburg, Sandtorstraße 1, 39114 Magdeburg, Tel: ++49(0)391/16110364, E-Mail: yildiz@mpi-magdeburg.mpg.de

[#]Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme Magdeburg, Sandtorstraße 1, 39114 Magdeburg, Tel: ++49(0)391/16110450, E-Mail: benner@mpi-magdeburg.mpg.de

Wissenschaftliches maschinelles Lernen von dynamischen Systemen der Form

$$\Sigma : \quad \dot{\mathbf{x}} = f(\mathbf{x}) \quad \text{and} \quad y = g(\mathbf{x}) \quad (1)$$

stellt ein immer wichtigeres Werkzeug in Regelungstechnik und Kontrolltheorie dar. Der Einfachheit halber betrachten wir nur autonome Systeme ohne Eingang. Etablierten Methoden [1] lernen dabei meist im Zustandsraum. Allerdings stehen Messungen des gesamten Zustands $\mathbf{x}$ nur in seltenen Fällen zur Verfügung. In realen Experimenten sind meist weder die Zustände $\mathbf{x}$ noch die rechte Seite f noch die Abbildung g , die beschreibt, wie sich die Observablen aus den Zuständen ergeben, bekannt, sondern lediglich Messungen der Observablen y . Die Frage, ob Informationen über das Verhalten des Ausgangs hinreichend sind, um die Zustände zu rekonstruieren, führt zum Konzept der nichtlinearen Beobachtbarkeit [2, 3, 4]. Für hinreichend expressive Observablen y gibt es eine endliche Anzahl k an Zeitableitungen, aus denen der Zustand $\mathbf{x}$ rekonstruiert werden kann, das heißt $\mathbf{x} = \Phi(\mathbf{y})$, $\mathbf{y} = (y, \dot{y}, \dots, y^{(k)})$ [3, 4].

Da aber in der Regel Ableitungen der Observablen nicht gemessen werden können, müssen diese geschätzt werden. In Anwesenheit von Rauschen und anderen Messfehlern stellt die numerische Berechnung von Ableitungen ein schlecht gestelltes inverses Problem dar. Klassische finite Differenzen liefern in diesem Fall keine geeigneten Approximationen. Deshalb greifen wir auf algebraische Ableitungsschätzer [5, 6] zurück und erhalten neben den Ableitungen auch eine Glättung der Messdaten der Observablen y .

Damit stellt sich die Frage, wie viele Ableitungen notwendig sind, um den Zustand eindeutig aus den Observablen zu rekonstruieren. Um diese Zahl allein aus Messungen der Observablen zu bestimmen, wird eine zeitkontinuierliche Version des Falsche Nächste Nachbarn (FNN) Algorithmus [7] entwickelt. Da es möglich ist, dass die Dimension des Raums der Observablen und ihrer Ableitungen, die notwendig sind, um den Zustand zu rekonstruieren $k + 1$, größer ist als die tatsächliche Dimension des Zustandsraums d , kann in solchen Fällen ein Autoencoders angewandt werden, um die Dynamik in einem Raum mit geringerer Dimension zu lernen. Die Dimension des Zustandsraums entspricht der Dimension der Mannigfaltigkeit, auf der sich die Trajektorien im Raum der Observablen und ihrer Ableitungen befinden. Daher können wir sie mithilfe unterschiedlicher Algorithmen zur Identifikation der intrinsischen Dimension von Mannigfaltigkeiten schätzen [8, 9].

Mit Kenntnis über die Anzahl der Zeitableitungen k und der Zustandsdimension d können wir einen Autoencoder $\Psi = \mathcal{D} \circ \mathcal{E}$ parametrisieren, der zwischen Zustandsraum und dem Raum der Observablen und ihren Ableitungen abbilden soll, das heißt $\mathbf{x} \approx \mathcal{E}(\mathbf{y})$, $\mathbf{y} \approx \mathcal{D}(\mathbf{x})$. Durch die so gewonnene Approximation des Zustandsraums können wir ein weiteres neuronales Netzwerk verwenden, um dort die Dynamik zu lernen. Wir vergleichen

Kombinationen aus unterschiedlichen Architekturtypen für beide neuronale Netze anhand numerischer Beispiele und diskutieren, wann spezielle Architekturen von Vorteil sein können.

Weiterhin diskutieren wir die Möglichkeit, symmetrie- oder strukturerhaltende Methoden in unser methodologisches Gerüst zu implementieren und illustrieren dies, indem wir die symplektische Struktur des Zustandsraums Hamiltonischer Systeme berücksichtigen. Dies erlaubt es, a priori bekanntes Wissen, wie zum Beispiel, wenn es sich bei (1) um ein Hamiltonisches System handelt, mit in das Lernen einfließen zu lassen und von strukturerhaltenden Algorithmen wie [10] zu profitieren. Wir schenken dieser Anwendung besondere Beachtung, da Symmetrien und andere strukturelle Eigenschaften, etwa die symplektische Struktur des Zustandsraums Hamiltonscher Systeme, häufig nur in geeignet gewählten Zustandskoordinaten eine einfache oder kanonische Darstellung besitzen. Da gemessene Ausgangsgrößen im Allgemeinen nicht in solchen Koordinaten vorliegen, unterstreicht dies die Bedeutung einer datengetriebenen Rekonstruktion geeigneter Zustandskoordinaten aus Ausgangsgrößen.

Literatur

- [1] Chen R. T. Q.; Rubanova Y.; Bettencourt J.; Duvenaud D.: Neural Ordinary Differential Equations, Proceedings of the 32nd International Conference on Neural Information Processing Systems, 2018.
- [2] Hermann, R.; Krener, A.J.: Nonlinear controllability and observability. IEEE Transactions on Automatic Control, 1977.
- [3] Diop, S.; Fliess, M.: Nonlinear observability, identifiability, and persistent trajectories, Proc. of the 30th IEEE Conf. on Decision and Control, 1991.
- [4] Fliess, M.; Join, C.; Sira-Ramírez, H.: Non-linear estimation is easy, International Journal Modeling Identification and Control, 2008
- [5] Mboup, M.; Join, C.; Fliess, M.: Numerical differentiation with annihilators in noisy environment, Numerical Algorithms, 2009.
- [6] Othmane, A.; Kiltz, L.; Rudolph, J.: Survey on algebraic numerical differentiation: historical developments, parametrization, examples, and applications, International Journal of Systems Science, 2022.
- [7] Kennel M. B.; Brown, R.; Abarbanel, H. D. I.: Determining embedding dimension for phase-space reconstruction using a geometrical construction, Physical Review A, 1992.
- [8] Binnie, J. A. D.; Dłotko, P.; Harvey, J.; Malinowski, J.; Yim, K. M.: A Survey of Dimension Estimation Methods, arXiv, 2025.
- [9] Bac, J.; Mirkes, E. M.; Gorban, A. N.; Tyukin, I.; Zinovyev, A.: Scikit-dimension: A Python package for intrinsic dimension estimation, Entropy, 2021.
- [10] Jin, P.; Zhang, Z.; Zhu, A.; Tang, Y.; Karniadakis, G. E.: SympNets: Intrinsic structure-preserving symplectic networks for identifying Hamiltonian systems, Neural Networks, 2020.