

Optimierte Modellierung von Füllständen in Regenüberlaufbecken mittels CI-basierter Parameterselektion

Optimized modelling of fill levels in stormwater tanks using CI-based parameter selection schemes

W. Konen, T. Zimmer und T. Bartz-Beielstein

Ziel dieses Beitrags ist die Prognose der Füllstände in Regenüberlaufbecken aufgrund von Regeneintrag und Bodenbeschaffenheit. Wir vergleichen verschiedene Prognoseverfahren und nutzen die Sequentielle Parameteroptimierung (SPO), um für jedes Verfahren in vergleichbarer Weise bestmögliche Parameter zu finden. Es zeigt sich, dass diverse Standard- und CI-basierte Verfahren der Modellierung mit intermittierenden Regenmeßdaten als Input nicht gut zurecht kommen. Problemspezifische Modellierungen, die kausale Effekte erster Ordnung berücksichtigen, erzielen wesentlich kleinere Prognosefehler. Wichtige Resultate dieser Arbeit sind: (i) SPO lässt sich auf verschiedene Modellierungsverfahren gleichermaßen anwenden und automatisiert das manuell zeitaufwendige Parameter-Tuning, (ii) das beste manuell erzielte Ergebnis wurde mit SPO nochmals um ca. 30% verbessert und (iii) SPO analysiert in konsistenter Weise den Einfluß von Parametern und erlaubt so oftmals eine zielgerichtete Vereinfachung oder Verbesserung des Modellentwurfs.

The aim of this paper is the prediction of fill levels in stormwater tanks based on rain measurements and soil conditions. We compare different prediction methods and use sequential parameter optimization (SPO) to find in a comparable manner the best parameters for each method. Several standard and CI-based modeling methods show larger prediction errors when trained on rain data with strong intermittent and bursting behaviour. Models developed specific to the problem show a smaller prediction error. Main results of our work are: (i) SPO is applicable to diverse forecasting methods and automates the time-consuming parameter tuning, (ii) the best manual result achieved before was improved with SPO by 30% and (iii) SPO analyses in a consistent manner the parameter influence and allows a purposeful simplification and/or refinement of the model design.

Schlagwörter: Prognose, Modellierung, neuronale Netze, Versuchsplanung, sequentielle Optimierung, Simulation, Wasserwirtschaft

Keywords: prediction, modeling, neural networks, experimental design, sequential optimization, simulation, water management

1 Modellierung von Füllständen in Regenüberlaufbecken

Die systematische Modellierung und Prognose komplexer dynamischer Systeme sowie die Verifikation, dass ein bestimmtes Modell im Rahmen vorgegebener Parame-

tervariationen die beste Beschreibung ist, stellen nach wie vor Herausforderungen für die Automatisierungstechnik dar. Trotz jahrelanger intensiver Forschung auf diesem Gebiet und wichtiger bereits erzielter Fortschritte besteht hier weiterhin Forschungsbedarf. Ein Kernproblem liegt in der kombinatorischen Explosion des



Bild 1: Links: Niederschlagsmeßfeld, rechts: Regenüberlaufbecken (RÜB)

Lösungsraumes, d.h. mit zunehmender Zahl von Eingangsvariablen und internen Zuständen des Systems, nimmt die Zahl der zu betrachtenden Varianten zumindest exponentiell zu.

Ziel dieser Arbeit ist die systematische Untersuchung einer automatisierungstechnischen Anwendung aus der Wasserwirtschaft mit verschiedenen Modellansätzen. Dabei steht nicht nur der Vergleich verschiedener Modellierungsansätze im Vordergrund, sondern vor allem die Beschreibung der Verbesserungspotentiale, die sich mit einer gezielten Vorgehensweise erreichen lassen. Unsere Vorgehensweise benutzt die *sequentielle Parameteroptimierung* (SPO) [1]. SPO kombiniert Methoden der experimentellen Versuchsplanung (engl. *design of experiments*, DOE) mit modernen statistischen Verfahren.

1.1 Stand der Technik

Die Prognose der Füllstände in *Regenüberlaufbecken* (RÜB) aufgrund von Regeneintrag und Bodenbeschaffenheit steht im Mittelpunkt dieser Arbeit. Böden und Kanalnetze stellen ein komplexes dynamisches System dar. Offensichtlich haben die aktuellen Zustände der Böden einen wichtigen Einfluss auf den Füllstand der Überlaufbecken, da z.B. trockene Böden ein anderes Abflussverhalten zeigen als feuchte oder gar gefrorene Böden. Wichtige Faktoren sind ferner die unterschiedlichen Einflüsse räumlich verschiedener Bodensegmente auf den Füllstand aufgrund von Geländeterrainverläufen, Bodenbeschaffenheit (Wasserdurchlässigkeit) u.a.m. Hinzu kommen noch weitere Einflussfaktoren wie die Sonnenscheindauer, die landwirtschaftliche Nutzung, Temperatur usw. Im Forschungsprojekt KANNST (KANalNetz-Steuerung) wird die Modellierung und Prognose von Füllstandshöhen in RÜB auf Basis einzelner Regenmessungen untersucht [2]. Die Modellierung beruht auf empirisch erhobenen Re-

gendaten, die vom Aggerverband zur Verfügung gestellt wurden. Der Aggerverband ist ein Wasserverband in Nordrhein-Westfalen. In seinem Verbandsgebiet übernimmt er für seine Mitglieder (Kreise, Städte, Gemeinden, Industrie und öffentliche Wasserversorgungsunternehmen) alle Aufgaben der Wasserwirtschaft.

Der wasserwirtschaftliche Stand der Technik besteht heute meistens darin, dass Kanalnetze noch als unregelte Systeme betrieben werden, bei denen z.B. am Ablauf von Regenüberlaufbecken feste Drosselmengen eingestellt werden [3, 4]. Im Vordergrund einer Weiterentwicklung der Kanalnetzbewirtschaftung steht der Gewässerschutz, da so wenig Schmutzfracht wie irgend möglich aus dem Kanal in die Gewässer gelangen soll. In jüngster Zeit werden die hierfür erforderlichen vernetzten Regelungssysteme im Rahmen des Projektes KANNST [2] unter Nutzung moderner Messtechnik und neuer Verfahren der *Computational Intelligence* (CI) entwickelt. Ziel ist es, die Kapazität des Kanalnetzes möglichst optimal auszunutzen, um die Entlastungen (Überträge in Gewässer) zu minimieren. Hierfür ist eine vorausschauende Prognose der Füllstände aufgrund von Regeneintrag und Bodenbeschaffenheit unerlässlich. Während für die Modellierung von Kanalnetzen und Kläranlagen komplexe Simulationsprogramme wie SIMBA oder SWMM [5] verfügbar sind, ist den Autoren nicht bekannt, dass es neben KANNST noch weitere Lösungsansätze für die Modellierung von Füllständen in RÜBs gibt. Bild 1 zeigt exemplarisch einige Vorrichtungen zur Datenerhebung in KANNST, nämlich ein Niederschlagsmeßfeld (links) und ein Regenüberlaufbecken (rechts).

Basierten die in [6] dargestellten Ergebnisse noch auf mit SWMM simulierten Regendaten und Füllständen [5], so beruhen die in dieser Arbeit präsentierten Ergebnisse auf empirisch erhobenen Daten. Die Anforderungen an die zugrundeliegenden Modellierungsansätze werden da-

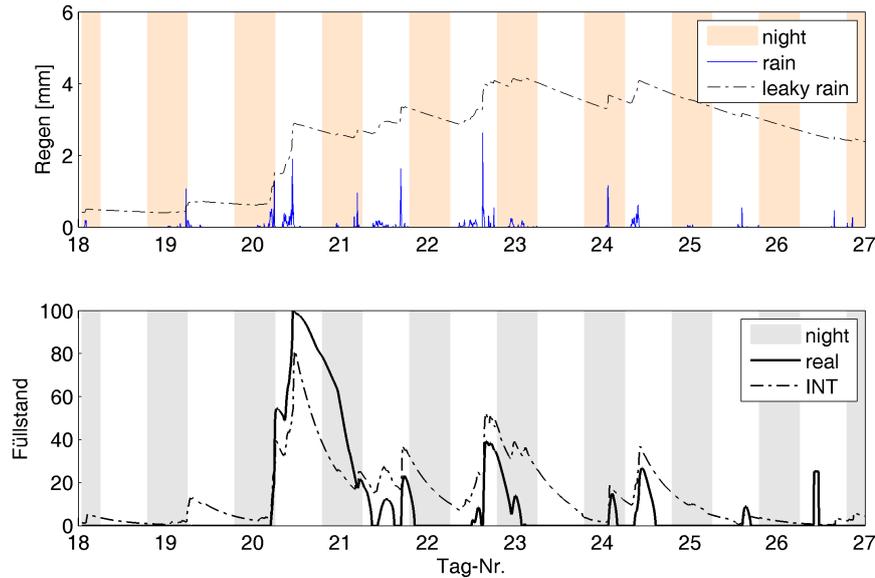


Bild 2: Ausschnitt aus den Kanalnetzdaten. Oben: Die Regendaten haben einen stark burstartigen Charakter. Der 'leaky rain' ist eine gleitende Integration der Regenaktivität gem. Gl. (6). Unten: Die zugehörigen Füllstände im RÜB. Tag Nr. 18 entspricht dem Datum 16.05.2006.

durch drastisch erhöht, denn die Daten weisen ein intermittierendes und burstartiges Verhalten auf, s. Bild 2. Dieses stellt rückgekoppelte Modelle vor starke Probleme. Weiterhin stellen die empirischen Regendaten, die keine Abtastung einer zugrundeliegenden stetigen Funktion sind, für gängige Differentialgleichungslöser (ODE-Solver) ein technisches Problem dar, da dies zu Instabilitäten führt.

Intermittierende und burstartiges Verhalten aufweisende Daten sind dennoch ein häufig auftretendes Faktum in Anwendungsproblemen der Automatisierungstechnik (man denke z.B. an Zeitreihen, die relativ selten auftretende Ereignisse wie Ausfälle von Anlagen oder Maschinen enthalten), sodass es ein wesentliches Ziel dieser Arbeit ist zu untersuchen, wie verschiedene Prognoseansätze mit solchen Inputdaten arbeiten können. Unterschiedliche Ansätze wie FIR-Modelle, *Nonlinear AutoRegressive models with exogenous inputs* (NARX) [7, 8, 9], *Echo State Networks* (ESN) [10, 11], Differentialgleichungen (ODE) oder die Modellierung mit Integralgleichungen (INT) werden dabei von uns eingesetzt.

1.1.1 Statistische Modellierung

Jedes einzelne Verfahren benötigt die Einstellung interner Parameter, wie z.B. die Anzahl der Neuronen im NARX-Modell. Diese Parameter werden im Folgenden (in Anlehnung an die in der Statistik übliche Bezeichnung von Parametern als Faktoren) als *Modellfaktoren* bezeichnet. Zusätzliche Parameter, wie z.B. der Beobachtungszeitraum, sind problemspezifisch. Diese werden im Folgenden als *Problemfaktoren* bezeichnet. Ein Modelldesign beschreibt die Gesamtheit aller modellspezifischen Faktoren, ein Problemdesign beschreibt die pro-

blemspezifischen Faktoren. Ein wichtiges Ziel in der Simulation ist die Bestimmung eines optimalen Modelldesigns für ein (oder sogar mehrere) gegebene Problemdesigns.

Um eine Vergleichbarkeit zu gewährleisten und zu erreichen, dass jeder Prognoseansatz nach Möglichkeit mit seinem besten Modelldesign operiert, nutzen wir für alle Verfahren die SPO [12, 1], um die bestmögliche Faktoreinstellungen systematisch zu bestimmen. Neu ist in dieser Arbeit auch, dass SPO erstmalig für die Optimierung von ODE-Modellen und Integralgleichungsmodellen (INT) eingesetzt wird. Diese Modelle bieten das Potential, komplexe Anwendungszusammenhänge zu modellieren, die von rein datengetriebenen Verfahren in der Regel nicht erfasst werden. Traditionell haben sie aber das Problem, dass eine größere Anzahl von Parametern einzustellen sind, um quantitativ gute Übereinstimmung zu erzielen. Hier bietet SPO einen systematischen Ansatz. Ziel unserer Untersuchungen ist festzustellen, ob SPO auch im Fall von ODE und INT gute Optimierungsergebnisse liefert.

Im zweiten Abschnitt stellen wir die verschiedenen Prognoseansätze vor und beschreiben die zugehörigen Schritte zur Datenvor- und -nachbearbeitung. Im dritten Abschnitt wird dargelegt, wie die Parameter der verschiedenen Modelle eingestellt wurden und welche Ergebnisse wir damit erzielten, die der vierte Abschnitt diskutiert. Im letzten Abschnitt geben wir eine kurze Zusammenfassung.

2 Material und Methoden

Wir beschreiben zunächst die der Optimierung zugrundeliegenden Daten und das Optimierungsziel.

2.1 Daten und Zielfunktion

Die Regendaten, stammend von einer Regenmeßstelle im Einzugsgebiet der Füllstandsbecken, wurden minütlich ab dem 28.04.2006 über einen Zeitraum von 108 Tagen erhoben, so dass insgesamt $n = 155.521$ Datensätze zur Verfügung standen. Weitere Regendaten von mehreren Meßstellen werden derzeit erhoben, da von Anwenderseite ein großes Interesse an diesen Prognosen besteht, fließen aber nicht in die hier dargestellte Untersuchung ein. Basierend auf den gemessenen Regendaten r_t ($t = 1, 2, \dots, n$), in den Abbildungen mit „rain“ bezeichnet, sollen die realen Füllstandshöhen in den Becken möglichst genau vorhergesagt werden. Die realen Werte y_t werden mit „real“ und die von unseren Modellen vorhergesagten Werte \hat{y}_t werden mit dem Modellkürzel (z.B. INT) bezeichnet. Die minütlichen Regennengen wurden zunächst in 5minütigen Intervallen zusammengefaßt, die Füllstände in 5minütigen Intervallen gemittelt. Die Zeitreihen stellen wir interessierten Anwendern für eigene Experimente auf unserer Webseite [13] zur Verfügung.

Bekannt sind somit r_t und y_t , zu bestimmen ist ein Modell zur Berechnung von \hat{y}_t , so dass der Fehler zwischen y_t und \hat{y}_t möglichst gering ist. Es ist zu betonen, dass die hier vorgestellten Modelle (bis auf NARX) alle r_t als einzigen zeitveränderlichen Input benutzen. Es ließen sich zwar möglicherweise bessere Kurzfristprognosen erstellen, wenn auch Vergangenheitswerte der Füllstandszeitreihe y_t mit einbezogen würden, aber das ist mit Ausnahme der NARX-Modelle nicht Gegenstand dieser Untersuchung.

Auf den ersten Blick mag es erscheinen, dass die Prognose $r_t \rightarrow \hat{y}_t$ gar keine Prognose darstellt, da der Prognosehorizont 0 ist. Jedoch ist die wahre Aufgabe eines Modells, aus den Regeneinträgen bis zum aktuellen Zeitpunkt t eine Prognose über die Bodenbeschaffenheit und deren Auswirkung auf den Füllstand abzugeben. Des Weiteren führt der bis zum Zeitpunkt t gemessene Regeneintrag erst 30-60 min später zu einer Füllstandsänderung, ein Zeitfenster, welches sinnvoll zu Steuerungsmaßnahmen in Kanalnetzen genutzt werden kann. (Die minimale Totzeit wird in den empirischen Modellansätzen im jeweiligen Ansatz mit berücksichtigt.)

Als Gütemaß der Prognosen betrachten wir die folgen-

den Fehlermaße:

$$\text{MSE} = \frac{1}{n} \sum_t^n (y_t - \hat{y}_t)^2 \quad (1)$$

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_t^n (y_t - \hat{y}_t)^2}. \quad (2)$$

2.2 Prognoseverfahren

Im Rahmen unserer Analysen habe wir fünf verschiedene Prognoseverfahren betrachtet: ESN, NARX, FIR, ODE und INT.

2.2.1 ESN

Der erste Modellierungsansatz beruhte auf künstlichen *neuronalen Netzen*. Sie finden häufig Anwendung, um komplexe Beziehungen zwischen Ein- und Ausgabe-Größen zu modellieren. Dabei ist die zugrundeliegende Abbildungsvorschrift nicht genau bekannt, sondern wird vom Netz gelernt. Einfache Feedforward-Netze wurden dabei nicht verwendet, weil sie mit r_t als zeitlich veränderlichem Eingang nur ein statisches Übertragungsverhalten zeigen könnten und weil mit NARX und ESN komplexere neuronale Netze Verwendung finden.

Echo State Networks (ESN) [10] sind rekurrente neuronale Netze, die ein sog. *Reservoir* rückgekoppelter Neuronen nutzen, um komplexe dynamische Signale zu generieren. Mit diesem Ansatz übertrifft [11] die Genauigkeit aller bisherigen Verfahren zur Prognose der mild-chaotischen Mackey-Glass-Zeitreihe. Ein zu ESN äquivalenter Ansatz sind Liquid State Machines [14].

ESN wurden zwar untersucht, sie werden aber hier nicht weiter dargestellt, da sie unbefriedigendes Verhalten zeigen. Die unseren Untersuchungen zugrunde liegenden Spezifikationen des ESN-Modells waren ein Reservoir von 300 Neuronen, die mit einer Sparsity von 5% vernetzt wurden, ein Spektralradius $\alpha = 0.35$ für die Matrix W sowie ein Spektralradius $r_{back} = 0.08$ für die Matrix W_{back} .

Die so trainierten ESN gingen bei Anregung durch ein von Null verschiedenes Input-Signal meist sehr schnell in den gesättigten Zustand (100% Füllstand) über, ähnlich wie das NARX-Modell in Bild 7. Das heißt nicht, dass ESN prinzipiell nicht für die Vorhersage dieses dynamischen Systems geeignet sind (es ist ihnen aufgrund ihrer reichen internen Dynamik sogar grundsätzlich ein hohes Potential zuzuschreiben), sondern vor allem, dass die Inputdaten in ihrer bisherigen Form (burstartig, intermittierend) nicht als ESN-Input geeignet sind, sondern dass es einer geeigneten, noch zu entwickelnden Vorverarbeitung bedarf, um den Input für ESN geeignet aufzubereiten.

2.2.2 FIR

Filter mit endlicher Impulsantwort, engl.: *finite impulse response filter* (FIR-Filter), werden häufig in der Signalverarbeitung eingesetzt. Unser FIR-Modell basiert auf der folgenden Gleichung (Faltung) für zwei Vektoren \vec{u} und \vec{v} :

$$y_t = \sum_i u_i v_{t+1-i} \quad (3)$$

In unserem Fall stellen die Komponenten u_i des Vektors \vec{u} exponentiell abklingende Gewichte dar, die zusätzlich durch eine Shift-Funktion S um eine Verzögerungszeit verschoben werden: $u_i = S(\exp(-i/A))$. Der Faktor $A \in \mathbb{R}_+$ stellt einen vom Anwender vorzugebenden Abklingfaktor dar. Die Ordnung des Filters wird in unseren Untersuchungen im Bereich 100..300 variiert. Zudem stellt v_i die i -te Komponente des Vektors \vec{v} der durch eine Funktion f skalierten Regendaten, also $v_i = f(r_i)$, dar. Durch diese Skalierung wird ein Verdunstungsfaktor modelliert.

2.2.3 NARX

NARX Modelle werden in der Zeitreihenmodellierung und -analyse eingesetzt [9]. Der aktuelle Wert der Zeitreihe wird durch Werte aus der Vergangenheit und zusätzlich aus aktuellen und vergangenen Werten der exogenen Reihe bestimmt. NARX Modelle können durch die Gleichung

$$y_t = F(y_{t-1}, y_{t-2}, y_{t-3}, \dots, r_{t-1}, r_{t-2}, r_{t-3}, \dots) + \varepsilon_t$$

beschrieben werden. Dabei ist y die Variable, deren Werte vorhergesagt werden sollen (Füllstand von Stau-becken) und die Variable r stellt Zusatzinformationen bereit (Niederschlagsmenge). In unseren Experimenten wurden die in der Matlab Neural Network Toolbox implementierten NARX Modelle verwendet [15]. So konnte der Matlab Befehl `newnarxsp` benutzt werden, um das Netz zu erzeugen. Es musste die Anzahl der Delay-States (1..50) und die Anzahl der Neuronen (1..10) festgelegt werden. Diese Parameter des NARX Modelle werden systematisch mittels SPO analysiert [12].

2.2.4 Modellierung des dynamischen Systems: ODE und INT

Für reale Systeme trägt es oftmals zum besseren Verständnis der zugrundeliegenden Phänomene bei, wenn man das beobachtete Verhalten durch Differential- oder Integralgleichungssysteme beschreibt. Wir betrachten das folgende gewöhnliche Differentialgleichungssystem, engl. *ordinary differential equations* (ODE):

$$\dot{y}(t) = -\frac{\alpha}{1+K(t)}(y(t) - B) + \beta r(t - \tau_{\text{rain}}) \quad (4)$$

$$K(t) = \max(0, L(t) - \Delta) \quad (5)$$

$$\dot{L}(t) = -\alpha_L L(t) + \beta_L r(t) \quad (6)$$

Diese Gleichungen modellieren die wichtigsten Kausalzusammenhänge des dynamischen Systems Regen-Böden-RÜB: Bei Vernachlässigung des $K(t)$ -Terms in

Gl. (4) bewirkt der Regen r zeitversetzt (τ_{rain}) eine Erhöhung des Füllstandes $y(t)$ und der Füllstand $y(t)$ klingt ohne weiteren Regeneintrag exponentiell ab auf seinen Ruhewert B . Die Systemgröße $L(t)$ („leaky rain“) stellt eine *leaky integration* der Regenaktivität der letzten Stunden bzw. Tage dar. Die Bedeutung des $K(t)$ -Terms in Gl. (4) ist die, dass bei bereits stark durchfeuchteten Böden ($L(t) > \Delta$) das Abklingverhalten schwächer wird, mithin neuer Regen eine stärkere Wirkung auf das RÜB entfaltet. Der Parameter B ist der Ruhe-Füllstand, der sich in Zeiten ohne Regen einstellt (kann wegen konstantem Brauchwassereintrag > 0 sein). Er ist aus den Daten direkt ablesbar und nicht Gegenstand der weiteren Optimierung. Es verbleiben 6 zu optimierende Parameter: $\alpha, \beta, \tau_{\text{rain}}, \Delta, \alpha_L, \beta_L$.

Der Nachteil dieses einfachen ODE-Modells ist, dass es mit dem gewählten Ansatz ($\dot{y}(t)$ ist im Wesentlichen proportional zu $y(t)$) nur ein exponentielles Abklingverhalten des Füllstandes modellieren kann. Dies entspricht nicht den realen Verläufen, weil die Laufzeiten des Wassers durch verschiedene Bodenschichten natürlich unterschiedliche Delays haben. Deshalb formen wir das ODE-Modell in ein vergleichbares Integralgleichungsmodell (INT) um, bei dem das Abklingverhalten durch Modifikation geeigneter Faltungskerne anpassbar ist:

$$L(t) = \int_{-\infty}^t \beta_L r(\tau) e^{-\alpha_L(t-\tau)} d\tau \quad (7)$$

$$y(t) - B = \int_{-\infty}^t r(\tau - \tau_{\text{rain}}) g(t - \tau) d\tau + \int_{-\infty}^t K(\tau - \tau_{\text{rain}}) h(t - \tau) d\tau \quad (8)$$

Gl. (7) ist äquivalent zu Gl. (6). In Gl. (8) stecken parametrierbare Faltungskerne g und h , die den Füllstand als Faltung des Regens und als Faltung des Term $K(t)$ aus Gl. (5) modellieren. Für den Spezialfall $K(t) = 0$ wird Gl. (8) genau dann äquivalent zur Differentialgleichung Gl. (4), wenn man den Faltungskern

$$g(s) = \beta e^{-\alpha s}$$

einsetzt. Andere Formen der Faltungskerne erlauben nun jedoch ein anderes Abklingverhalten. Wir wählen hier durch Sigmoidfunktionen abgeschnittene Stücke einer Exponentialfunktion

$$g(s) = \beta \sigma(s - \tau_{in}) e^{-\alpha s} \sigma(\tau_{out} - s) \quad (9)$$

$$h(s) = h_0 \sigma(s - \tau_{in3}) e^{-\alpha_H s} \sigma(\tau_{out3} - s) \quad (10)$$

$$\text{mit } \sigma(t) = \frac{1 + \tanh(\kappa t)}{2}, \quad (11)$$

die beispielhaft in Bild 3 dargestellt sind.

2.3 SPO: Sequentielle Parameteroptimierung

Die FIR-, NARX-, ODE- und INT-Modelle besitzen zwischen zwei und dreizehn Parametern. In vielen Situationen wird versucht, manuell, d.h. durch Probieren,

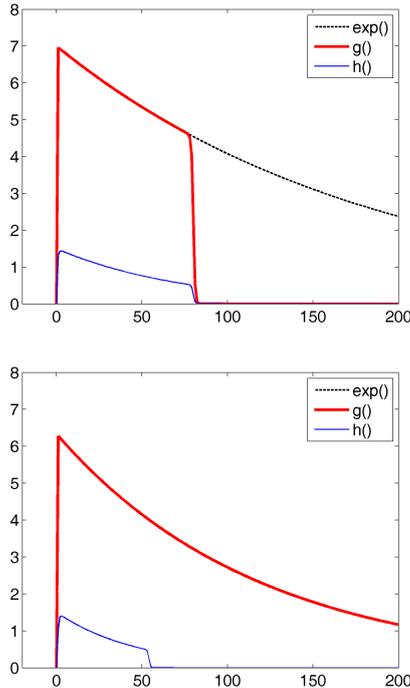


Bild 3: Die Faltungskerne des INT-Modells. Oben: manuelle Einstellung, unten: nach SPO-Optimierung.

günstige Parametereinstellungen für das Modell zu finden. Die sog. *one-factor-at-a-time* (OAT) Vorgehensweise findet dabei häufig Anwendung. Allerdings wächst die Anzahl der möglichen Einstellungen mit der Anzahl der Faktoren exponentiell. Dieses grundlegende Problem ist in der Literatur auch als „Fluch der Dimensionen“ (engl. *curse of dimensionality* [16]) bekannt: Im \mathbb{R}^1 reichen 100 Punkte, um das Einheitsintervall im Abstand 0.01 zu belegen. Im \mathbb{R}^{10} sind dafür 10^{20} Punkte erforderlich. Ein Einheitswürfel im \mathbb{R}^1 ist in diesem Sinne um das 10^{18} -fache größer als im \mathbb{R}^1 . Daher besitzt die OAT-Vorgehensweise in vielerlei Hinsicht große Nachteile im Vergleich zu einer systematischen Vorgehensweise. Im Bereich der Simulation wurde dies von Kleijnen ausführlich dargestellt [17]. Wir setzten die SPO ein [1]. SPO wurde speziell für Optimierungsprobleme entwickelt und kombiniert Ansätze aus der klassischen Regressions- und Varianzanalyse mit modernen statistischen Verfahren wie Kriging [18, 19]. SPO ist eine umfassende, auf einem rein experimentellen Ansatz beruhende Methode zur Analyse und Verbesserung deterministischer und stochastischer Simulations- und Optimierungsverfahren [20]. Ein eingangs kleiner Stichprobenumfang mit wenigen Wiederholungen wird im Laufe der SPO vergrößert. Zur Bestimmung neuer Stichproben und der Anpassung der Anzahl der Wiederholungen fließen die bisher gewonnenen Informationen ein, so dass das Modell sequenziell verbessert und die Aussagen immer sicherer werden. Die sequenzielle Vorgehensweise ermöglicht ein Lernen der zugrunde liegenden Abhängigkeiten. SPO kann zudem automatisiert ablau-

fen und ist für die numerische Simulation und Optimierung praktisch konkurrenzlos. Uns ist zur Zeit kein vergleichbares Verfahren bekannt, das einem Anwender mit geringem Aufwand die Anpassung, den Vergleich und die Analyse verschiedener Modelle ermöglicht.

2.3.1 Anwendungsfälle

SPO kann direkt zur Optimierung komplexer Probleme eingesetzt werden und wird von den Anwendern, aber auch in der empirisch orientierten Grundlagenforschung an stochastischen Suchverfahren stark nachgefragt. Eine Übersicht mit nach Anwendungsfeldern gegliederter Auflistung inklusive Literaturstellen und einer kurzen Einführung in SPO wird in [21] gegeben. Zudem wird eine frei verfügbare *SPO Toolbox* (SPOT) momentan entwickelt. Mittels SPOT gelang in der hier vorliegenden Arbeit z.B. die Analyse, welcher der Faktoren den größten Einfluss auf die Vorhersagegüte hat, so dass Faktoren mit nur geringem Einfluss im Laufe der SPO-Analyse nicht weiter betrachtet werden müssen.

3 Experimente und Resultate

Es wurden zwei ausführliche Studien zum Vergleich der Prognosegüte durchgeführt. Zunächst auf dem gesamten Datensatz, anschließend wurde der Datensatz partitioniert, um Training- und Testdaten zur Verfügung zu haben.

3.1 Übersicht der Modellfaktoren

Folgende Faktoren wurden für die einzelnen Modelle optimiert:

FIR: Für das FIR-Modell mussten fünf Faktoren angepasst werden. Der erste Faktor (s) modelliert die Verdunstung des Niederschlags. Die Gewichte, die nach einer gewissen Verzögerung mit wachsendem t exponentiell abnehmen, benötigen die Einstellung der Verzögerung (d), der Ordnung des Filters (l) und des Abklingfaktors A . Schließlich muss die Skalierung s_2 angepasst werden.

NARX: Im NARX-Modell sind zwei Faktoren anzupassen: Die Anzahl der Verzögerungen (delay-states, d) und die Anzahl der Neuronen n .

ODE und INT: Das INT-Modell besitzt 13 zu optimierenden Faktoren und für das ODE-Modell waren sechs Faktoren zu bestimmen. Diese bilden eine Teilmenge der Faktoren des INT-Modells. Um die Übersichtlichkeit zu wahren, haben wir die einzelnen Faktoren in Tab. 1 zusammenfassend dargestellt.

3.2 Erste Untersuchung: Vergleich der Verfahren auf dem gesamten Datensatz

Um einen ersten Vergleich der Prognosegüte der verschiedenen Verfahren zu erhalten, haben wir in diesen

Tabelle 1: Die 13 Parameter des INT-Vorhersagemodells mit den vom Anwender vorgegebenen zulässigen Bereichen. Das ODE-Modell benutzt daraus nur die 6 Parameter $\alpha, \beta, \tau_{rain}, \Delta, \alpha_L, \beta_L$, die in der Tabelle in hellerem Grau unterlegt sind.

Parameter	Symbol	manuell	Best SPO	Bereich SPO
Abklingkonstante Füllstand (Filter g)	α	0.0054	0.00845722	[0, 0.02]
Abklingkonstante Filter h	α_H	0.0135	0.309797	{0 ... 1}
Abklingkonstante 'leaky rain'	α_L	0.0015	0.000883692	{0 ... 0.0022}
Einkopplung Regen in Füllstand	β	7.0	6.33486	{0 ... 10}
Einkopplung Regen in 'leaky rain'	β_L	0.375	0.638762	{0 ... 2}
Einkopplung K -Term in Füllstand	h_0	0.5	6.87478	{0 ... 10}
Schwelle für 'leaky rain'	Δ	2.2	7.46989	{0 ... 10}
Flankensteilheit aller Filter	κ	1	1.17136	{0 ... 200}
Zeitverzögerung Füllstand zu Regen	τ_{rain}	12	3.82426	{0 ... 20}
Startzeitpunkt Filter h	τ_{in3}	0	0.618184	{0 ... 5}
Endzeitpunkt Filter h	τ_{out3}	80	54.0925	{0 ... 500}
Endzeitpunkt Filter g	τ_{out}	80	323.975	{0 ... 500}
RMSE		12.723	9.48588	

Experimenten den gesamten Datensatz (108 Tage) zugeordnet.

3.2.1 Vorgehensweise zur Bestimmung verbesserter Modellparameter

In diesem Abschnitt beschreiben wir exemplarisch, wie SPO-basiert verbesserte Modellfaktoreinstellungen bestimmt werden können. Diese Vorgehensweise wurde für alle betrachteten Modelle benutzt und wird anhand des INT-Modells (da dies die meisten Faktoren besitzt) im Folgenden skizziert. Eine detaillierte Darstellung dieser Vorgehensweise findet sich in [22], generelle Erläuterungen zur SPO-Methodik mit weiteren Beispielen sind in [1] dargelegt.

I. Vorstudien zur Bestimmung der ROI.

Ausgangspunkt waren in Vorstudien [23] ermittelte gute Einstellungen. Diese ersten Einstellungen basierten auf Plausibilitätsüberlegungen. Es wurde eine geringe Anzahl von Testläufen (ohne Designüberlegungen zu berücksichtigen) durchgeführt. Anschließend wurde systematisch ein experimentelles Design entworfen, in dem Intervallgrenzen großzügig gesetzt wurden. Diese Intervallgrenzen werden in der Literatur als *region of interest* (ROI) bezeichnet. Bereits nach drei SPO Runden wurde eine Verbesserung des erwarteten RMSE von 39.25 auf 10.95 erreicht,

II. Screening.

Im diesem Schritt, der in der Literatur auch als *screening* bezeichnet wird, bestimmten wir die wichtigsten Parameter. Dazu wurde die Laufzeit auf 500 Berechnungen des INT Modells beschränkt, da bereits nach einer kurzen Anfangszeit die wichtigsten Parameter feststehen sollten. Die SPO Analyse zeigte, dass der Parameter α_L den größten Einfluss auf die Vorhersagegüte hat (Bild 5). In diesem Stadium können Ausreißer, die eine valide Modellbildung nicht zulassen, erkannt werden, so dass eine Veränderung der ROI durchgeführt werden kann. Die baumbasierte Analyse in Bild 4 bestätigt diese Ergebnisse. Sie zeigt, dass der beste Wert für $\alpha_L < 0.00357935$ und $3.85311 < \Delta$ erzielt wird. Zusätzlich wird durch Bild 6 offensichtlich, dass die Varianz auf diesem Intervall für α_L deutlich zunimmt.

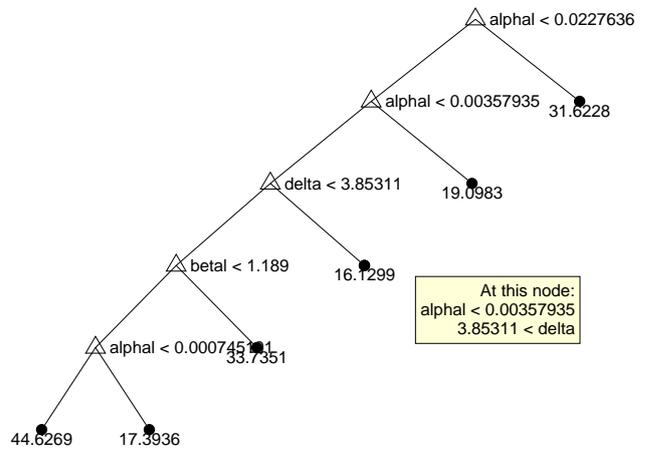


Bild 4: Regressionsbaum. Die Bedingung an jedem Knoten gilt für den linken Teilbaum. Der Faktor mit dem größten Effekt steht an der Wurzel. Der Faktor α_L hat anscheinend den größten Effekt.

III. Modellierung und Optimierung.

Nachdem in Schritt II von den ursprünglich zwölf Faktoren sechs als signifikant erkannt wurden, nämlich $\alpha_L, \alpha, \beta, \beta_L, \Delta$ und α_H , beschränkten wir die Suche im weiteren Verlauf auf diese Parameter. Die restlichen Parameter beließen wir auf den bislang besten gefundenen Werten. Mit den so eingestellten Parametern erzielten wir nach 1000 Simulationen den Bestwert RMSE=9.49, siehe Tab. 2.

Der Rechenaufwand bei der unter I.-III. dargestellten Vorgehensweise liegt im Stundenbereich für die FIR-, ODE- und INT-Modelle. Für die NARX-Modellierung war der Aufwand um den Faktor 10 größer, da in jedem Lauf das NARX-Netz trainiert werden musste.

3.2.2 Vergleich unterschiedlicher Faktoreinstellungen

Interessant ist in diesem Zusammenhang auch die Fragestellung, wie weit die von SPO gefundenen Faktoreinstellungen von den manuell bestimmten Werten abweichen, d.h. ist der Anwender auch in der Lage, ohne SPO günstige Einstellungen zu finden und welche Faktoren

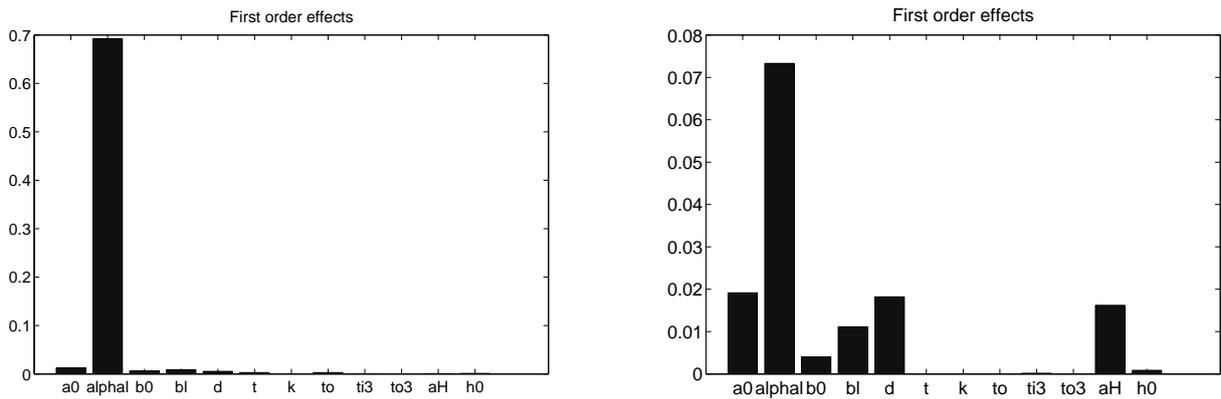


Bild 5: Links: Effekte erster Ordnung (Haupteffekte ohne Interaktionen) nach 500 Auswertungen des INT Modells. Der Faktor α_L hat anscheinend den größten Effekt. Rechts: Haupteffekte im zweiten Schritt der Modellierung. Dadurch, dass passenden Werte für α_L gefunden werden konnten, kommt es zu weniger Ausreißern und die anderen Faktoren besitzen einen größeren Einfluss.

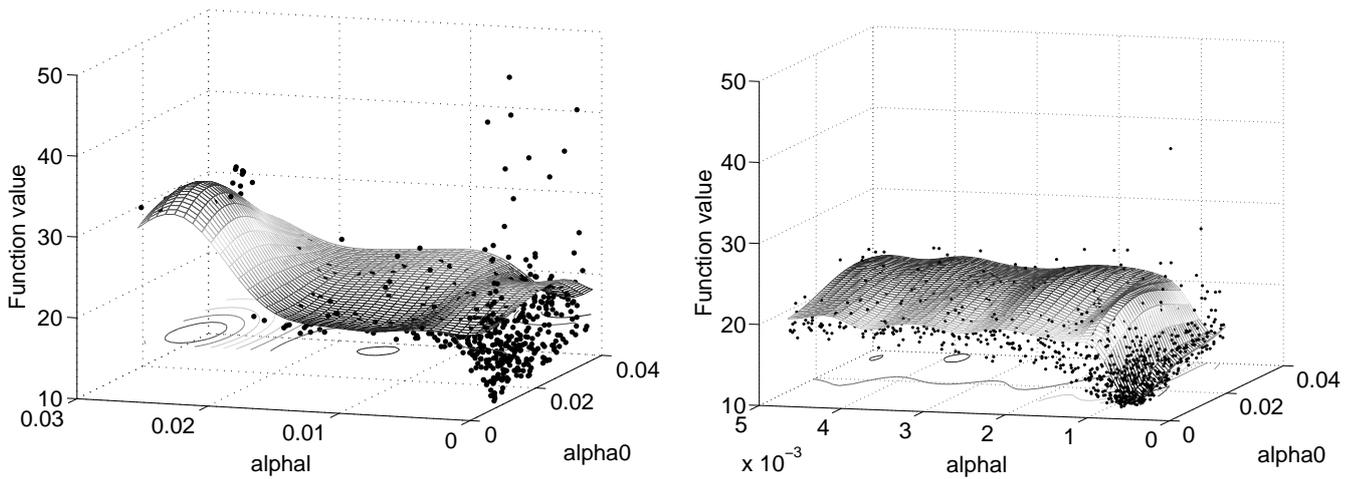


Bild 6: Links: Interaktion der Faktoren α_L und α nach 500 Auswertungen des INT Modells. Die Punkte stellen die Auswertungen dar, sie zeigen starke Fluktuationen im Zielwert (aufgrund der Variation der anderen, hier nicht gezeigten Parameter). Die Fläche ist die SPO-Approximation an die Punkte, die die Basis für weitere Auswertungen ist. Der Faktor α_L hat anscheinend den größten Effekt, kleinere α_L Werte führen zur Verbesserung, aber auch zu höherer Varianz. Rechts: In einer späteren Phase der SPO-Optimierung kann durch Einschränkung der ROI eine wesentliche Reduktion der Varianz erzielt werden, die schwarzen Punkte liegen dichter beieinander.

Tabelle 2: Überblick über die Prognosegüte der einzelnen Verfahren mit und ohne SPO auf dem gesamten Datensatz (108 Tage). Das beste Verfahren in jeder Spalte ist weiß unterlegt.

Verfahren	$\langle RMSE \rangle$ zufällige Parametersets	RMSE manuelles Parameterset	RMSE optimiertes Parameterset
FIR	25.42	25.57	20.10
NARX	85.22	75.80	38.15
ODE	39.25	13.60	9.99
INT	31.75	12.72	9.49

werden manuell völlig falsch eingestellt? Deshalb stellen wir in Tab. 2 drei verschiedene Messungen vor: Erstens haben wir in einem vom Anwender vorgegebenen Bereich (jeweils kleinster und größter zulässiger Wert) 100 zufällige Einstellungen der Modellfaktoren generiert und die zu jeder Einstellung gehörenden Vorhersagefehler berechnet. Zweitens wurde eine vom Anwender nach manuellem Tuning der Modellfaktoren gefundene Einstellung simuliert. Drittens wurde mit einem Budget von $n = 1000$ Modellierungsläufen eine Optimierung der einzelnen Verfahren mittels SPO durchgeführt. Diese Werte sind in Tab. 1 exemplarisch für das INT Modell dargestellt. Die von SPO nach bestmöglicher Einstellung der Modellparameter erzielten RMSE-Werte sind in der vierten Spalte von Tabelle 2 dargestellt.

3.2.3 Wiederholungen für das stochastische Verfahren NARX

Für die SPO Läufe wurden 5 Wiederholungen berechnet, da NARX ein stochastisches Verfahren ist. Die oben dargestellten Ergebnisse zeigen für das NARX Modell ein eher ernüchterndes Bild: Im Mittel wurde ein RMSE von 35.50 erzielt. Die mit dem NARX Modell erzielten Werte weisen eine hohe Varianz auf. Aber: Das Minimum liegt bei 12.35 und ist durchaus mit den anderen Verfahren vergleichbar. Allerdings ist dies ein zufälliger Wert, der von der Initialisierung des Zufallszahlengenerators (Seed) abhängt. Die beste NARX-Konfiguration benutzte 20 delay-states und 18 Neuronen.

3.3 Zweite Untersuchung: Generalisierbarkeit der Ergebnisse auf neuen Daten

Die zweite Serie von Experimenten wurde durchgeführt, um festzustellen, ob die gefundenen Einstellungen sich auf neue Daten übertragen lassen. Dazu wurden die Daten in Trainings- und Testdaten unterteilt. Die erste Hälfte, also 54 Tage, wurde zum Lernen benutzt. Der Fehler wurde dann auf den restlichen Daten bestimmt. Es wurden wiederum die in Abschnitt 3.2 beschriebenen Modellfaktoren optimiert. Tabelle 3 stellt die Ergebnisse zusammen. Es mag zunächst verwundern, dass beim ODE- und INT-Modell die Fehler auf den Trainingsdaten fast immer höher sind als auf den Testdaten. Dies liegt daran, dass der Testzeitraum (Mitte Juni - Mitte August) weniger Niederschläge enthielt als der Trainingszeitraum (Mitte April - Mitte Juni) und damit an trockenen Tagen leichter vorhersagbar war. Korrigiert man aber den Testzeitraum auf gleiche Regenintensität wie den Trainingszeitraum (Faktor $1.428 = 30/21$ Regentage), so zeigen die Zahlen in geschweiften Klammern, dass Trainings- und Testfehler jeweils gleichauf liegen. Es findet also durch die Modelle ODE und INT kein „Auswendiglernen“ statt.

4 Diskussion

Trotz der starken kausalen Zusammenhänge zwischen Regen und Füllständen zeigt es sich, dass eine genaue Modellierung des aus Böden, Kanalnetz und RÜB bestehenden dynamischen Systems schwierig ist. Verschiedene Ansätze wie ESN, FIR oder NARX kommen mit den Daten gar nicht oder nur teilweise zurecht. Dass es dabei nicht an ungünstig gewählten Parametern liegt, konnte zumindest im Fall von FIR und NARX durch die systematische Parameterexploration der SPO weitgehend ausgeschlossen werden.

4.1 FIR

Im Vergleich zu den NN-Modellen lassen sich die FIR-Modelle sehr schnell und einfach implementieren [6]. Die Kernroutine besteht aus ca. 10 Zeilen Programmcode. Die Berechnung der Vorhersagewerte ist entsprechend schnell, FIR-Modelle sind zudem sehr stabil. Es handelt sich ebenso wie bei den ODE- und INT-Modellen nicht um „out-of-the-box“ Modelle, d.h. sie müssen vom Anwender selbst implementiert werden. Das von uns implementierte FIR-Modell kann über fünf Faktoren eingestellt werden, die sich gutmütig gegenüber Einstellungsänderungen verhalten. Im Laufe unserer Untersuchungen zeigte sich jedoch relativ schnell, dass FIR-Modelle nicht die gleiche Vorhersagegüte wie die ODE- und INT-Modelle erzielen konnten. Tabelle 2 zeigt, dass die FIR-Modelle bessere Ergebnisse erzielen als alle anderen Modelle, wenn die Faktoreinstellungen zufällig (allerdings aus einer vom Anwender als sinnvoll beschriebenen ROI) gewählt werden. Stellt man jedoch die Faktoren ein, z.B. indem man Erfahrungen aus Testläufen heranzieht oder SPO anwendet, dann verlieren FIR-Modelle im Vergleich zu ODE und INT eindeutig.

Wir haben dennoch die FIR-Modelle im Portfolio der von uns betrachteten Modelle belassen, da sie eine gute Basis für einen Vergleich mit komplexeren Modellen (ESN, NARX, ODE und INT) liefern. Wenn ein komplexeres Modell nicht in der Lage ist, die FIR Resultate zu übertreffen, wirft dies ein schlechtes Licht auf dieses Verfahren.

4.2 NARX

NARX-Modelle zeigten auf den mit SWWM [5] künstlich generierten Regendaten sehr gute Ergebnisse [6]. Diese Resultate lassen sich aber nicht auf tatsächlich gemessene Daten, die in der vorliegenden Arbeit benutzt werden, übertragen. Zur Erzeugung der künstlichen Regendaten wurden periodische Funktionen mit Rauschen überlagert, so dass eine regelmäßige Struktur implizit gegeben war. Die tatsächlich gemessenen Regendaten weisen jedoch starke Unregelmäßigkeiten auf (längere Trockenperioden, sehr kurze Niederschlagszeiten, Messfehler mit z.T. negativen Niederschlagsmengen und Ausreißern), so dass die

Tabelle 3: Vergleich der Generalisierbarkeit der einzelnen Verfahren mit und ohne SPO-Optimierung. Die ersten beiden Spalten zeigen den RMSE auf dem Trainingszeitraum (Tage 0...53), die letzten beiden Spalten den RMSE auf dem Testzeitraum (Tage 54...107). Die Zahlen in geschweiften Klammern sind die Testfehler hochgerechnet auf gleiche Regenintensität wie im Trainingszeitraum (siehe Abschnitt 3.3).

Verfahren	RMSE Train (manuell)	RMSE Train (mit SPO)	RMSE Test (manuell)	RMSE Test (mit SPO)
FIR	33.45	20.05	13.73 {19.61}	13.91{19.86}
NARX	50.86	17.25	20.38 {29.10}	9.91 {14.15}
ODE	13.15	11.03	12.18 {17.40}	8.14 {11.62}
INT	14.99	10.82	9.47 { 13.53 }	7.71 { 11.01 }

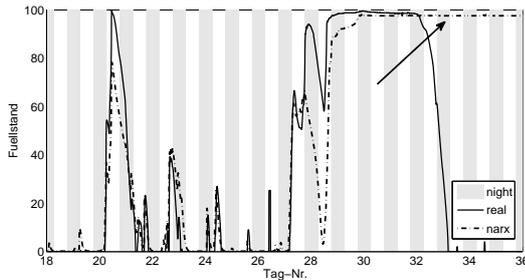


Bild 7: NARX Modellierungsfehler. Der Pfeil kennzeichnet den Bereich, in dem das NARX-Modell nicht „zurückschwingt“, sondern einen konstant hohen Füllstand (größer als 90%) vorher-sagt. Dieser Fehler trat systematisch in jeder NARX Simulation auf.

auf den künstlich erzeugten Daten gefundenen Ergebnisse nicht wiederholt werden konnten.

In der Anfangsphase der Simulation, z.B. während der ersten 25 Tage (siehe Bild 7), erzielten NARX-Modelle einen guten Vorhersagefehler. Das Modell ging aber dann in einen nahezu gesättigten Zustand (ca. 90% Füllstand) über, der konstant bis zum Ende der Simulation prognostiziert wurde. Ein ähnliches Verhalten zeigte auch ESN. Dieser Fehler trat systematisch auf, so dass wir NARX Modelle für diese Art von Daten als nicht geeignet halten. Zudem erfordern NARX-Modelle durch den Trainingsaufwand eine signifikant längere Laufzeit als alle anderen von uns betrachteten Modelle.

Sicherlich gibt es effektivere Verfahren für Verbesserung der Faktoren des NARX Modells. Die von uns gewählte SPO Modellierung ist für zwei Faktoren überdimensioniert. SPO findet normalerweise Anwendung, falls drei oder mehr Faktoren zu optimieren sind. Eine sinnvolle Obergrenze liegt bei 20 Faktoren. Aber auch Modelle mit mehreren hundert oder gar tausend Faktoren können nach einem vorher durchgeführten Screening, z.B. *sequential bifurcation* [24], mit SPO optimiert werden. Um eine Vergleichbarkeit mit den anderen Techniken zu gewährleisten, haben wir uns auch für das NARX-Modell für die Standard-SPO Vorgehensweise entschieden. Jedes der von uns betrachteten Modelle (FIR, NARX, ODE und INT) wurde mit der gleichen Systematik optimiert.

4.3 ODE und INT

Die modellbasierten Ansätze ODE und INT zeigen hier deutliche Vorteile. Bereits mit den manuell, vor dem SPO-Einsatz gefundenen Parameter erreicht man mit RMSE 13.60 bzw. 12.72 eine starke Verbesserung (61% bzw. 64%) gegenüber FIR und NARX. Der Einsatz von SPO ist wichtig, denn diese bereits guten Werte konnten durch SPO nochmals um 26% gesteigert werden (s. Tab. 2). Die Verbesserungen sind auch visuell deutlich sichtbar, wie Bild 8 am Beispiel von INT zeigt.

Bei den SPO-Läufen zu ODE und INT stellte sich heraus, dass eine Minimierung der Zielfehlers MSE zu langsamerer Konvergenz und schlechteren Resultaten führte als die Minimierung des RMSE. Dies ist ein wichtiges und auf den ersten Blick überraschendes Resultat, da ja beide Fehler streng monoton miteinander zusammenhängen. Der Grund für das bessere Abschneiden von RMSE hängt unseres Erachtens damit zusammen, dass SPO an die Fehlerpunkte im Parameterraum (s. Bild 6) eine möglichst glatte Fläche zu fitten versucht und gemäß der Form dieser Fläche neue Designs generiert. Dies gelingt bei quadratischer Fehlerfunktion MSE und einzelnen Ausreißern schlechter als beim RMSE, der die Ausreißer glättet. Es ist interessant, dass sich solche Unterschiede erst bei realen Anwendungsproblemen zeigen, bei denen die Varianz besonders in der Anphangsphase hoch ist.

Sehr nützlich an SPO ist, dass wir einen experimentell-systematischen Zugang zur Bedeutung der einzelnen Parameter bekommen. So zeigt sich z.B. im Modell INT, dass der Parameter α_L sehr wichtig, hingegen die Parameter κ , τ_{in} , τ_{in3} , τ_{out} , τ_{out3} , die das Aussehen der Filterkerne g und h steuern, eher geringe Bedeutung haben. Dieses Wissen können wir wieder in die manuelle Modellentwurfphase zurückspielen und erhalten so Rückschlüsse für die Frage „Bauen wir das richtige Modell?“ Beispielsweise zeigt Bild 3, dass der Filterkern g nach Einsatz von SPO fast wieder die ursprüngliche Exponentialform aus dem ODE-Modell annimmt. Dies ist überraschend, denn das INT-Modell war aus ODE mit dem Ansatz entwickelt worden, mehr Freiheiten für die Form der Filterkerne zu bieten, um den Füllstandsverlauf nach pulsartigem Regeneintrag („Delta-Peak“) besser zu modellieren. SPO zeigt aber, dass die Länge des Filters (Parameter τ_{out}) eher geringe Bedeutung hat und *innerhalb der betrachteten Funk-*

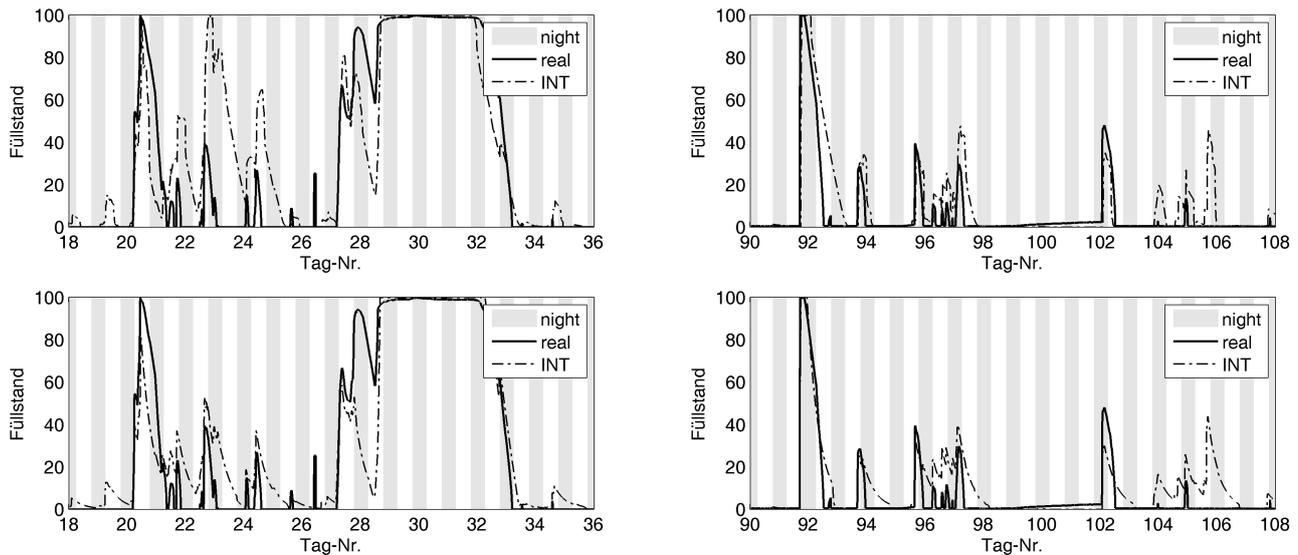


Bild 8: Zwei Ausschnitte aus der Füllstandszeitreihe, Modellierung mit INT. Obere Reihe: manueller Parametersatz, untere Reihe: SPO-optimierter Parametersatz. Deutlich ist in der unteren Reihe eine Verbesserung in den Tagen 23, 24, 32 und 92 zu sehen.

tionsfamilie sogar längere Werte von leichtem Vorteil sind.

Wenn auch Bild 8 zeigt, dass die SPO-basierten Parameter eine deutlich bessere Modellierung erzielen, so ist doch ebenso erkennbar, dass die Modellierung noch Raum für Verbesserung läßt, weil das exponentielle Abklingen des Füllstands zu langsam geschieht. Eine alleinige Verkürzung von τ_{out} liefert aber immer schlechtere RMSE-Werte. Dies führt uns zu der Hypothese, dass die angebotene Funktionsfamilie der Filterkerne zu restriktiv ist. Weitere Filterkernformen, z.T. auch mit nicht-exponentiellem Abfall, sollten in einer zukünftigen Modellentwurfsphase miteinander kombiniert werden. Dem Einsatz von SPO kommt hierbei der Verdienst zu, dass es (zumindest mit hoher Wahrscheinlichkeit) systematisch ausgeschlossen werden kann, in der betrachteten Funktionsfamilie bessere Parametereinstellungen zu finden. So wird der Modellentwurfsprozess durch systematische Experimente mittels SPO zielgerichtet gesteuert.

5 Zusammenfassung

Zeitreihen mit intermittierender Aktivität treten in zahlreichen Modellierungs- und Prognoseanwendungen der Automatisierungstechnik auf und sind schwierig zu prognostizieren. Wir betrachteten exemplarisch einen Anwendungsfall aus der Wasserwirtschaft. Auch wenn kausale Zusammenhänge zur Zielgröße klar erkennbar sind, tun sich bestimmte Prognoseverfahren wie FIR, NARX oder ESN hier oft schwer. Eine problemspezifische Modellierung (ODE oder INT), die kausale Effekte erster Ordnung in Gleichungen modelliert, erzielt bessere Ergebnisse. Sie steht allerdings vor dem Problem, dass viele Parameter eingestellt werden müssen und dass die Wichtigkeit einzelner Terme bewertet werden muss.

Es kann also festgehalten werden, dass einige CI-Verfahren, hier: NARX, ESN, die auf simulierten oder hinreichend glatten Daten eine sehr gute Performance gezeigt haben [6, 11], auf den intermittierenden Daten der realen Meßstellen *ohne* Datenvorverarbeitung keinen kleinen Prognosefehler erzielten und/oder instabiles Verhalten zeigten. Dies liegt aber unseres Erachtens nicht in den Verfahren an sich, sondern in einer noch fehlenden Datenvorverarbeitung begründet. Um den Einsatzbereich der CI-Verfahren möglichst breit zu gestalten, rückt die Bedeutung einer geeigneten, allerdings noch zu erforschenden Datenvorverarbeitung in den Blickpunkt. Es ist unsere Absicht, zu einem späteren Zeitpunkt mit einer solchen geeigneten Datenvorverarbeitung insbesondere den Ansatz ESN, dem wir aufgrund seiner vielgestaltigen Dynamik ein hohes Potential einräumen, erneut und umfassender zu untersuchen.

Zusammenfassend konnten wir mit dem systematischen Ansatz der SPO folgende wichtige Aussagen gewinnen:

- **Vergleichbarkeit:** Es liegt nicht an ungünstig gewählten Parametern, dass Modelle wie FIR oder NARX eine schlechtere Performance zeigen. Mit hoher Wahrscheinlichkeit sind FIR und NARX für diese Modellierungsaufgabe nicht gut geeignet.
- **Performanz:** Die bereits recht guten manuellen Ergebnisse für ODE und INT (Faktor 2 bis 6 besserer RMSE als FIR bzw. NARX) konnten durch SPO nochmals um 30-40% gesteigert werden (s. Tabelle 2).
- **Teilautomatisierung:** Der oft sehr mühsame und zeitaufwändige Prozess des Parameter-Tuning läßt sich teilweise automatisieren.
- **Relevanz:** Die Zusatzinformationen, die SPO liefert, erlauben es, die Wichtigkeit einzelner Parameter und ihrer Wertebereiche abzuschätzen. Daraus erschließen sich oftmals überraschende Einsichten über die Modellierung sowie Ansätze, wie sich möglicherweise ein

verbessertes Modell bauen läßt.

Gerade zum letzten Punkt konnten im Rahmen dieser Arbeit erste Ansätze gewonnen werden, die wir planen, zukünftig für eine genauere Modellierung zu nutzen. Die Prognosen über längere Beobachtungszeiträume sind noch nicht perfekt, dies kann aber basierend auf nur einem Input auch nicht unbedingt erwartet werden. Es ist geplant, weitere Datenquellen hinzuzuziehen (mehr Regenmeßstellen, Temperatur und Luftfeuchte-Daten, Sonnenscheindauer, Tageslänge etc.) und deren Parameter schrittweise durch SPO zu optimieren.

Danksagung

Für die Bereitstellung von Daten und Fotos aus dem KANNST-Projekt danken wir Prof. Dr. Michael Bongards und Dipl.-Ing. Tanja Hilmer. Das FIR-Modell wurde im Rahmen der Vorlesung „Computational Intelligence“ an der FH Köln von Christopher Claes entwickelt [6]. Teile dieser Arbeit wurden durch die FH Köln im Rahmen des Forschungsschwerpunktes COSA gefördert.

Literatur

- [1] Bartz-Beielstein, T.: *Experimental Research in Evolutionary Computation—The New Experimentalism*. Natural Computing Series. Berlin, Heidelberg, New York: Springer. 2006.
- [2] Bongards, M.: Online-Konzentrationsmessung in Kanalnetzen – Technik und Betriebsergebnisse. Techn. Ber., Cologne University of Applied Sciences. 2007.
- [3] Grüning, H.: Abflusssteuerung - quo vadis? *KA Korrespondenz Abwasser, Abfall* 55 (2008), S. 358–364.
- [4] Hilmer, T.; Bongards, M.: Integrierte Steuer- und Regelstrategien für Kanalnetz und Kläranlage. Techn. Ber., Cologne University of Applied Sciences. 2008.
- [5] U.S. Environmental Protection Agency: Storm Water Management Model. www.epa.gov/ednrmr1/models/swmm/index.htm, Online; Stand 16.08.08. 2008.
- [6] Bartz-Beielstein, T.; Bongards, M.; Claes, C.; Konen, W.; Westenberger, H.: Datenanalyse und Prozessoptimierung für Kanalnetze und Kläranlagen mit CI-Methoden. In: *Proc. 17th Workshop Computational Intelligence* (Mikut, R.; Reischl, M., Hg.), S. 132–138. Universitätsverlag, Karlsruhe. 2007.
- [7] de A. Barreto, G.; Araújo, A. F. R.: A self-organizing NARX network and its application to prediction of chaotic time series. In: *Proc. of the IEEE-INNS Int. Joint Conf. on Neural Networks, (IJCNN'01)*, Bd. 3, S. 2144–2149. Washington, D.C. URL citeseer.ist.psu.edu/barreto01selforganizing.html. 2001.
- [8] Giles, C. L.; Lin, T.; Horne, B.: Remembering the Past: The Role of Embedded Memory in Recurrent Neural Network Architectures. In: *Neural Networks for Signal Processing VII: Proceedings of the 1997 IEEE Workshop*, S. 34–43. Piscataway, NJ: IEEE Press. URL citeseer.ist.psu.edu/giles97remembering.html. 1997.
- [9] Siegelmann, H. T.; Horne, B. G.; Giles, C. L.: Computational capabilities of recurrent NARX neural networks. Techn. Ber. UMIACS-TR-95-12 and CS-TR-3408, University of Maryland. URL citeseer.ist.psu.edu/siegelmann97computational.html. 1995.
- [10] Jaeger, H.: The echo state approach to analysing and training recurrent neural networks. Techn. Ber. 148, Fraunhofer Institute for Autonomous Intelligent Systems (AIS), Sankt Augustin. 2001.
- [11] Jaeger, H.; Haas, H.: Harnessing Nonlinearity: Predicting Chaotic Systems and Saving Energy in Wireless Communication. *Science* (2004), S. 78–80.
- [12] Bartz-Beielstein, T.; Lasarczyk, C.; Preuß, M.: Sequential Parameter Optimization. In: *Proceedings 2005 Congress on Evolutionary Computation (CEC'05), Edinburgh, Scotland* (McKay, B.; et al., Hg.), Bd. 1, S. 773–780. Piscataway NJ: IEEE Press. 2005.
- [13] KANNST: Zeitreihen Regenüberlaufbecken. www.gm.fh-koeln.de/~konen/at2008-timeseries, Online; Stand 16.12.08. 2006.
- [14] Maass, W.; Natschläger, T.; Markram, H.: Real-time computing without stable states: A new framework for neural computation based on perturbations. *Neural Computation* 14 (2002), S. 2531–2560.
- [15] Demuth, H.; Beale, M.; Hagan, M.: *Neural Network Toolbox 6: Users Guide*. The MathWorks, Inc. 2008.
- [16] Bellman, R. E.: *Adaptive Control Processes*. Princeton University Press. 1961.
- [17] Kleijnen, J. P. C.: *Statistical Tools for Simulation Practitioners*. New York NY: Marcel Dekker. 1987.
- [18] Sacks, J.; Welch, W. J.; Mitchell, T. J.; Wynn, H. P.: Design and analysis of computer experiments. *Statistical Science* 4 (1989) 4, S. 409–435.
- [19] Santner, T. J.; Williams, B. J.; Notz, W. I.: *The Design and Analysis of Computer Experiments*. Berlin, Heidelberg, New York: Springer. 2003.
- [20] Bartz-Beielstein, T.; Parsopoulos, K. E.; Vrahatis, M. N.: Design and analysis of optimization algorithms using computational statistics. *Applied Numerical Analysis and Computational Mathematics (ANACM)* 1 (2004) 2, S. 413–433.
- [21] Bartz-Beielstein, T.; Preuss, M.: Moderne Methoden zur experimentellen Analyse evolutionärer Verfahren. In: *Proc. 16th Workshop Computational Intelligence* (Mikut, R.; Reischl, M., Hg.), S. 25–32. Universitätsverlag, Karlsruhe. 2006.
- [22] Bartz-Beielstein, T.; Zimmer, T.; Konen, W.: Moderne CI-Verfahren zur Zeitreihenanalyse. In: *Proc. 18th Workshop Computational Intelligence* (Mikut, R.; Reischl, M., Hg.). Universitätsverlag, Karlsruhe. Im Druck. 2008.
- [23] Konen, W.; Bartz-Beielstein, T.; Westenberger, H.: Computational Intelligence and Data Mining – Datenanalyse und Prozessoptimierung am Beispiel Kläranlagen. Techn. Ber., Cologne University of Applied Sciences. 2007.
- [24] Kleijnen, J. P. C.: *Design and analysis of simulation experiments*. New York NY: Springer. 2008.

Manuskripteingang: 31. August 2008.



Prof. Dr. rer. nat. Wolfgang Konen ist Leiter des Labors für Mathematik im Institut für Informatik der Fachhochschule Köln und Mitglied im Forschungsschwerpunkt COSA (Computational Services in Automation). Hauptarbeitsgebiete: Simulation, Prognose, lernende Systeme.

Adresse: Fachhochschule Köln, Fakultät für Informatik und Ingenieurwissenschaften, Steinmüllerallee 1, D-51643 Gummersbach, E-Mail: wolfgang.konen@fh-koeln.de



Tobias Zimmer ist Student der Technischen Informatik an der Fachhochschule Köln. Er arbeitet als studentische Hilfskraft im Forschungsschwerpunkt COSA.

Adresse: siehe oben, E-Mail: zimmer.tobi@gmx.de



Prof. Dr. rer. nat. Thomas Bartz-Beielstein ist Professor für Mathematik und Informatik an der Fakultät für Informatik und Ingenieurwissenschaften der Fachhochschule Köln und Mitglied im Forschungsschwerpunkt COSA. Hauptarbeitsgebiete: Statistische Versuchsplanung, Simulation und Optimierung komplexer technischer Systeme, Computational Intelligence.

Adresse: siehe oben, E-Mail: thomas.bartz-beielstein@fh-koeln.de