

Parameter Estimation in Complex Nonlinear Dynamical Systems

Dissertation

Zur Erlangung des akademischen Grades

Doktoringenieur (Dr.-Ing.)

vorgelegt der Fakultät für Informatik und Automatisierung
der Technischen Universität Ilmenau

von M.Eng. Quoc Dong Vu
geboren am 27.12.1975 in Thaibinh

Gutachter

1. Prof. Dr.-Ing. habil. Pu Li
2. Prof. Dr.-Ing. habil. Christoph Ament
3. Prof. Dr. rer. nat. habil. Gerhard-Wilhelm Weber

Tag der Einreichung: 13.04.2015

Tag der wissenschaftlichen Aussprache: 02.10.2015

urn:nbn:de:gbv:ilm1-2015000394

Parameter Estimation in Complex Nonlinear Dynamical Systems

A Dissertation submitted in partial fulfillment
of the requirements for the degree of
Doctor of Engineering (Dr.-Ing.)



**TECHNISCHE UNIVERSITÄT
ILMENAU**

Faculty of Computer Science and Automation

by M.Eng. Quoc Dong Vu
born on 27.12.1975 in Thaibinh

Referees

1. Prof. Dr.-Ing. habil. Pu Li
2. Prof. Dr.-Ing. habil. Christoph Ament
3. Prof. Dr. rer. nat. habil. Gerhard-Wilhelm Weber

Date of submission: 13.04.2015

Date of scientific defense: 02.10.2015

Acknowledgements

My dissertation would certainly never have been finished without the guidance of my advisor, help from friends, and support from my family during my study at the Group of Simulation and Optimal Processes (SOP), Ilmenau University of Technology.

Firstly, I would like to express my sincere gratitude to my advisor Professor Pu Li for the constant support of research, for his ideas, motivation, patience, and continuous encouragement. His effective guidance and firm requirement promoted me in all the long time of research and writing of this dissertation.

Besides my advisor, I truly thank the rest of my thesis committee: Professor Christoph Ament, Professor Gerhard-Wilhelm Weber, Professor Horst Puta, Professor Jens Haueisen, and Professor Daniel Baumgarten, for their time to review my thesis, their insightful comments and advices to improve it.

My completion of this thesis could not have been accomplished without the support of my current colleagues in our SOP Group, namely, Dr. Siegbert Hopfgarten, Dr. Abebe Geletu, Dr. Aouss Gabash, Mr. Evgeny Lazutkin, Mr. Xujiang Huang, Mr. Jens Hollandmoritz, Mr. Björn Töpfer, Mr. Duc Dai Pham; as well as formers namely, Dr. Martin Bartl, Mr. Stefan Röhl, Dr. Hui Zhang, Dr. Ines Mynttinen, Dr. Michael Klöppel, Mrs. Rim Abdul Jawad, Dr. Jasem Tamimi, Mr. Wolfgang Heß and Mrs. Rita Helm, with whom my stay at TU Ilmenau became a wonderful experience.

I would like to thank Professor Hongye Su, Professor Weirong Hong, and Dr Chao Zhao at Zhejiang University for their efficient cooperation in this research.

I greatly appreciate the financial support from Vietnamese Government (Project 322) and Thuringian Graduate Support Act (ThürGFVO) that funded parts of this research work. Additional support was provided by the German Academic Exchange Service (DAAD) for the short visits to Zhejiang University of China in 2008, 2009 and 2010.

I am very thankful to all of my loving Vietnamese friends with whom I shared so much brilliant times during my stay in Germany.

Last, but not the least, I would like to express my deepest gratitude to my family: to my beloved wife and son, to my parents and to my brother and sister for their great love and support during my study.

Abstract

The aim of this dissertation is to develop mathematical/numerical approaches to parameter estimation in nonlinear dynamical systems that are modeled by ordinary differential equations or differential algebraic equations. Parameters in mathematical models often cannot be calculated by applying existing laws of nature or measured directly and therefore they need being obtained from experimental data through an estimation step. Numerical methods to parameter estimation are challenges due to undesirable characteristics, such as stiffness, ill-conditioning and correlations among parameters of model equations that cause computational intensiveness, convergence problems as well as non-uniqueness of the solution of the parameters. The goal of this dissertation is therefore two-fold: first to develop efficient estimation strategies and numerical algorithms which should be able to efficiently solve such challenging estimation problems, including multiple data profiles and large parameter sets, and second to develop a method for identifiability analysis to identify the correlations among parameters in complex model equations.

Direct strategies to solve parameter estimation problem, dynamic optimization problems, include direct sequential, direct simultaneous, direct multiple shooting, quasi-sequential, and combined multiple shooting and collocation strategy. This dissertation especially focuses on quasi-sequential strategy and combined multiple shooting and collocation strategy. This study couples the interior point method with the quasi-sequential strategy to solve dynamic optimization problems, particularly parameter estimation problems. Furthermore, an improvement of this method is developed to solve parameter estimation problems in that the reduced-space method of interior point strategy is used. In the previous work, combined multiple shooting and collocation strategy method was proved to be efficient to solve dynamic optimization problems with all constraints of states imposed only at the nodes of the discretization

grids. In this study, an improvement to combined multiple shooting and collocation strategy is made to impose all state values on constraints at all collocation points in order to improve the quality of the dynamic optimization problems.

To improve the quality of the parameter estimation solutions, multiple data-sets of measurement data usually are used. In this study, an extension to a dynamic three-stage estimation framework is made to the parameter estimation problem with a derivation to the quasi-sequential strategy algorithm. Due to the decomposition of the optimization variables, the proposed approach can efficiently solve time-dependent parameter estimation problems with multiple data profiles. A parallel computing strategy using the message passing interface (MPI) method is also applied successfully to boost computation efficiency.

The second challenging task in parameter estimation of nonlinear dynamic models is the identifiability of the parameters. The identifiability property of a model is used to answer the question whether the estimated parameters are unique. In this thesis, a systematic approach to identify both pairwise parameter correlations and higher order interrelationships among parameters in nonlinear dynamic models is developed. The correlation information obtained in this way clarifies both structural and practical non-identifiability. Moreover, this correlation analysis also shows that a minimum number of data sets, which corresponds to the maximum number of correlated parameters among the correlation groups, with different inputs for experimental design are needed to relieve the parameter correlations. The result of this correlation analysis provides a necessary condition for experimental design in order to collect suitable measurement data for unique parameter estimation.

Zusammenfassung

Ziel der vorliegenden Dissertationsschrift ist es, mathematische bzw. numerische Verfahren zur Parameterschätzung für nichtlineare dynamische Systeme zu entwickeln, deren Modelle in Form von gewöhnlichen Differentialgleichungen oder differentialalgebraischen Gleichungen vorliegen. Derartige Modelle zu validieren gelingt in der Regel nicht, indem Naturgesetze ausgenutzt werden können, vielmehr sind häufig aufwendige Messungen erforderlich, deren Datensätze dann auszuwerten sind. Numerische Verfahren zur Parameterschätzung unterliegen solchen Herausforderungen und unerwünschten Effekten wie Steifheit, schlechter Konditionierung oder Korrelationen zwischen zu schätzenden Parametern von Modellgleichungen, die rechenaufwendig sein, aber die auch schlechte Konvergenz bzw. keine Eindeutigkeit der Schätzung aufweisen können. Die Arbeit verfolgt daher zwei Ziele: erstens effektive Schätzstrategien und numerische Algorithmen zu entwickeln, die komplexe Parameter-Schätzprobleme lösen und dazu mit multiplen Datenprofilen bzw. mit großen Datensätzen umgehen können. Zweites Ziel ist es, eine Methode zur Identifizierbarkeit für korrelierte Parameter in komplexen Modellgleichungen zu entwickeln.

Eine leistungsfähige direkte Strategie zur Lösung von Parameter-Schätzaufgaben ist die Umwandlung in ein Problem der optimalen Steuerung. Dies schließt folgende Methoden ein: direkte sequentielle und quasi-sequentielle Verfahren, direkte simultane Strategien, direkte Mehrfach-Schießverfahren und kombinierte Mehrfach-Schießverfahren mit Kollokationsmethoden. Diese Arbeit orientiert besonders auf quasi-sequentielle Verfahren und kombinierte Mehrfach-Schießverfahren mit Kollokationsmethoden. Speziell zur Lösung von Parameterschätzproblemen wurde die Innere-Punkte-Verfahren mit dem quasi-sequentielle Verfahren gekoppelt. Eine weitere Verbesserung zur Lösung von Parameterschätzproblemen konnte erreicht werden, indem die „reduced-space“ Technik der Innere-Punkte-Verfahren benutzt wurde. Die Leistungsfähigkeit der kom-

binierte Mehrfach-Schießverfahren mit Kollokationsmethoden zur Lösung von Dynamischen Optimierungsproblemen war bisher damit verbunden, dass die Zustandsbeschränkungen nur in den Knoten des Diskretisierungsgitters eingehalten werden konnten. Mit dieser Arbeit konnte die kombinierte Mehrfach-Schießverfahren mit Kollokationsmethoden verbessert werden, so dass alle Zustandsgrößen die vorgegebenen Beschränkungen in allen Kollokationspunkten einhalten, was zu einer deutlichen Verbesserung des letztlich zu lösenden Optimalsteuerungsproblems zur Parameterschätzung führt.

Um die Qualität Parameterschätzung zu verbessern, werden üblicherweise mehrfache Messdatensätze benutzt. In der vorgelegten Dissertation wurde zur Parameterschätzung eine dynamische Drei-Stufen-Strategie mit einem eingebauten quasi-sequenziellen Verfahren entwickelt. Durch die Zerlegung der Optimierungsvariablen kann das vorgeschlagene Verfahren sehr effizient zeitabhängige Parameter-Schätzaufgaben mit mehrfachen Datenprofilen lösen. Zur Steigerung der Recheneffizienz wurde darüber hinaus erfolgreich eine Parallel-Rechner Strategie eingebaut, die das sog. „message passing interface“ (MPI) nutzt.

Eine zweite Herausforderung für die Parameterschätzung nichtlinearer dynamischer Modelle betrifft die Identifizierbarkeit der Parameter. Damit verbunden ist die Frage nach der Eindeutigkeit der geschätzten Parameter. In dieser Arbeit wird auch ein systematisches Vorgehen zur Identifizierung paarweiser Korrelationen als auch zum Erkennen von Wechselwirkungen höherer Ordnung zwischen Parametern in nicht-linearen dynamischen Systemen vorgeschlagen. Damit lässt sich sowohl die strukturelle als auch eine praktische „Nichtidentifizierbarkeit“ klären. Darüber hinaus lässt sich durch eine Korrelationsanalyse darauf schließen, welche minimale Zahl von Datensätzen mit unterschiedlichen Eingängen zum Entwurf benötigt wird, um Parameterkorrelationen auszuschließen. Dies wiederum entspricht einer maximalen Zahl von korrelierten Parametern innerhalb der Korrelations-Gruppen. Im Ergebnis der Korrelationsanalyse erhält man eine notwendige Bedingung wie viele Messdaten für eine eindeutige Parameterschätzung benötigt werden.