

BUDAPESTI MŰSZAKI
ÉS GAZDASÁGTUDOMÁNYI EGYETEM

Nemlineáris dinamikai rendszerek identifikációja
Gauss-folyamat alapú technikákkal

Név:

Dobák Dávid

Témavezető:

Dr. Csernák Gábor

Neptun-kód:

XX34G7

Dátum:

2022. november

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	3
2. Elméleti áttekintés	4
2.1. Matematikai alapok	4
2.1.1. Frekventista és bayesiánus statisztika, Bayes-tétel, bayesiánus követ- keztetés	4
2.1.2. Többváltozós normáeloszlás	5
2.1.3. Kernel függvény	6
2.1.4. Kernel hatása n-dimenziós normáeloszlásból származó vektorokra .	8
2.1.5. Gauss-folyamat	10
2.1.6. Sztochasztikus differenciálegyenletek, Gauss-folyamat átírása	12
2.1.7. A posteriori eloszlás, Markov Chain Monte Carlo	14
2.1.8. Metropolis-Hastings és Metropolis MCMC	16
2.1.9. Kálmán-szűrő	17
2.2. Nemlineáris dinamikai rendszerek	18
2.2.1. Duffing-oszcillátor	18
2.2.2. Van der Pol-oszcillátor	19
2.3. Latent Force Model	19
2.3.1. Az LFM eredeti megközelítése	19
2.3.2. LFM nemlineáris dinamikai rendszer identifikációjához	20
3. Eredmények bemutatása	24
3.1. Algoritmus tesztelése szimulált lineáris oszcillátorral	25
3.2. Szimulált Duffing-oszcillátor	26
4. Továbblépési lehetőségek, célkitűzések, trendek	27
4.1. Ipari szereplőkkel való kooperáció	27
4.2. Kalman-Bucy filter	28
4.3. Extended Kalman filter és unscented Kalman filter	28
5. Összefoglaló	28
6. Irodalomjegyzék	29

Köszönetnyilvánítás

A dolgozat nem jöhetett volna létre dr. Csernák Gábor nélkül, aki a témát ígéretesnek találta és kidolgozásra javasolta, kérdéseimmel pedig mindig fordulhattam hozzá.

Köszönet illeti dr. John N. Tsitsiklis professzort, a Massachusetts Institute of Technology (MIT) munkatársát, amiért oktatási anyagait az MIT OpenCourseWare program keretein belül mindenki számára elérhetővé tette, ezáltal jó valószínűségszámítási alapokra tettem szert. Köszönet illeti Kevin P. Murphy-t Machine Learning: A Probabilistic Perspective c. grandiózus munkájáért, amelyből rengeteget tanultam és új megvilágításba helyezte a gépi tanulást.

Köszönöm továbbá minden tanáromnak az átadott tudást, ami akár kicsit is segített a munka során.

1. Bevezetés

Manapság a korszerű informatikai eszközök elterjedésével és a számítási teljesítmény rohamos növekedésével (ld. Moore-törvény) elengedhetetlen a mérnökök számára, hogy első kézből tudják kihasználni az ebben rejlő lehetőségeket. A közismert és népszerű mesterséges intelligencia és optimalizációs módszerek, például mesterséges neurális hálók, genetikusan algoritmusok, fuzzy szakértői rendszerek (Ibrahim, 2016) között háttérbe szorul néhány kevésbé ismert, ám annál nagyobb potenciállal rendelkező megoldás. Ezek felhasználásához jól kell ismerni a valószínűségszámítás alapjait, ezt a mérnöki képzés során gyakran méltatlanul háttérbe szoruló területet. A szóban forgó technikák alapját a Gauss-folyamat (Rasmussen, 2003) adja. Az egyik legalapvetőbb műszaki feladat a dinamikai rendszerek modellezése és identifikációja. A hallgatók már képzésük elején is találkozhatnak a probléma egyszerűsített változataival labormérések során, az összetett rendszerek minél pontosabb modellezése pedig kutatás tárgyát képezi még ma is. A linearizált modellek jó tulajdonságaik ellenére (egyszerűség, könnyű implementálhatóság) egyre kevésbé bizonyultak elégségesnek az iparban, hiszen az előbb említett módszerek képességei túlszárnyalják a lineáris regressziót. A nemlineáris regresszióval a lineárisnál jobb megoldás is elérhető, hiszen bármilyen függvényt lehet illeszteni a mérési pontokra, feltéve, hogy ismert a függvény jellege. Ekkor a megoldás a már említett, döntően parametrikus módszerek. Ha azonban a mérések célja éppen a jelleg, azaz a függvény megtalálása, akkor nem parametrikus technikákat kell alkalmazni, hogy a modellfeltevés ne zárja ki azonnal az összes többi függvényt. A nemlineáris dinamikai rendszerek identifikációja nem parametrikus módszerekkel a leírtak miatt aktívan kutatott terület.

Dolgozatomban nemlineáris dinamikai rendszerek identifikációjára alkalmas algoritmust valósítok meg egy újonnan publikált, Gauss-folyamat alapú technikával. A módszer az LFM-ből (Latent Force Model) indul ki és azt a nemlineáris rendszerekre alkalmazható formára alakítva használja. Ez a megoldás magasszintű valószínűségszámítási és mechanikai ismereteket egyesít.

2. Elméleti áttekintés

A fejezet a legfontosabb matematikai összefüggéseket taglalja, melyek a dolgozatban felhasználásra kerültek. Nem minden lépés került leírásra, a leírt pontok közül nem mind került részletes kifejtésre; a dolgozat nem pótolhatja szakkönyvek beható tanulmányozását. Az itt szereplő lépések azonban esszenciálisak a területen használt technikák elsajátításához és egyfajta mérföldkőnek tekinthetők a megértés szempontjából.

2.1. Matematikai alapok

2.1.1. Frekventista és bayesiánus statisztika, Bayes-tétel, bayesiánus következtetés

A statisztika két megközelítést alkalmaz a valószínűségszámítást illetően, a frekventista és a bayesiánus megközelítést. A frekventista esetében a valószínűség egy esemény hosszútávú megfigyelése során tapasztalt előfordulás (például kosárlabdában a pontszerzés esélye kiszámítható sok kosárra dobás esetén a sikeres és az összes kísérlet arányából). A bayesiánus statisztika ezzel szemben a bizonytalanság mérését célozza meg a valószínűségi változót illetően. Ez a megközelítés igen hasznos, ha az előfordulás sokszori és ismételt megfigyelése drága (például törésteszték), vagy éppen lehetetlen (Bajnokok Ligája 2022/23 győztes csapata). A valószínűségszámítás összefüggései mindenesetre mindkét esetben használhatók. Természetesen nem kizárólagos a kétfajta megközelítés, hanem egyazon dolognak két különböző szemléletmódja. A dolgozatban használt technikákhoz a bayesiánus megközelítés alkalmazása célszerű, a továbbiakban erre alapul az elmélet döntő része.

A Bayes-tétel a feltételes valószínűség definíciójából vezethető le. Legyen $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ hármas egy Kolmogorov-féle valószínűségi mező, $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ rendre az eseménytér, σ -algebra az eseménytéren és valószínűségi mérték). Ekkor a feltételes valószínűség az $A, B \in \mathcal{F}$ eseményekre a következő módon definiált, ha $\mathbb{P}(B) > 0$:

$$\mathbb{P}(A|B) = \frac{\mathbb{P}(A \cap B)}{\mathbb{P}(B)}. \quad (2.1)$$

Amennyiben $\mathbb{P}(A) > 0$ is teljesül, felírható $\mathbb{P}(B|A)$ feltételes valószínűség is. Feltéve, hogy $A_1, \dots, A_n$ események teljes eseményrendszer alkotnak, $\mathbb{P}(B)$ kifejezhető a teljes valószínűség tételének megfelelően. Ezekből már felírható a Bayes-tétel:

$$\mathbb{P}(A_k|B) = \frac{\mathbb{P}(B|A_k)\mathbb{P}(A_k)}{\sum_{i=1}^n \mathbb{P}(B|A_i)\mathbb{P}(A_i)}, \quad (2.2)$$

ahol $A_k \in \{A_1, \dots, A_n\}$. A feltételes valószínűség definíciójában alkalmazott kikötést itt is alkalmazni kell, tehát $\mathbb{P}(A_i), \mathbb{P}(B) > 0, \forall i$. A Bayes-tétel folytonos változókra is

általánosítható, illetve arra az esetre is, ha A és B valószínűségi változók közül az egyik diszkrét, a másik pedig folytonos eloszlású. A feltételes sűrűségfüggvény definíciója a feltételes valószínűség sűrűségfüggvényekre vett általánosításával kapható meg, a zéróosztó elkerülése végett itt is kikötés, hogy a nevező nem lehet nulla, tehát a nevezőben szereplő marginális eloszlás mindig nagyobb, mint 0. Az X és Y folytonos valószínűségi változókra a következő formában írható fel az előző tétel, valószínűségek helyett sűrűségfüggvényekkel:

$$f_{X|Y}(x|y) = \frac{f_{Y|X}(y|x)f_X(x)}{\int_X f_{Y|X}(y|x^*)f_X(x^*)dx^*}. \quad (2.3)$$

A bayesiánus következtetés lehetővé teszi ismereteink frissítését egy valószínűségi változóról egy másik valószínűségi változó kimenetelének ismeretében. Ez azt jelenti, hogy a valószínűségi változók szükségképpen nem függetlenek (különben az egész módszer értelmetlen). Az egyenletben $f_X(x)$ jelenti a kiindulási feltételezésünket a valószínűségi változóról (prior), $f_{Y|X}(y|x)$ az előfordulást (likelihood), $f_{X|Y}(x|y)$ pedig a következtetés utáni feltételezést (posterior). A nevezőben szereplő kifejezés valójában $f_Y(y)$ a teljes valószínűség tétele szerint kifejtve, ezért marginális (marginal) eloszlásnak is nevezik (ld. még evidence). A (2.3) egyenlet már ebben a formában is használható összefüggés, de a gépi tanulásban bevett jelölésekkel ez a következő kompakt alakra hozható:

$$f(\boldsymbol{\theta}|\mathcal{D}) \propto f(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta})f(\boldsymbol{\theta}). \quad (2.4)$$

A modellben $\boldsymbol{\theta}$ a paraméterek vektora, $\mathcal{D}$ a megfigyelések halmaza. A likelihood, azaz $f(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta})$ független mérések esetén az egyes mérések valószínűségének szorzataként számítható:

$$f(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta}) = \prod_{x_i \in \mathcal{D}} f(x_i|\boldsymbol{\theta}). \quad (2.5)$$

Ekkor a paraméteres módszerek esetén $\boldsymbol{\theta}$ ezen szorzat maximalizálásával optimalizálható. Ezt nem szokás alkalmazni, sokkal elterjedtebb a szorzat negatív logaritmusának minimalizálása, ekkor az előfordulás logaritmusának neve log likelihood.

2.1.2. Többváltozós normáleloszlás

Az $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_n)^T$ folytonos valószínűségi vektorváltozó n -dimenziós normáleloszlású¹ $\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^n$ várható érték vektorral és $\boldsymbol{\Sigma} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ kovariancia mátrixszal, ha sűrűségfüggvénye:

$$f(x_1, \dots, x_n) = f(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}|\boldsymbol{\Sigma}|^{1/2}} \exp \left[-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) \right]. \quad (2.6)$$

¹A normál eloszlás a legfontosabb eloszlás mind gépi tanulásban, mind jelfeldolgozásban. A centrális határeloszlás-tétel szerint azonos szórással és átlaggal rendelkező különböző eloszlások átlaga normál eloszláshoz tart. A mérési zajt pont ilyen eloszlású zavarok eredményezik, ezért közelítik így a gyakorlatban.

Ennek jelölése a következő: $\mathbf{X} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$. Az n -dimenziós normáleloszlás n -dimenziós vektorokat generál.

Ha az előbb leírtaknak megfelelő $\mathbf{X} = [\mathbf{X}_a \mathbf{X}_b]^T$, akkor az eloszlás a következő módon írható fel:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{X}_a \\ \mathbf{X}_b \end{bmatrix} \sim \mathcal{N} \left(\begin{bmatrix} \boldsymbol{\mu}_a \\ \boldsymbol{\mu}_b \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{aa} & \boldsymbol{\Sigma}_{ab} \\ \boldsymbol{\Sigma}_{ba} & \boldsymbol{\Sigma}_{bb} \end{bmatrix} \right). \quad (2.7)$$

A későbbiekben használt fontos összefüggés, hogy amennyiben $\mathbf{X}$ a (2.7) egyenletben látható eloszlást követi, akkor az $\mathbf{X}_a | \mathbf{X}_b$ feltételes valószínűségi változó eloszlása az alábbi módon írható fel:

$$\mathbf{X}_a | \mathbf{X}_b \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_a + \boldsymbol{\Sigma}_{aa} \boldsymbol{\Sigma}_{bb}^{-1} (\mathbf{X}_b - \boldsymbol{\mu}_b), \boldsymbol{\Sigma}_{aa} - \boldsymbol{\Sigma}_{ab} \boldsymbol{\Sigma}_{bb}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{ba}). \quad (2.8)$$

2.1.3. Kernel függvény

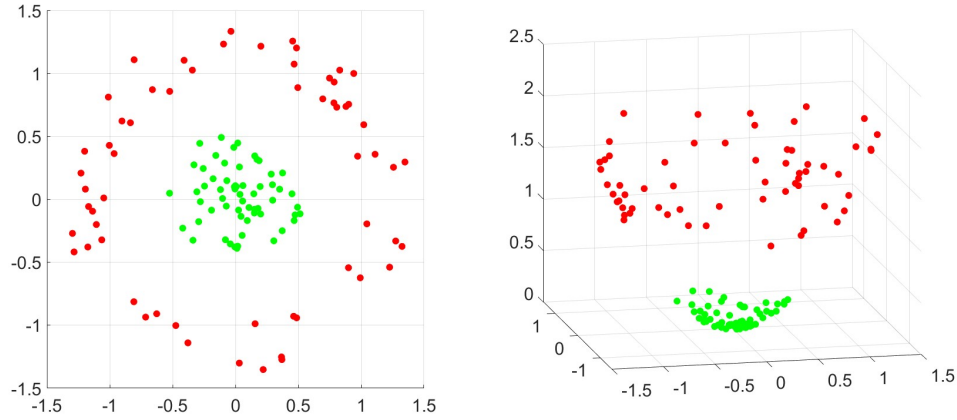
Sok terület használ kernel függvényeket, az értelmezések jelentősen eltérhetnek egymástól és az egzakt matematikai fogalomtól is. Itt célirányosan a Gauss-folyamathoz szükséges szemléletmódot alkalmazom.

A $k : \mathbb{R}^{n \times n} \mapsto \mathbb{R}$ kernel függvény egy $\mathbb{R}^n$ vektortér $\mathbf{x}, \mathbf{x}^*$ elemeihez rendel skalár értéket:

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}^*) = \langle \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}), \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}^*) \rangle. \quad (2.9)$$

A $\boldsymbol{\phi} : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^f$ bázisfüggvény az eredeti térből az ún. feature térbe transzformálja a vektorokat, $\langle \cdot, \cdot \rangle$ pedig a skaláris szorzatot jelöli². A bázisfüggvény lényege, hogy magasabb dimenziójú térbe képezi le a vektortér elemeiből álló mintát, melyek az eredeti térben nem lennének lineárisan szeparálhatók, az új dimenziókkal azonban ez már lehetséges (ld. 2.1. ábra), nem mellékesen ez az SVM-ek (Support Vector Machine) alapelve. Magasabb dimenziójú feature tér esetén egyre nagyobb mennyiségű számítást igényel a bázisfüggvényből kapott pontok kiszámítása. Ennek a számításigénynek a csökkentésére használható ún. kernel trükk: alkalmazásával nem kell transzformálni a vektorokat a magas dimenziójú feature térbe, a kernel függvény kifejezhető az eredeti térből származó vektorok skaláris szorzatának segítségével. A kernel függvény célja a bemenetként kapott vektorok „hasonlóságának” mérése, ez intuitív magyarázatot ad a kernel trükkre, lévén a skaláris szorzat eredménye is egyfajta „hasonlóság” mértékének tekinthető. Minél magasabb a feature tér dimenziója, annál magasabb hatványai szükségesek a vektorok skaláris szorzatának a kernel függvény kiszámításához. Végtelen dimenziós feature tér esetére is

²A matematikusok kevésbé partikuláris meghatározásokat alkalmaznak, pl. $\mathbb{R}^n$ helyett Hilbert-teret. A fogalmak mögött rejlő elv megegyezik, de a bemutatott alkalmazásokban nincs szükség ilyen mértékű absztrakcióra.



2.1. ábra. Bázisfüggvény hatása, piros és zöld színnel jelölve a különböző osztályokba tartozó vektorok. Balra a kétdimenziós eredeti tér, jobbra a háromdimenziós feature tér, ahol már lineárisan szeparálható a minta

fel lehet írni a kernel függvényt a kernel trükkal, ekkor az eredeti skaláris szorzat általában nem látszik explicite. A fontos gyakorlati kérdések azok, hogy milyen függvények alkalmazhatók kernelként és hogyan lehet új kerneleket létrehozni már ismert kernelekből. Mercer elmélete (Minh et al., 2006) szerint a szükséges és elégséges feltétel a függvény pozitív definitése és a paramétereire vett szimmetria. Nagyon fontos tulajdonság, hogy kernelek lineáris kombinációja és kernelek szorzata is kernel, ekkor különböző kernelek előnyös tulajdonságait lehet kombinálni. A kernelek fontos típusa az ún. stationárius kernel, ekkor a kernel nem közvetlenül a vektoroktól, hanem azok különbségétől függ (ez akkor teljesül, ha a kernel eltolás invariáns). Matematikai eszközökkel levezették és bemutatták a fontosabb kerneleket (Genton, 2001). Néhány, a későbbiekben használt kernel: Gauss RBF (radial basis function) α, σ paraméterekkel:

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}^*) = \alpha \exp \left[-\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\|^2}{2\sigma^2} \right]. \quad (2.10)$$

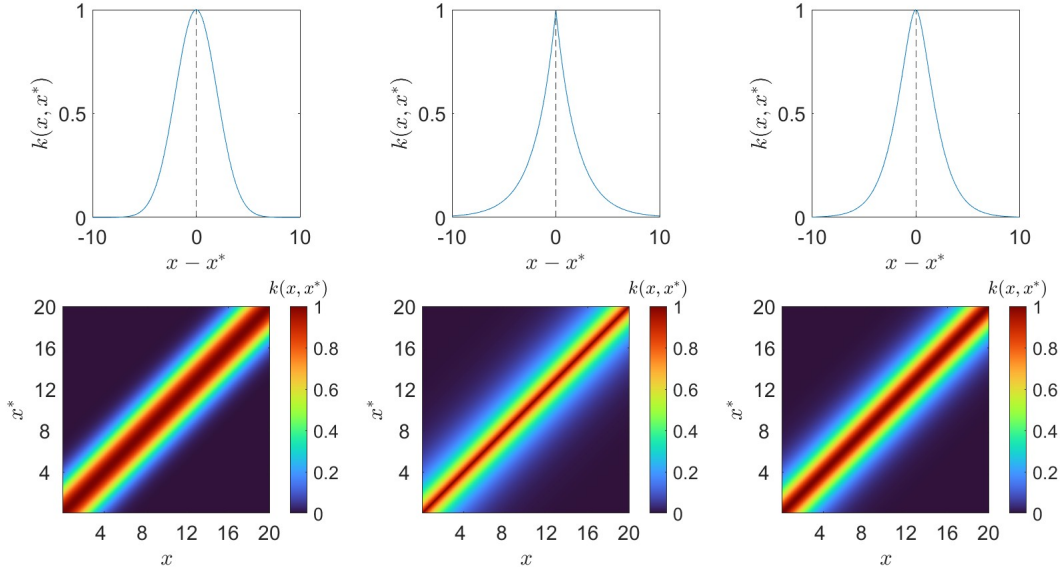
Itt és a továbbiakban a $\|\cdot\|$ jelölés L2-normát, közismert nevén euklideszi normát jelent. Laplace RBF kernel α, σ paraméterekkel:

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}^*) = \alpha \exp \left[-\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\|}{\sigma} \right]. \quad (2.11)$$

Matérn 3/2 kernel α, σ paraméterekkel:

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}^*) = \alpha(1 + \sqrt{3}r) \exp \left[-\sqrt{3}r \right], \quad r = \frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\|}{\sigma}. \quad (2.12)$$

Az előbb felsorolt kernelek jól láthatóan mind stacionáriusak. A 2.2. ábrán láthatók a kernelek azonos paraméter kombinációra.



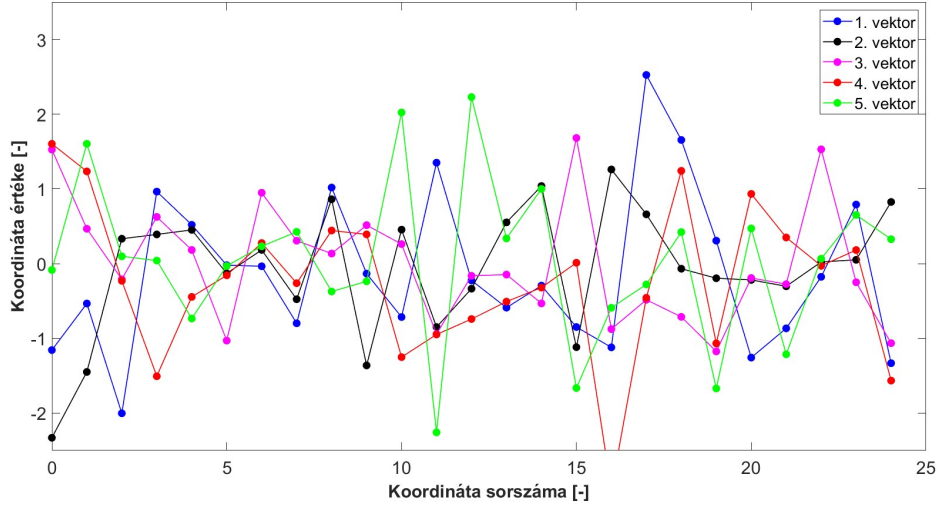
2.2. ábra. Kernel függvények azonos, $\alpha = 1$, $\sigma = 2$ paraméterekkel. Balra Gauss RBF, középen Laplace RBF, jobbra Matérn 3/2

2.1.4. Kernel hatása n-dimenziós normáeloszlásból származó vektorokra

Az n -dimenziós normáeloszlás esetén a kernel függvény simításra használható. A kovariancia mátrix egyes elemeinek a sorában és oszlopában lévő valószínűségi változó kernelét választjuk. Ekkor az egyes kovarianciák olyanok lesznek, hogy minél kisebb az eltérés két változó között, annál nagyobb lesz köztük a kovariancia.

Egy $f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$ függvény simaságának fogalmára több definíció is létezik, de mind-egyik valahányadik rendű (esetleg végtelenedik) deriváltig követeli meg a deriváltak folytonosságát. Egy diszkrét értelmezési tartományú függvény esetén a folytonosság magára a függvényre sem teljesül. Mégis, mivel az értelmezési tartomány kardinális száma $\aleph_0$, sorba rendezhetők a függvény pontjai, és ekkor előírhatók összefüggések szomszédos pontok között, amelyek a folytonos függvények simaságának feleltethetők meg diszkrét esetre. A kernel függvény éppen ilyen összefüggéseket ír le, továbbá kapcsolatot teremt a folytonos és diszkrét eset között, ugyanis a kernel függvény bármekkora dimenziójú kovariancia mátrixot meghatározhat (határesetben végtelen is lehet, ld. következő szakasz).

Ha az $\mathbf{X}$ n -dimenziós folytonos valószínűségi változó $\mathbf{X} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ és $\boldsymbol{\Sigma}$ diagonális, akkor az eloszlás n darab független egyváltozós normáeloszlássá egyszerűsödik, azaz az előző eloszlás helyett az $X_i \sim \mathcal{N}(\mu_i, \sigma_i^2)$, $i \in \{1, \dots, n\}$ eloszlásokat kapjuk. Az egyszerűség kedvéért legyen $\mu_i \equiv \mu$ és $\sigma_i^2 \equiv \sigma^2$. A 2.3. ábrán 25-dimenziós eloszlásból vételezett vektorok láthatók.



2.3. ábra. Gauss-eloszlás diagonális kovariancia mátrixszal, standard egyváltozós normáloszlású komponensekkel

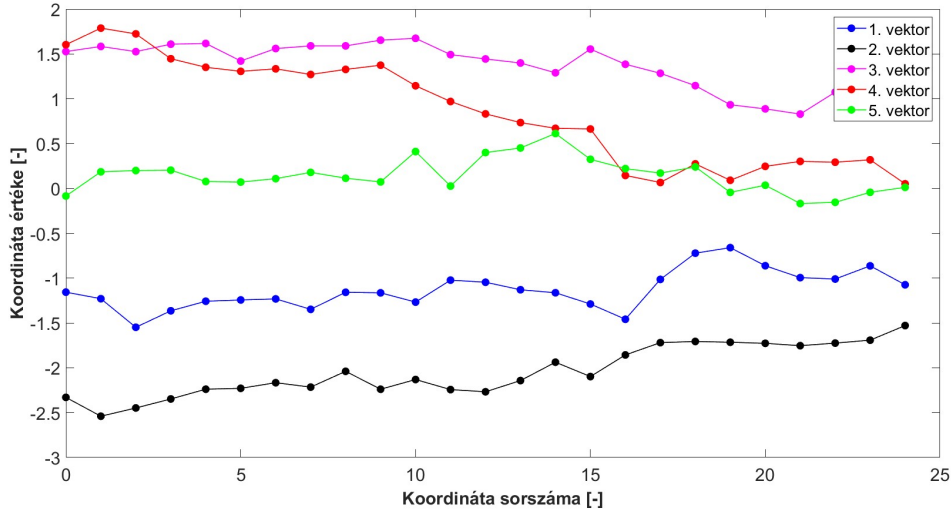
A vektorok koordinátáit egyenes szakaszokkal összekötve megfigyelhető, hogy az egymás után következő szakaszok meredeksége nagy mértékben eltérhet az előzőétől, csakúgy, mint az egymás után következő koordináták értéke.

Ha a kovariancia mátrix nem diagonális, azaz a magasabb dimenziójú eloszlás nem vezethető vissza közvetlenül egydimenziósakra, akkor a vektorok generálása az eloszlásból nem triviális. Pozitív definit kernelek esetén alkalmazható a Cholesky-felbontás, tehát az eddig bemutatott és leggyakrabban használt kernelek esetén a felbontás használható. Ekkor a Σ n -dimenziós kovariancia mátrixra $\Sigma = \mathbf{R}^T \mathbf{R}$, ahol $\mathbf{R}^T \in \mathbb{R}^{n \times n}$ és $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ rendre alsó és felső háromszögmátrix, ebből pedig adódik $\mathbf{S} = \mathbf{R}^T$ ún. skálázási mátrix. Ha az előállítani kívánt $\mathbf{Y} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$ eloszlást tetszőleges várható érték vektor és pozitív definit kovariancia mátrix jellemzi, akkor az megkapható egy $\mathbf{X} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I})$ eloszlásból, ahol az egyes valószínűségi változó komponensek egyváltozós standard normáloszlásúak:

$$\mathbf{Y} = \boldsymbol{\mu} + \mathbf{S}\mathbf{X}. \quad (2.13)$$

Ezzel a módszerrel magasabb rendű normáloszlások visszavezethetők egyváltozós standard normál eloszlásra³. A kernel függvény hatása az eredetileg diagonális kovariancia mátrixszal generált, 2.3. ábrán szereplő vektorokra a 2.4. ábrán látható. Jól látható, hogy a kernel csökkentette a szakaszok meredekségének nagymértékű változását, tehát a vektorok simasága ilyen értelemben nőtt. Az itt tapasztalt összefüggések adják az alapját a következő szakasznak.

³A standard normál eloszlás pedig visszavezethető 0 és 1 közötti egyenletes eloszlásra, ezt az eloszlást pedig pszeudo-véletlen számok generálásával a számítógépek mindig elő tudják állítani.



2.4. ábra. Vektorok 25-dimenziós normáeloszlásból, Laplace RBF ($\alpha = 1$, $\sigma = 70$) kernellel, standard egyváltozós normáeloszlásból Cholesky-felbontással generálva

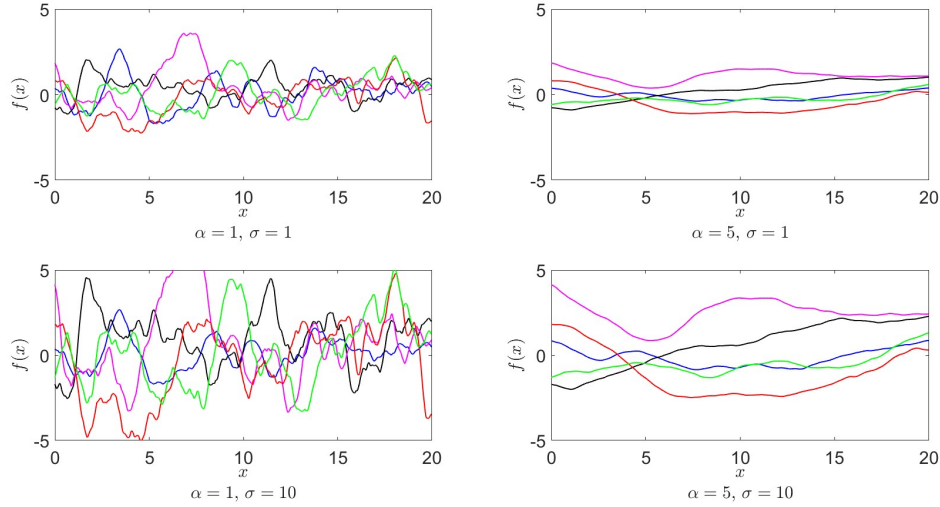
2.1.5. Gauss-folyamat

A Gauss-folyamat mögött egy nagyszerű ötlet áll, amely lényegében az n -dimenziós normáeloszlás általánosítása: ha a dimenziószám a végtelenhez tart, akkor az így generált végtelen dimenziós vektor valójában függvénynek tekinthető. Ekkor a várható érték vektor és a kovariancia mátrix végtelen sok elemet foglal magában, ezért ezeket rendre a várható érték függvénnyel és a kétváltozós kovariancia függvénnyel kell helyettesíteni (utóbbi a kernellel valósítható meg célszerűen). Az így generált $f : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$ függvények jelölése $f(x) \sim \mathcal{GP}(m(x), k(x, x^*))$, $m(x)$ várható érték függvénnyel és $k(x, x^*)$ kovariancia függvénnyel⁴ ($m(x)$ egy $m : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$ függvény). Az 2.5. ábrán láthatók Gauss-folyamatból származó függvények, különböző paraméterek esetén. Az a priori várható érték $m(x)$ és kernel $k(x, x^*)$ függvények ismeretében tehát generálhatók függvények. Ha $\mathbf{f}$ az a priori eloszlást jelenti már megfigyelt pontokban, $\mathbf{f}_k$ pedig a kiszámítandó eloszlást tetszőleges pontokban, akkor az eloszlás a (2.7) egyenlet alapján a következőképp írható fel:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{f}_k \end{bmatrix} \sim \mathcal{N} \left(\begin{bmatrix} \boldsymbol{\mu} \\ \boldsymbol{\mu}_k \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma} & \boldsymbol{\Sigma}_k \\ \boldsymbol{\Sigma}_k^T & \boldsymbol{\Sigma}_{kk} \end{bmatrix} \right). \quad (2.14)$$

Az összefüggésben szereplő $\boldsymbol{\mu}$, $\boldsymbol{\mu}_k$ vektorok $m(x)$ várható érték függvényből, $\boldsymbol{\Sigma}$, $\boldsymbol{\Sigma}_k$, $\boldsymbol{\Sigma}_k^T$, $\boldsymbol{\Sigma}_{kk}$ mátrixok $k(x, x^*)$ kernelből írhatók fel. Az $\mathbf{f}_k | \mathbf{f}$ feltételes eloszlás a (2.8) egyenlet

⁴Az előző szakaszban bemutatott diagonális kovariancia mátrixú normáeloszlás is általánosítható függvényekre. Ekkor a kernel Dirac-függvénnyel nullázza a más pontokkal vett kovarianciát. Az így generált függvény nem folytonos, sőt végtelen sok helyen van szakadása. Ez az ún. fehér zaj, amely a pontok függetlensége miatt a teljes spektrumon azonos spektrális sűrűséggel rendelkezik.



2.5. ábra. GP által generált függvények Matérn 3/2 kernellel, különböző α és σ paraméterekkel

alapján számítható:

$$\mathbf{f}_k | \mathbf{f} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_k + \boldsymbol{\Sigma}_k^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{f} - \boldsymbol{\mu}), \boldsymbol{\Sigma}_{kk} - \boldsymbol{\Sigma}_k^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_k). \quad (2.15)$$

Az így kapott összefüggéssel tehát tetszőleges pontban kiszámítható az eloszlás, amennyiben az néhány pontban ismert. Ez nagyon hasonló módszer a krigeléshez⁵.

A (2.15) egyenletben vektorok n -dimenziós normáleloszlása került kiszámításra ismeretlen helyeken, az a priori eloszlást felhasználva. Ez átalakítható úgy, hogy az eloszlást az új pontokban ismertnek tekintjük, tehát ez lesz a $\mathcal{D}$ tanítóminta. A (2.14) egyenlet átírva $\mathbf{f}_{\mathcal{D}}$ tanítómintához tartozó eloszlásra és $f(x)$ a priori eloszlásra tetszőleges x -re:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{f}_{\mathcal{D}} \\ f(x) \end{bmatrix} \sim \mathcal{N} \left(\begin{bmatrix} \boldsymbol{\mu}_{\mathcal{D}} \\ m(x) \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{\mathcal{D}\mathcal{D}} & \boldsymbol{\Sigma}_{\mathcal{D}} \\ \boldsymbol{\Sigma}_{\mathcal{D}}^T & k(x, x^*) \end{bmatrix} \right). \quad (2.16)$$

Ekkor a (2.15) egyenletnek megfelelő összefüggés a következőképpen alakul:

$$f(x) | \mathcal{D} \sim \mathcal{N}(m(x) + \boldsymbol{\Sigma}_{\mathcal{D}}^T \boldsymbol{\Sigma}_{\mathcal{D}\mathcal{D}}^{-1} (\mathbf{f}_{\mathcal{D}} - \boldsymbol{\mu}_{\mathcal{D}}), k(x, x^*) - \boldsymbol{\Sigma}_{\mathcal{D}}^T \boldsymbol{\Sigma}_{\mathcal{D}\mathcal{D}}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{\mathcal{D}}). \quad (2.17)$$

Ekkor az a posteriori Gauss-folyamat $\mathcal{D}$ tanítóminta ismeretében:

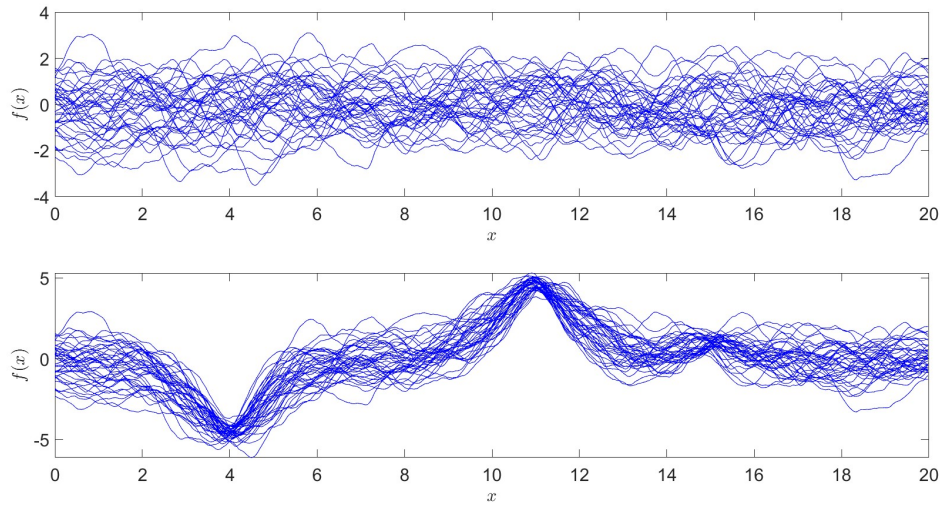
$$f(x) | \mathcal{D} \sim \mathcal{GP}(m_{\mathcal{D}}(x), k_{\mathcal{D}}(x, x^*)), \quad (2.18)$$

⁵A krigelés geostatistikában használt eljárás. Segítségével két mérési pont között megbecsülhető egy új pontban valamely változó értéke. Ha ez a felszín alatti réteg széntartalma, amely két mérési pontban ismert, akkor becsülhető a széntartalom egy új pontban, ahol fizikai korlátok miatt nem mérhető.

ahol a frissített átlag és kovariancia függvények egyértelműen adódnak (2.17) egyenletből:

$$\begin{aligned} m_{\mathcal{D}}(x) &= m(x) + \Sigma_{\mathcal{D}}^T(\mathcal{D}, x) \Sigma_{\mathcal{D}\mathcal{D}}^{-1}(\mathcal{D}) (\mathbf{f}_{\mathcal{D}} - \boldsymbol{\mu}_{\mathcal{D}}) \\ k_{\mathcal{D}}(x, x^*) &= k(x, x^*) - \Sigma_{\mathcal{D}}^T(\mathcal{D}, x) \Sigma_{\mathcal{D}\mathcal{D}}^{-1}(\mathcal{D}) \Sigma_{\mathcal{D}}(\mathcal{D}, x^*). \end{aligned} \quad (2.19)$$

A számítások során fontos, hogy a mátrixok függnek-e $\mathcal{D}$ tanítómintától és x változótól, ezért a függések is fel lettek tüntetve. A Gauss-folyamat alkalmazásakor a mérési zaj nagyon könnyen figyelembe vehető, feltéve, hogy az egyes mérések függetlenek egymástól (a klasszikus mechanikában szinte kizárólagosan előforduló eset⁶). Ekkor, az egyes mérésekre ugyanakkora, σ_m nagyságú szórást feltételezve, az eddig használt $\Sigma_{\mathcal{D}\mathcal{D}}$ kovariancia mátrix helyett $\Sigma_{\mathcal{D}\mathcal{D}} + \sigma_m^2 \mathbf{I}$ mátrixot kell alkalmazni, a többi lépés megegyezik az előzőekkel. A 2.6. ábrán láthatók tanítómintákkal frissített Gauss-folyamattal generált függvények. Fontos



2.6. ábra. Gauss-folyamat tanítása zajos mérésekkel ($\sigma_m = 1.1$). Felül az a priori ($m(x) = 0$, Matérn 3/2 kernel $\alpha = 1$, $\sigma = 1$ paraméterekkel), alul az a posteriori folyamatból generált 40 függvény, $\mathcal{D} = \{(4, -5), (11, 5), (15, 1)\}$

megjegyezni, hogy a méréseket függetlennek és zajmentesnek (0 szórásúnak) tekintve nem működik az előbb ismertetett módszer, ekkor ugyanis $\Sigma_{\mathcal{D}\mathcal{D}}$ nullmátrix lenne, ami nem invertálható. Túl alacsony szórás esetén pedig numerikus problémák adódhatnak, ezért ezeket a jelenségeket az implementáció során figyelembe kell venni.

2.1.6. Sztochasztikus differenciálegyenletek, Gauss-folyamat átírása

Ebben a szakaszban a jelölések a szakirodalomnak megfelelőek (Särkkä & Solin, 2019). Itt részletekbe menően is lehet olvasni a sztochasztikus módszerekről, bár a szerzők saját

⁶Ez természetesen klasszikus mechanikai problémák esetén is függ a mérés módjától, kvantummechanikában pedig nagyon gyakran nem teljesül. A kérdés mindig az, hogy a mérés hatása a mért folyamatra elhanyagolható-e.

bevallása szerint is ez még csak nagyon kis szelete a területnek és inkább intuitív, mint matematikailag szigorú.

A sztochasztikus differenciálegyenletek (SDE) legnagyobb különbsége a hagyományos (determinisztikus) DE-khez képest, hogy tartalmaznak valamilyen sztochasztikus folyamatot, ezáltal a megoldás mindig más és más trajektóriát ad. Egy determinisztikus n -ed rendű explicit DE (általában) felírható a következő alakban:

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t), t) + \mathbf{L}(\mathbf{x}(t), t)\mathbf{w}(t). \quad (2.20)$$

Itt $\mathbf{x}(t) : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}^n$ az állapotváltozók időfüggő vektora, $\mathbf{f}(\mathbf{x}(t), t) : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}^n$ és $\mathbf{L}(\mathbf{x}(t), t) : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}^{n \times k}$ tetszőleges függvények, $\mathbf{w}(t) : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}^k$ pedig a gerjesztés időfüggő vektora. Látható, hogy a (2.20) egyenlet jobb oldalán az összeg két tagja összevonható lenne a determinisztikus esetben. Sztochasztikus esetben viszont nem, itt ugyanis a $\mathbf{w}(t)$ gerjesztés helyére valamilyen sztochasztikus folyamat kerül. A differenciálegyenletek analitikus megoldása legegyszerűbb esetben integrálásra való visszavezetéssel történik⁷. Megmutatható (Särkkä & Solin, 2019), hogy egy sztochasztikus folyamat megoldásához egészen új módszerek szükségesek, a korábban használt integrál fogalmak (Riemann-, Riemann-Stieltjes-, a mértékelméleti származtatása miatt általánosan használható Lebesgue-integrál) nem elégségesek a leíráshoz. A matematikailag látszólag nehezen kezelhető SDE-k az Itô-integrállal oldhatók meg, a területtel pedig részletesen az Itô-kalkulus foglalkozik. A szabatos matematikai levezetés nagyon hosszú lenne, intuíció szintjén viszont elmondható, hogy a β Brown-mozgás szerint kell integrálást végezni, ami, lévén egy sztochasztikus folyamat, különbözik a hagyományos helyettesítéses integrál megoldásától. A Brown-mozgás itt tényleg a fizikából is ismert mozgást jelenti. A növekményei az egyes tagok között a folyamat során 0 átlagú normáeloszlásból származnak, ami tényleg jól modellezi a részecskék véletlenszerűnek tűnő mozgását.

A dolgozat számára legfontosabb eredmény az SDE-k elméletéből, hogy bizonyos esetekben a Gauss folyamat átírható sztochasztikus differenciálegyenletté. Ha a kernel spektruma racionális törtfüggvény, akkor az átírás mindenképp elvégezhető. Ennek belátása nem triviális⁸ (Särkkä & Solin, 2019). A cél tehát egy $f \sim \mathcal{GP}(0, k(t, t^*))$ folyamat átírása egy n -ed rendű SDE-vé. Az SDE-k a következő egyenletből indulnak ki:

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F}\mathbf{x}dt + \mathbf{L}d\beta. \quad (2.21)$$

⁷Még determinisztikus esetben is csak ritkán lehet zárt alakú megoldást találni, ezért szükségesek a numerikus módszerek. SDE-k esetén is vannak ilyen módszerek, pl. Euler-Maruyama módszer.

⁸Bár ez is bonyolultnak tűnhet, itt kimondatlanul is a legegyszerűbb eset áll fenn, csak időadatokat használ ugyanis a kernel. Az általános eset tér- és időbeli adatoktól egyaránt függő (ún. spatio-temporal) kernelek alkalmazása, ezek parciális sztochasztikus differenciálegyenletekre vezetnének.

Ez egy jobban kezelhető alakra hozható a dt operátorral való formális osztás után:

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{F}\mathbf{x} + \mathbf{L}w. \quad (2.22)$$

Itt w az ún. fehér zaj folyamat (a teljes spektrumon mindenhol megegyezik a spektrális sűrűség). Az $f \sim \mathcal{GP}(0, k(t, t^*))$ folyamat által generált egyváltozós f függvényből képezve az állapotvektort $\mathbf{f} = [f \dot{f} \dots f^{(n-1)}]^T$ és deriváltját $\dot{\mathbf{f}} = [\dot{f} \ddot{f} \dots f^{(n)}]^T$, illetve egy egydimenziós w fehér zaj folyamatot $S(\omega) \equiv q$ spektrális sűrűségfüggvénnyel (q konstans) választva a (2.22) egyenlet alapján a következő összefüggés írható fel:

$$\dot{\mathbf{f}} = \mathbf{F}\mathbf{f} + \mathbf{L}w. \quad (2.23)$$

Az $\mathbf{f}$ állapotvektorból egyértelműen megkapható maga f , célszerű viszont ezt is mátrixos formalitással felírni az esetlegesen hipermátrixos alakban figyelembe vett csatolás kifejezésének megkönnyítése érdekében. Ekkor $\mathbf{H} = [1 \ 0 \dots 0]$ jelöléssel $f = \mathbf{H}\mathbf{f}$. Az $\mathbf{F}$ és $\mathbf{L}$ mátrixok, illetve q spektrális sűrűségfüggvény a következőképpen alakulnak a használt kernelek esetén:

Laplace RBF α, σ paraméterekkel:

$$\mathbf{F} = \left[-\frac{1}{\sigma} \right], \mathbf{L} = [1], q = \frac{2\alpha}{\sigma}. \quad (2.24)$$

Matérn 3/2 α, σ paraméterekkel:

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -\frac{3}{\sigma^2} & -\frac{2\sqrt{3}}{\sigma} \end{bmatrix}, \mathbf{L} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, q = 4\alpha \left(\frac{\sqrt{3}}{\sigma} \right)^3. \quad (2.25)$$

A szakirodalomban sok eltérő jelölés használatos, az olvasó ilyen szellemiségben kell, hogy értelmezze a paramétereket. Az előbb bemutatott átírásokra a következő alfejezetben lesz szükség.

2.1.7. A posteriori eloszlás, Markov Chain Monte Carlo

A (2.4) egyenletben bemutatásra került a bayesi-következtetés gépi tanulásban használatos alakja. Az összefüggés az a posteriori eloszlást nem fejezi ki direkt módon, csak az arányosságot adja meg. A nevezőből tehát hiányzik a normalizációs konstans, az $f(\mathcal{D})$ marginális eloszlás, aminek a kiszámítása elviekben a következő módon lehetséges:

$$\int_{\Theta} f(\mathcal{D}|\boldsymbol{\theta}^*) f(\boldsymbol{\theta}^*) d\boldsymbol{\theta}^*. \quad (2.26)$$

Az összefüggés kiszámítása az esetek döntő többségben nagyon nehéz, ezért bevett gyakorlat olyan algoritmusok használata (pl. rejection sampling), amelyek a prior és likelihood ismeretében becsülni tudják az a posteriori eloszlást. A Markov Chain Monte Carlo (MCMC) algoritmus erre a célra kiválóan használható.

Az MCMC két másik módszert egyesít, a Monte-Carlo-módszert és a Markov-láncokat. Az előbbi alatt lényegében az összes olyan számítógépes szimulációt értjük, amely nagy mennyiségű véletlen mintavételezéssel a valódi megoldáshoz konvergáló megoldássorozatot ad. Ez frekventista, a gyakoriság megfigyelésén alapuló módszer. A másik rész, a Markov-lánc, bonyolultabb, ezért bemutatást igényel.

A Markov-lánc olyan sztochasztikus folyamat (legegyszerűbb esetben diszkrét idejű és véges állapotú), amely Markov-tulajdonságú. Diszkrét idejű és véges állapotú esetben az $X_1, X_2 \dots$ valószínűségi változók sorozatának tagjai az $\mathcal{S} = \{A_1, \dots, A_n\}$ állapothalmaz elemeinek értékét vehetik fel. Az állapotok közötti átmenet valószínűsége a sorozat két egymást követő tagja között a p_{ij} egy-lépéses átmenet-valószínűséggel definiált:

$$p_{ij} = \mathbb{P}(X_{k+1} = A_j | X_k = A_i). \quad (2.27)$$

A p_{ij} egy-lépéses átmenet-valószínűségeket indexük szerint mátrixba rendezve kapható meg a $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ átmenetmátrix definíciója, tehát $\mathbf{P}(i, j) = p_{ij}$. A Markov-tulajdonság a következőt jelenti:

$$\mathbb{P}(X_{k+1} = x_{k+1} | X_k = x_k) = \mathbb{P}(X_{k+1} = x_{k+1} | X_k = x_k, X_{k-1} = x_{k-1}, \dots, X_0 = x_0). \quad (2.28)$$

ahol $x_i \in \mathcal{S}$, $\forall i$. Tehát a sorozat következő tagja kizárólag az előző tag függvénye. Ha az átmenetmátrix stacionárius, akkor, bizonyos feltételek teljesülése mellett, stacionárius eloszlás értelmezhető az állapotokon, azaz $\exists! \boldsymbol{\pi} \in \mathbb{R}^n$ diszkrét eloszlás az állapotokon értelmezve, amihez a lánc korábbi állapotaitól függetlenül tart az n lépéssel későbbi, egyes állapotokban való tartózkodás sűrűségfüggvénye. Ekkor $\boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{\pi} \mathbf{P}$, tehát a stacionárius eloszlás vektora az átmenetmátrix bal oldali normalizált sajátvektoraként kapható meg. Ekkor tetszőleges $A_j \in \mathcal{S}$ állapothoz tartozó stacionárius érték:

$$\pi_j = \sum_{i \in \mathcal{S}} \pi_i \mathbf{P}(i, j). \quad (2.29)$$

A Markov-lánc általánosítása megtörténhet az idő, illetve az állapottér kiterjesztésével is, a dolgozatban használt MCMC technikához ez utóbbi szükséges, méghozzá folytonos esetre. Ekkor az $\mathcal{S}$ állapothalmaz nem véges elemszámú, tehát $\mathcal{S} \neq \{A_1, \dots, A_n\}$, hanem egy folytonos tartomány, a dolgozatban célszerűen $\mathcal{S} = \mathbb{R}$. A véges számú állapot esetére definiált átmenetmátrix a folytonos esetben $p(x, y)$ átmenetfüggvénnyé alakul (hasonlóan, mint a kovariancia mátrix és kovariancia függvény esetén). A (2.27) és (2.28) egyenletek

a következő módon alakulnak a folytonos esetre:

$$p(x, y) = f(X_{k+1} = y | X_k = x)$$

$$f(X_{k+1} = x_{k+1} | X_k = x_k) = f(X_{k+1} = x_{k+1} | X_k = x_k, X_{k-1} = x_{k-1}, \dots, X_0 = x_0). \quad (2.30)$$

Itt is teljesül, hogy $x_i \in \mathcal{S} = \mathbb{R}, \forall i$. A véges állapotú esethez hasonlóan itt is definiálható a stacionárius eloszlás. Ekkor a (2.29) egyenlet a következő alakban írható fel tetszőleges $y \in \mathcal{S}$ esetére:

$$\pi(y) = \int_{\mathcal{S}} \pi(x) p(x, y) dx. \quad (2.31)$$

Tehát a stacionárius eloszlás folytonos sűrűségfüggvényét $\pi(y)$ adja meg.

A minták az átmenetfüggvénnyel generálhatók, a Markov-lánc inicializálása után (az első tagnak való értékadás után). Egy minta csak jelölt, nem lesz automatikusan eleme a láncnak, erre elfogadási szabályt kell definiálni. A mintavételek folytonos állapotthalmazú Markov-láncot alkotnak, ami stacionárius eloszlással rendelkezik. A stacionárius eloszlás itt éppen a keresett eloszlást jelenti, hiszen az abból generált minták visszaadják magát az eloszlást. Az előbb leírtaknak megfelelően a Markov-lánc a korábbi állapotoktól függetlenül tart a stacionárius eloszláshoz. A stacionárius eloszláshoz tartozó minták a Markov-láncból megkaphatók, ha az első néhány elemét, amely még nem a stacionárius eloszlást követte, eldobjuk (ez az ún. "burn-in" fázis). Az átmenetfüggvény (általában egy kernel függvényt használnak) felírása és a mintavételezés pontos módja (elfogadás-eldobás szabálya) határozza meg, hogy milyen mintákat kapunk a véletlen bejárás során, illetve milyen gyors a konvergencia a stacionárius eloszlás felé. A legtöbb MCMC módszer az utóbbiakban tér el valamilyen módon egymástól. A következő szakaszban bemutatásra kerül a dolgozatban használt megoldás.

2.1.8. Metropolis-Hastings és Metropolis MCMC

Az egyik legnépszerűbb MCMC módszer a Metropolis-Hastings MCMC. Ekkor az algoritmus a következő: első lépésben tetszőleges értékkel inicializáljuk a láncot, például $x_0 \sim \mathcal{N}(0, 1)$. Minden x_0 -t követő x_k -ra a következő számítást kell elvégezni:

$$A = \min \left(1, \frac{\pi(y)p(y, x_k)}{\pi(x_k)p(x_k, y)} \right). \quad (2.32)$$

Itt π a stacionárius eloszlás, x_k az előző tag, y a $k + 1$ -edik tagra egy jelölt, p pedig az átmenetfüggvény. Ekkor A valószínűséggel elfogadjuk a jelöltet az új tagnak, azaz $x_{k+1} = y$, ellenkező esetben az előző tagot választjuk, ekkor $x_{k+1} = x_k$. A számítás sokat egyszerűsödik, ha p függvény változóiban szimmetrikus. A (2.10), (2.11) és (2.12) egyenletekben bemutatott kernelek $\alpha = 1$ paraméterrel tökéletesen alkalmasak egy ilyen

átmenetfüggvénynek. Ekkor:

$$A = \min \left(1, \frac{\pi(y)}{\pi(x_k)} \right). \quad (2.33)$$

Ehhez hasonló formában lett kidolgozva az eredeti⁹ Metropolis MCMC is (Metropolis et al., 1953). Mivel a π stacionárius eloszlás ismeretlen, sőt éppen ezt próbáljuk előállítani az algoritmussal, nem használható a képlet ebben az alakban. Viszont rendelkezésre áll a (2.4) egyenletben felírt összefüggés, a keresett eloszlás (posterior) arányos a likelihood és prior szorzatával. Ekkor tehát az elfogadási valószínűség, Metropolis-algoritmus mellett:

$$A = \min \left(1, \frac{f(y|\boldsymbol{\theta})f(\boldsymbol{\theta})}{f(x_k|\boldsymbol{\theta})f(\boldsymbol{\theta})} \right) = \min \left(1, \frac{f(y|\boldsymbol{\theta})}{f(x_k|\boldsymbol{\theta})} \right). \quad (2.34)$$

Látható, hogy csak a likelihood számít, mivel a prior a számlálóban és a nevezőben is megegyezik.

2.1.9. Kálmán-szűrő

A Kálmán-szűrő Kálmán Rudolf Emil magyar-amerikai villamosmérnökről elnevezett eljárás. A módszer lényege, hogy egy valamilyen összefüggéssel iterált, de mérésekkel korrigált idősor esetén az a priori és a mérési adatokhoz tartozó szórások arányában súlyozza a becslést és a mérést a következő időponthoz tartozó állapot eloszlására vonatkozóan. Az eloszlásokat rendszerint normáeloszlással közelítik, az egyes állapotokról való ismeret a $\boldsymbol{\mu}_k \in \mathbb{R}^n$ várható érték vektor és $\boldsymbol{\Sigma}_k \in \mathbb{R}^{n \times n}$ kovariancia mátrix írja le a k -edik időlépésben. Legegyszerűbb esetben a kiindulási egyenletek a következő, diszkrét idejű állapotter modell (ÁTM) alakban megadott egyenletek:

$$\begin{aligned} \mathbf{z}[k] &= \mathbf{A}_d \mathbf{z}[k-1] + \mathbf{B}_d \mathbf{u}[k] + \mathbf{w}[k], \quad \mathbf{w}[k] \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{Q}_d) \\ \mathbf{y}[k] &= \mathbf{C}_d \mathbf{z}[k] + \mathbf{D}_d \mathbf{u}[k] + \mathbf{v}[k], \quad \mathbf{v}[k] \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{R}_d). \end{aligned} \quad (2.35)$$

Itt $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^u$, $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^y$, $\mathbf{A}_d \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\mathbf{B}_d \in \mathbb{R}^{n \times u}$, $\mathbf{C}_d \in \mathbb{R}^{y \times n}$, $\mathbf{D}_d \in \mathbb{R}^{y \times u}$, a $\mathbf{w}$ és $\mathbf{v}$ diszkrét idejű fehér zaj folyamatok rendre $\mathbf{Q}_d \in \mathbb{R}^{n \times n}$ és $\mathbf{R}_d \in \mathbb{R}^{y \times y}$ diffúziós mátrixokkal. Az előbbi alak olyan szempontból is egyszerűsített, hogy az $\mathbf{A}_d$, $\mathbf{B}_d$, $\mathbf{C}_d$, $\mathbf{D}_d$, $\mathbf{Q}_d$ és $\mathbf{R}_d$, mátrixok időfüggetlenek, a modell stacionárius.

A Kálmán-szűrő inicializálása (azaz a $\boldsymbol{\mu}_0$ vektornak és a $\boldsymbol{\Sigma}_0$ mátrixnak való értékadás) után rendre két lépést iterál: a becslést (prediction step) és a mérést (measurement step). A becslés tisztán az állapotegyenlettel közelíti a következő, k -edik időlépésbeli várható

⁹Ezen egyszerűnek tűnő algoritmus kidolgozásán nem kisebb személyek dolgoztak Metropolis mellett, mint Teller Ede és felesége, Harkányi Mária Augusztia.

értéket és kovarianciát:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\mu}_{k|k-1} &= \mathbf{A}_d \boldsymbol{\mu}_{k-1} + \mathbf{B}_d \mathbf{u}[k] \\ \boldsymbol{\Sigma}_{k|k-1} &= \mathbf{A}_d \boldsymbol{\Sigma}_{k-1} \mathbf{A}_d^T + \mathbf{Q}_d.\end{aligned}\tag{2.36}$$

A $\boldsymbol{\mu}_{k|k-1}$ és $\boldsymbol{\Sigma}_{k|k-1}$ jelentik a $k-1$ -edik időlépés után, de k -edik időlépésbeli mérés előtt a legjobb becslést a k -edik időlépésbeli $\boldsymbol{\mu}_k$ várható érték vektorra és $\boldsymbol{\Sigma}_k$ kovariancia mátrixra. A mérés a becsléssel kapott értékeket frissíti a k -edik mérés alapján:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\mu}_k &= \boldsymbol{\mu}_{k|k-1} + \mathbf{K}_k \mathbf{r}_k \\ \boldsymbol{\Sigma}_k &= (\mathbf{I} - \mathbf{K}_k \mathbf{C}_d) \boldsymbol{\Sigma}_{k|k-1}.\end{aligned}\tag{2.37}$$

Az $\mathbf{r}_k$ vektor a becslt és a mért kimenet különbsége, a $\mathbf{K}_k$ mátrix pedig az ún. Kálmán-erősítés mátrixa:

$$\begin{aligned}\mathbf{r}_k &= \mathbf{y}[k] - \hat{\mathbf{y}}_k, \hat{\mathbf{y}}_k = \mathbf{C}_d \boldsymbol{\mu}_{k|k-1} + \mathbf{D}_d \mathbf{u}[k] \\ \mathbf{K}_k &= \boldsymbol{\Sigma}_{k|k-1} \mathbf{C}_d^T \mathbf{S}_k^{-1}, \mathbf{S}_k = \mathbf{C}_d \boldsymbol{\Sigma}_{k|k-1} \mathbf{C}_d^T + \mathbf{R}_d.\end{aligned}\tag{2.38}$$

Az algoritmus során tehát mindig az állapotvektor k -edik időlépésbeli közelítése történik $\boldsymbol{\mu}_k$ vektorral és $\boldsymbol{\Sigma}_k$ mátrixszal. A részletekbe menő levezetés (Murphy, 2012) nem bonyolult, lényegében a megfelelő mátrixműveleteket kell helyes sorrendben végrehajtani. A Kálmán-szűrő célja a számítási komplexitás és ezáltal a számítási idő csökkentése. A k -edik időlépésbeli közelítéshez nem feltétlen szükséges Kálmán-szűrő, kiszámítható kizárólag bayesiánus következtetések sorozatával. Ekkor azonban bármely időlépésben szükség van összes korábbi időlépéshez tartozó mérésekre is; nem nehéz belátni, hogy ez könnyedén válhat rendkívül számításgényes folyamattá. A Kálmán-szűrőnek nincs szüksége az összes állapotra, kizárólag az előzőre¹⁰, amiben kódolva van az összes azt megelőzőnek a hatása.

2.2. Nemlineáris dinamikai rendszerek

2.2.1. Duffing-oszcillátor

A legegyszerűbb nemlineáris dinamikai rendszer a Duffing-oszcillátor, más néven köbös oszcillátor. A másodrendű differenciálegyenlet a lineáris tagokon kívül egy pozíciótól függő köbös nemlinearitást tartalmaz. A differenciálegyenlet a következő:

$$m\ddot{x} + c\dot{x} + kx + dx^3 = U(t),\tag{2.39}$$

¹⁰Az első úrhajók idejében még nagyon kezdetleges számítógépek álltak csak rendelkezésre, ezért számított forradalmi ötletnek ez a Markov-tulajdonságra hasonlító iteráció.

ahol m a tömeg, c a csillapítási tényező, k a rugómerevség, d pedig a nemlinearitás együtthatója.

2.2.2. Van der Pol-oszcillátor

A Van der Pol oszcillátor szintén másodrendű differenciálegyenlettel leírható dinamikai rendszer, de a Duffing-oszcillátornál összetettebb, ugyanis ebben az esetben a nemlinearitás különböző rendű tagok szorzataként áll elő. A rendszert leíró differenciálegyenlet a következő:

$$\ddot{x} - \mu(1 - x^2)\dot{x} + x = U(t). \quad (2.40)$$

A μ paraméter a nemlinearitás együtthatója.

2.3. Latent Force Model

2.3.1. Az LFM eredeti megközelítése

Az LFM (Latent Force Model) ötlete újkeletű (Alvarez et al., 2009) és hibrid modellezési szemléletmódot alkalmaz. Hagyományosan kettőről lehet beszélni, a tisztán adatvezéreltről, illetve a tisztán gépészeti megközelítésről. Az előbbi lényegében black-boxként tekint a rendszerre és egyáltalán nem modellezi azt. Ez rugalmas rendszert biztosít, azonban a kevés megkötés miatt sok adat kell az identifikációhoz, ami, ha nem áll rendelkezésre, pontatlan modellhez vezet. A másik nagy hátulütő extrapoláció esetén jelentkezik, itt ugyanis olyan tartományon kellene becsülni a kimenetet, ahol nincs rendelkezésre álló adat, márpedig ez a megközelítés csak erre támaszkodik. A tisztán gépészeti megközelítés ezzel szemben figyelembe veszi a fizikai kényszereket, méghozzá olyannyira, hogy attól a modell nem képes elszakadni. Erre jó példa egy parametrikus optimalizációs technikával tanított, lineárisan modellezett oszcillátor: ha az oszcillátorban valójában nemlineáris tagok is vannak, a modell és az algoritmus képtelen lesz azt figyelembe venni és rossz minőségű lineáris modellt eredményez. A két modellezés egyesítése kiküszöböli a másik hiányosságait. Az LFM mögötti motiváció a rejtett (latent) változók és függvények vizsgálata a rendszerben. A téma mestereinek kedvenc példája a marionett báb: a bábjátékos kevés fajta mozdulattal tudja irányítani a bábót, de a néző a drótokat nem, csak a báb mozgását látja. Ez viszont nagyon összetett lehet, hogyan lehet mégis a bábjátékos mozdulatait vizsgálni, ha csak a bábút látjuk? Az LFM erre a kérdésre ad választ.

A bábjáték analógiájára a következő összefüggés írható fel a változókra:

$$\mathbf{X} = \mathbf{F}\mathbf{W} + \mathbf{E}. \quad (2.41)$$

Az $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times q}$ a megfigyelt n db q -dimenziós változó mátrixa, $\mathbf{F} \in \mathbb{R}^{n \times r}$ az n db redukált, r -dimenziós rejtett változó mátrixa, $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{r \times q}$ a súlymátrix, $\mathbf{E} \in \mathbb{R}^{n \times q}$ pedig Gauss-zaj ($\mathbf{0}$ várható értékű q -dimenziós eloszlás által generált n db vektor). A 2.18 egyenlet dinamikai egyenletté alakítható a megfigyelt változók első és második deriváltjának felhasználásával:

$$\mathbf{F}\mathbf{W} = \ddot{\mathbf{X}}\mathbf{M} + \dot{\mathbf{X}}\mathbf{C} + \mathbf{X}\mathbf{D} + \mathbf{E}. \quad (2.42)$$

Ekkor $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{q \times q}$ a tömeg, $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{q \times q}$ a csillapítás, $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{q \times q}$ pedig a rugómerevségek diagonális mátrixa. Az eddig olvasottak alapján látható, hogy ebben az esetben is elvégezhető a Gauss-folyamatra való általánosítás. Az ebben szakaszban leírt, eredeti megközelítés lényegében a Gauss-folyamat frissítésére épül. Egy egyszerű példa a következő:

$$m\ddot{z} + c\dot{z} + kz = U(t), \quad U(t) \sim \mathcal{GP}(0, (k, k^*)). \quad (2.43)$$

Ez egy 1 DoF lineáris oszcillátor egyenlete, ami egy ismeretlen Gauss-folyamattal van gerjesztve. A cél ennek a (rejtett) gerjesztésnek a meghatározása a megfigyelhető változók ismeretében. Itt tehát Gauss-folyamatok közötti frissítés szükséges, ami $\mathcal{O}(n^3)$ számítási komplexitású és $\mathcal{O}(n^2)$ tárhely igényű. Ezek csökkentésére számos jól használható algoritmus létezik (ezek a simítás és a szűrés területéhez tartoznak), népszerű az ún. RTS, azaz Rauch-Tung-Striebel simító (Särkkä, 2008), de ilyen például az előző fejezetben bemutatott klasszikus Kálmán-szűrő is. Kutatók megvizsgálták ezek hatását különböző kernelekkel kombinálva (Hartikainen & Särkkä, 2010).

Az eredeti mű szerzői rámutattak néhány alkalmazási területre, ahol nagyon jól használható az LFM megközelítés. Ilyen volt például egy orvostechikai alkalmazás, ahol különböző sejteket és DNS szekvenciákat elemezve próbálták megtalálni a rejtett változókat és függvényeket, melyek támpontot adhatnak a kutató orvosoknak a kutatás irányát illetően. Az eredmények ígéretesek voltak, de a mechanikai alkalmazások vizsgálata elmaradt. Ebben az alkalmazásban nem is látszik igazán, hogy pontosan milyen módon lenne alkalmazható ez az elmélet, hiszen a mérnöki gyakorlatban elég ritkán fordul elő, hogy a rendszer teljes mértékben ismert. Ha utóbbi igaz, akkor lényegében egy mérőműszerről lehet beszélni, ekkor viszont nem tűnik célravezetőnek a gerjesztés Gauss-folyamattal való modellezése. Egy jó ötlettel, kis módosítással azonban nyilvánvalóvá válik az ebben rejlő potenciál.

2.3.2. LFM nemlineáris dinamikai rendszer identifikációjához

Az LFM felhasználása nemlineáris dinamikai rendszerek identifikálásához egy új kutatási területet jelent, az egyetlen, a témával foglalkozó szacikk 2022-es (Rogers & Friis, 2022). A szerzők az előző szakaszban bemutatott módszerből indultak ki. Egy ponton azonban drasztikus módosítást hajtottak végre: mivel a dinamikai rendszerek identifikációjánál ismert a gerjesztés (hiszen ezzel kapható meg a rendszer válasza és lehet következtetni a

frekvencia tartománybeli viselkedésre), ez determinisztikus ebben az esetben. Ekkor viszont a *sztochasztikus folyamat beépíthető a rendszer modelljébe*. Ez nagyon jó modellezést tesz lehetővé és sok előnnyel jár más típusú megoldásokhoz képest. A következőkben a módszer részletes bemutatása következik. Az ötlet a szerzőké, azonban a kifejtés és az alkalmazott algoritmus teljes mértékben saját készítésű.

Egy egyszabadságfokú rezgőrendszer adja a kiindulási alapot:

$$m\ddot{z} + c\dot{z} + kz + \hat{f}(\dot{z}, z) = U(t). \quad (2.44)$$

Itt $\hat{f}(\dot{z}, z)$ olyan $\dot{z}$ -től és z -től függő nemlineáris tag, amely nem tartalmaz lineáris tagokat, tehát ezek kizárólag c és k paraméterekben jelennek meg. A többi tag jelölése a mechanikában szokásos konvenciót követi. Az első fontos lépés az $\hat{f}(\dot{z}, z)$ nemlinearitás Gauss-folyamattal való közelítése, tehát $\hat{f}(z, \dot{z}) \sim \mathcal{GP}(0, k(t, t^*))$. A (2.44) egyenlet felírható ÁTM alakban, $\mathbf{x} = [z \ \dot{z}]^T$ jelöléssel:

$$\dot{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -\frac{k}{m} & -\frac{c}{m} \end{bmatrix} \mathbf{x} + \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{1}{m} \end{bmatrix} \left(U(t) - \hat{f}(z, \dot{z}) \right), \quad \hat{f}(z, \dot{z}) \sim \mathcal{GP}(0, k(t, t^*)). \quad (2.45)$$

Ez az egyenlet kiegészíthető a szokásos, rendszertechnikában használatos kimeneti egyenlettel:

$$\mathbf{y} = \mathbf{C}\mathbf{x} + \mathbf{D} \left(U(t) - \hat{f}(z, \dot{z}) \right). \quad (2.46)$$

Az $\hat{f}(z, \dot{z})$ ugyan nem gerjesztés, mégis azzal együtt kell kezelni, hiszen a z , $\dot{z}$ függések és a sztochasztikus folyamat volta miatt nincs egzakt alakja. Tehát $\hat{f}(z, \dot{z})$ nem bontható szét további meghatározott számú parametrizált egységre, ezért egyben kezelendő és erő dimenziójú. A gerjesztéssel ellentétes előjelű, ezért latent restoring force az elnevezése, azaz rejtett visszatérítő erő.

A $\mathbf{C}$ és $\mathbf{D}$ mátrixok kiválasztása nagyon fontos, mert itt dől el, hogy milyen fizikai mennyiség mérése szükséges. Sebesség és pozíció mérése esetén $\mathbf{x} = [z \ \dot{z}]^T$ állapotvektor bővítése szükséges, hiszen lényegében a (2.44) kiinduló egyenletet kell átrendezni és akkor a gyorsulás is az állapotvektorban kell, hogy szerepeljen. A gyorsulás mérése esetén erre nincs szükség, ez ugyanis az állapotvektorral közvetlenül kifejezhető. Ekkor a $\mathbf{C}$ és $\mathbf{D}$ mátrixok:

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} -\frac{k}{m} & -\frac{c}{m} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{D} = \begin{bmatrix} \frac{1}{m} \end{bmatrix}. \quad (2.47)$$

A dolgozatban a gyorsulás mérésére van visszavezetve a kimeneti egyenlet, mivel ez a sebesség vagy pozíció mérésénél mérés technikai szempontok miatt is kedvezőbb, továbbá a későbbiekben a nemlinearitás meghatározásához ebben az esetben csak a tömeg ismerete lesz szükséges, míg a másik két esetben a csillapítás vagy a rugómerevség, melyeket

szintén nehezebb mérni, mint a tömeget.

A (2.45) egyenletben $\hat{f}(z, \dot{z}) \sim \mathcal{GP}(0, k(t, t^*))$ átírható SDE ÁTM alakba a kernel ismeretében. Matérn 3/2 esetén α, σ paraméterekkel a következő módon alakul (2.25) alapján:

$$\dot{\mathbf{f}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -\frac{3}{\sigma^2} & -\frac{2\sqrt{3}}{\sigma} \end{bmatrix} \mathbf{f} + \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} w. \quad (2.48)$$

A w fehér zaj folyamat $q_w = 4\alpha \left(\frac{\sqrt{3}}{\sigma}\right)^3$ konstans spektrális sűrűséggel, az állapotvektor pedig $\dot{\mathbf{f}} = [\hat{f}(z, \dot{z}), \dot{\hat{f}}(z, \dot{z})]$. Az összecsatolt hipermátrixos alak bevezetéséhez szükséges jelölések:

$$\mathbf{A}_{c,s} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -\frac{k}{m} & -\frac{c}{m} \end{bmatrix}, \mathbf{B}_{c,s} = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{1}{m} \end{bmatrix}, \mathbf{A}_{c,f} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -\frac{3}{\sigma^2} & -\frac{2\sqrt{3}}{\sigma} \end{bmatrix}, \mathbf{B}_{c,f} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ -\frac{1}{m} & 0 \end{bmatrix}, \mathbf{L} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (2.49)$$

A kimeneti egyenlet felírható a kibővített $[\mathbf{x} \ \mathbf{f}]^T$ állapotvektorral:

$$\mathbf{y} = \mathbf{C}_m \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{f} \end{bmatrix} + \mathbf{D}_m U(t). \quad (2.50)$$

Ekkor a módosított mátrixok a következőképp alakulnak:

$$\mathbf{C}_m = \begin{bmatrix} -\frac{k}{m} & -\frac{c}{m} & -\frac{1}{m} & 0 \end{bmatrix}, \mathbf{D}_m = \begin{bmatrix} \frac{1}{m} \end{bmatrix}. \quad (2.51)$$

A hipermátrixos felírásban $\mathbf{L}w$ kifejezés $[\mathbf{0} \ \mathbf{L}]^T w$ kifejezéssé bővülne. Ehelyett bevezethető $\mathbf{w} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{Q})$, a kimeneti egyenlethez pedig, mint mérési zaj, hozzáadható $\mathbf{v} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{R})$. A $\mathbf{Q}$ és $\mathbf{R}$ diffúziós mátrixok ekkor:

$$\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0}^T & q_w \end{bmatrix}, \mathbf{R} = [q_v]. \quad (2.52)$$

A hipermátrixos állapotegyenlet a kimeneti egyenlettel kiegészítve, a bevezetett jelölésekkel a következő:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \dot{\mathbf{x}} \\ \dot{\mathbf{f}} \end{bmatrix} &= \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{A}_{c,s} & \mathbf{B}_{c,f} \\ \mathbf{0} & \mathbf{A}_{c,f} \end{bmatrix}}_{\mathbf{A}_m} \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{f} \end{bmatrix} + \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{B}_{c,s} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}}_{\mathbf{B}_m} U(t) + \mathbf{w} \\ \mathbf{y} &= \mathbf{C}_m \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{f} \end{bmatrix} + \mathbf{D}_m U(t) + \mathbf{v} \\ \mathbf{w} &\sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{Q}), \quad \mathbf{v} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{R}). \end{aligned} \quad (2.53)$$

A Kálmán-szűrő diszkrét lépésekkel dolgozik, ezért ennek alkalmazásához a rendszert diszkrétizálni kell. Ez a következő összefüggésekkel végezhető el T_s időlépés esetén:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_d &= \exp(\mathbf{A}_m T_s), \quad \mathbf{B}_d = \mathbf{A}_m^{-1} (\mathbf{A}_d - \mathbf{I}) \mathbf{B}_m, \quad \mathbf{Q}_d = \int_{\tau=0}^{T_s} \exp(\mathbf{A}_m \tau) \mathbf{Q} \exp(\mathbf{A}_m^T \tau) d\tau, \\ \mathbf{C}_d &= \mathbf{C}_m, \quad \mathbf{D}_d = \mathbf{D}_m, \quad \mathbf{R}_d = \mathbf{R} \frac{1}{T_s}. \end{aligned} \quad (2.54)$$

A $\mathbf{Q}_d$ kiszámítása nehéz lehet a mátrixintegrálás miatt, különösen szimbolikus matematika használata esetén. A $\mathbf{Q}_d$ egyszerűbben is kiszámolható $\mathbf{P}_\infty$ ismeretében. A $\mathbf{P}_\infty$ a Ljapunov-egyenlet megoldása $\mathbf{A}_m$ -re és $\mathbf{Q}$ -ra, $\mathbf{P}_\infty$ az egyes kernelek esetére levezethető (Särkkä & Solin, 2019). Megmutatták (Rogers et al., 2020), hogy ekkor:

$$\mathbf{Q}_d = \mathbf{P}_\infty - \mathbf{A}_d \mathbf{P}_\infty \mathbf{A}_d^T. \quad (2.55)$$

Ez lényegében a (2.54) egyenletben szereplő integrálformula egyszerűsített változata. A $\mathbf{P}_\infty$ meghatározása nélkül is kiszámítható $\mathbf{Q}_d$ a következő segédmátrix alkalmazásával:

$$\mathbf{S} = \exp \left(\begin{bmatrix} -\mathbf{A}_m & \mathbf{Q} \\ \mathbf{0} & \mathbf{A}^T \end{bmatrix} \right) T_s. \quad (2.56)$$

Belátható, hogy ekkor $\mathbf{S}$ a következő alakú:

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} \dots & \mathbf{A}_d^{-1} \mathbf{Q}_d \\ \mathbf{0} & \mathbf{A}_d^T \end{bmatrix}. \quad (2.57)$$

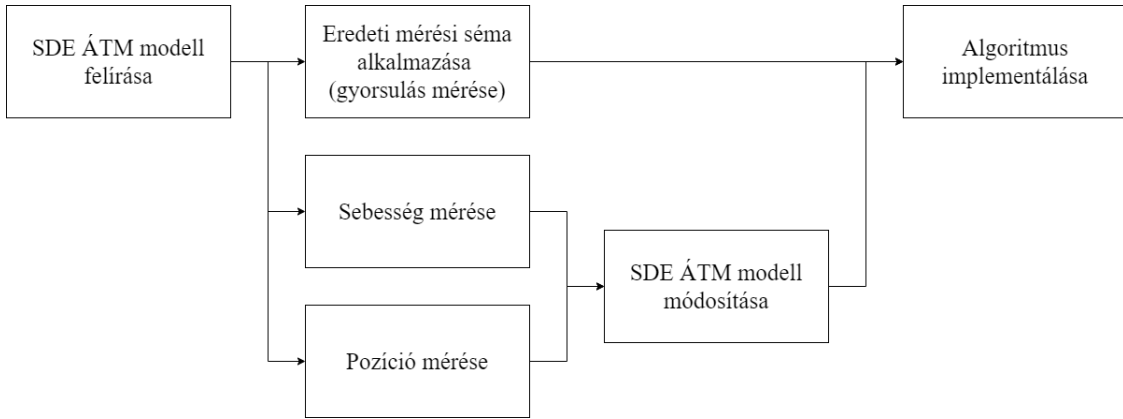
Ekkor $\mathbf{Q}_d$ egyszerűen $(\mathbf{A}_d^T)^T (\mathbf{A}_d^{-1} \mathbf{Q}_d) = \mathbf{Q}_d$ módon kapható meg. Ennek implementációja lényegesen egyszerűbb, mint az előző két módszernél. Az előző alfejezetben bemutatott Kálmán-szűrő így már alkalmazható.

A gépi tanuláshoz használt hiperparaméterek vektora $\Theta = [c, k, \alpha, \sigma, q_v]$ Az algoritmus MCMC részéhez (Rogers et al., 2020) alapján ún. energiafüggvény alkalmazható:

$$\varphi_k(\Theta) = \varphi_{k-1}(\Theta) + \frac{1}{2} \log [2\pi \mathbf{S}_k] + \frac{1}{2} \mathbf{r}_k^T \mathbf{S}_k^{-1} \mathbf{r}_k, \quad (2.58)$$

ahol az $\mathbf{S}_k$ mátrix és az $\mathbf{r}_k$ vektor a Kálmán-szűrő iterálásához használt segédmátrix és segédvektor.

A matematikai levezetés a megvalósítandó algoritmus minden szükséges lépésére ismert tehát. Azonban az implementáció során különös figyelmet kell szentelni a numerikus számításból adódó hibák elkerülésére (ld. a Gauss-folyamat esetén említett problémák). Célszerű ezért az elmélet és megvalósítás kérdésköreit szétválasztani. Ez alatt azt kell érteni, hogy nem feltétlenül érdemes például a diszkretizált mátrixokat paraméteresen megadni, itt az is elégséges, ha menet közben ki vannak számolva egy adott értékre. Tehát ekkor nem kell bonyolult szimbolikus matematikával paraméteres mátrixintegrálást végezni. A 2.7. ábrán láthatók azok a lépések, amelyeket mindenképp meg kell tenni az

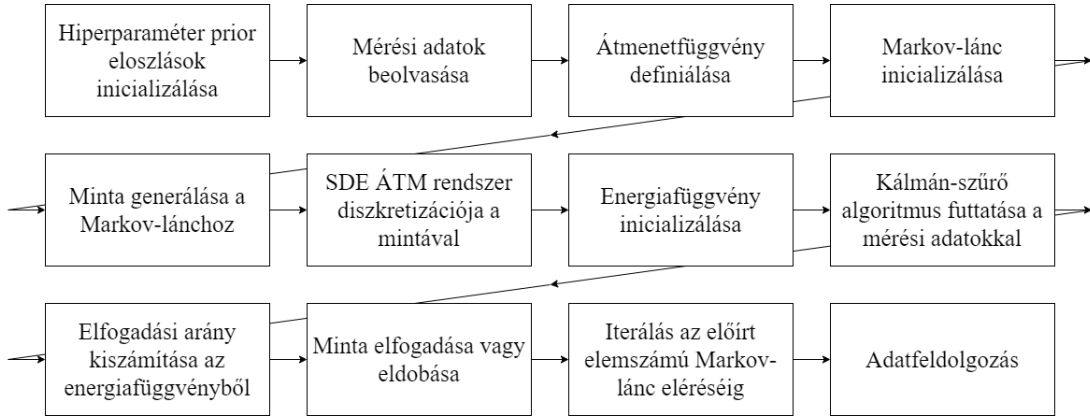


2.7. ábra. Az implementálás megkezdése előtti elméleti lépések. Az SDE ÁTM modell felírása után három elágazás választható

algoritmus programozása előtt. Ezek a lépések a folytonos idejű modell létrehozását jelentik a mérési séma (a dolgozatban gyorsulás mérése) függvényében. A 2.8. ábrán láthatók az implementált algoritmus egyes lépései. Megfigyelhető, hogy érvényesül az előbb leírt előrelátó elrendezés a legbonyolultabb műveletek elvégzésének megkerülése érdekében.

3. Eredmények bemutatása

Ebben a fejezetben az eredmények bemutatása következik. A témakör bonyolultságára és újdonságára való tekintettel, a dolgozatban numerikus szimulációval generált adatsorokra alkalmazom a módszert. Így az eredményül kapott paraméterek megfelelően összehasonlíthatók az ismert rendszerek paramétereivel.



2.8. ábra. A megvalósított algoritmus főbb lépései

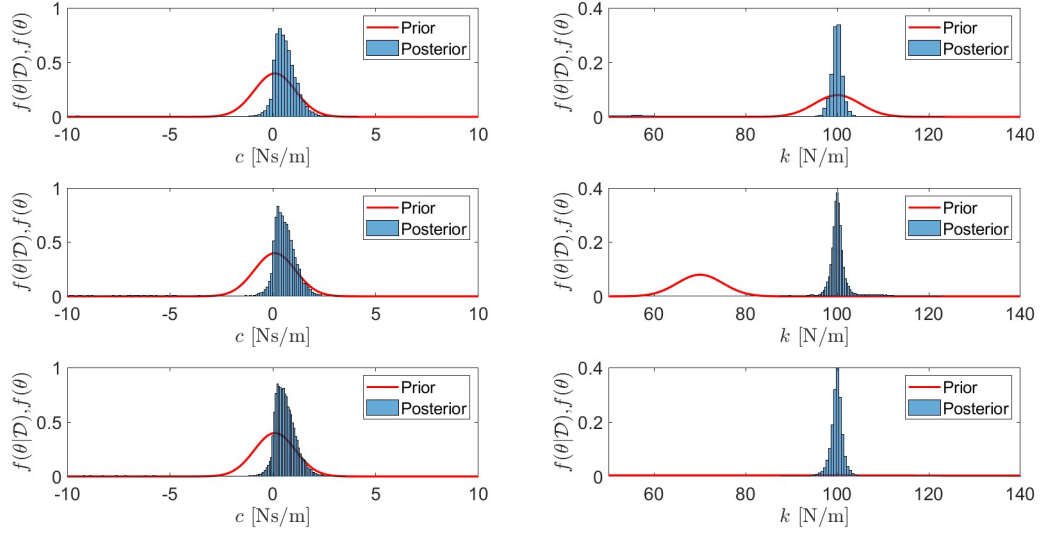
3.1. Algoritmus tesztelése szimulált lineáris oszcillátorral

Az algoritmus összetettsége miatt érdemes megvizsgálni a működés helyességét teljesen lineáris rendszer esetére (ebben az esetben harmonikusan gerjesztett lineáris oszcillátor). A lineáris harmonikusan gerjesztett oszcillátor egyenlete:

$$m\ddot{x} + c\dot{x} + kx = F_0 \sin(\omega t). \quad (3.1)$$

A szimulált adatok a következő paraméterek mellett lettek generálva: $m = 10$ [kg], $c = 0.1$ [Ns/m], $k = 100$ [N/m], $F_0 = 300$ [N], $\omega = 4$ [rad/s], összesen 5000 mintát generálva. Az algoritmus a Markov-lánc 50000 tagjának eléréséig fut, a burn-in arány 10%. A mérési séma szerint a mért kimenőjel a gyorsulás, a gerjesztés erő, a tömeg pedig ismertnek tekintett. A 3.1. ábrán láthatók a fizikai jelentéssel bíró hiperparaméterek a priori és a posteriori eloszlásai különböző módon megválasztott a priori eloszlásokra. A c a priori eloszlása rögzített. A hiperparaméterek a priori eloszlásának megfelelő kiválasztása rendkívül fontos lépés. A nagy bizonyossággal (tehát alacsony szórással) rosszul megválasztott átlag drasztikusan csökkenti a módszer hatékonyságát. A 3.1. ábra felső harmadán a k a priori eloszlásának átlaga megegyezik k valódi értékével, a szórás pedig alacsony. Ez láthatóan gyors konvergenciát és alacsony posterior szórást jelent. A középső harmadban a szórás továbbra is alacsony, de nagy eltérés van a prior átlag és k valódi értéke között. A viszonylag hosszúnak választott Markov-lánc miatt az ebből fakadó hiba nem annyira feltűnő, de még így is látható, hogy szélesebb az eloszlás¹¹, ami magasabb szórásra utal és még a viszonylag magas arányú burn-in fázis után is több helyen outlier látható. Az alsó harmadban a rendkívül magas szórás a paraméter teljes ismeretlenségét indikálja; látható, hogy még ez is jobb, mint egy nagyon rossz átlaggal megválasztott prior. Az előbb leírtakból fontos következtetések vonhatók le, de ami a legfontosabb: a lineáris oszcillátoron keresztül sikerült igazolni az algoritmus működőképességét.

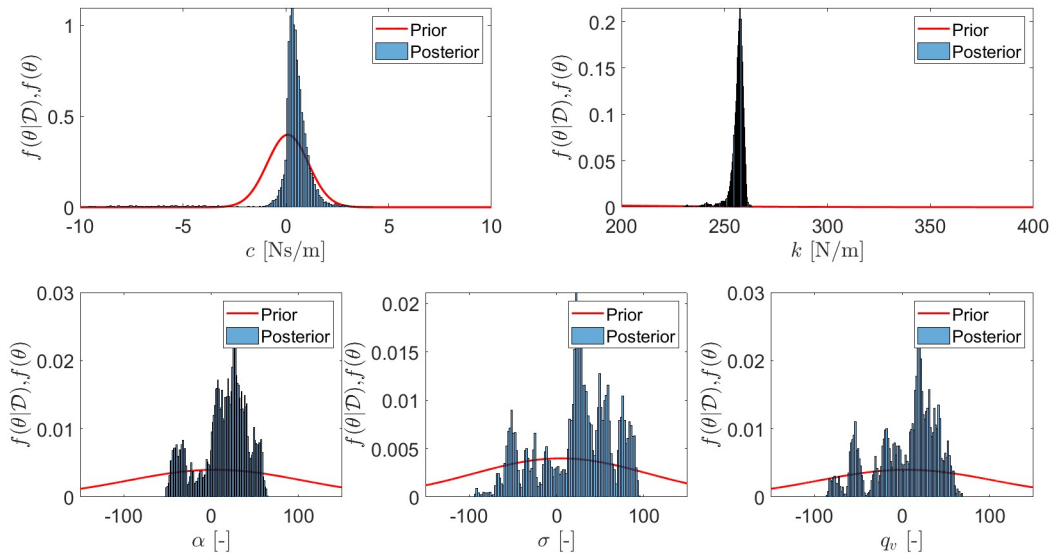
¹¹Hasonló eltérés figyelhető meg, mint a normáeloszlás és a Student-eloszlás összehasonlításánál.



3.1. ábra. A c és k hiperparaméterek a priori és a posteriori eloszlása. Felül az alacsony szórással ($\sigma_{\text{prior}} = 5$), helyesen megválasztott ($\mu_{\text{prior}} = 100 = k$), középen az alacsony szórással ($\sigma_{\text{prior}} = 5$), helytelenül megválasztott ($\mu_{\text{prior}} = 70 \neq k$), alul a nagy szórással ($\sigma_{\text{prior}} = 100$) megválasztott k prior

3.2. Szimulált Duffing-oszcillátor

A paraméterek, a gerjesztés és az egész mérési séma megegyeznek a lineáris oszcillátor esetén vizsgálttal. Az egyetlen különbség az itt megjelenő köbös nemlinearitás paramétere, melynek értéke $d = 4$ [SI]. A 3.2. ábrán láthatók az a priori és az a posteriori hiperpa-



3.2. ábra. Hiperparaméterek a priori és a posteriori eloszlása szimulált Duffing-oszcillátor esetén

raméter eloszlások. Az első, ami rögtön feltűnik, hogy az α , σ , q_v paraméterek a posteriori eloszlása lassan konvergál. Ennek oka, hogy mindhárom esetben nagy szórású,

azaz ismeretlennek tekintett a priori eloszlás a kiindulási eloszlás. Ennél azért több információra van szükség a gyorsabb konvergenciához. Egy paraméter kisebb szórású megadása gyorsíthatja más paraméterek konvergenciáját is. A másik feltűnő jelenség, hogy a lineáris esethez képest eltolódtak a paraméter eloszlások. Ezt az ebben a modellezési fázisban még figyelembe nem vett nemlinearitás okozza, az algoritmus próbálja valamilyen módon ráilleszteni az adatokra a lineáris rendszert (ebből is látszik a paraméteres technikák hátránya).

A következő lépés a rejtett erő kiszámítása, amiből (lévén a módszer nonparametrikus), bármilyen típusú nemlinearitás meghatározható. Ez azonban egy nagyobb lélegzetvételű munka, ami jelen TDK dolgozat keretein belül nem valósulhatott meg, de a cél éppen ezen nagyobb projekt alapjainak lerakása volt.

4. Továbblépési lehetőségek, célkitűzések, trendek

Ebben a fejezetben a szerző meglátásai olvashatók a témával kapcsolatban, elsősorban a projekt továbbfejlesztési lehetőségeit bemutatva. A terület interdiszciplináris jellege és univerzális alkalmazhatósága miatt rendkívül gyümölcsöző ez a módszer, azonban a kezdetben nagy mennyiségű és a mérnökök számára kevésbé ismert matematika könnyen elriaszthatja a vállalkozó szellemű kutatókat. A dolgozatban szereplő technikákat azonban érdemes használni és tanulmányozni, mivel még nagyon kevés cikk jelent meg és ezért egy-egy új publikáció könnyen sokat hivatkozott munkává válhat. Akadémiai szempontból tehát nyilvánvaló az előny, de ipari szempontból is megéri foglalkozni a módszerekkel. Az eredmények konfidenciaintervallummal kaphatók meg, ez pedig hatalmas mértékben megkönnyíti a szabványokkal¹² és jogszabályi előírásokkal való összekapcsolást.

4.1. Ipari szereplőkkel való kooperáció

Az eddig megjelent publikációk között nem található valódi felhasználást bemutató, ez is arra utal, hogy a szerzők még csak az elmélet kidolgozásának fázisában vannak. A valós mechanikai rendszeren végzett méréssel kapott adatokra történő alkalmazása a koncepció igazi erőpróbája, de a szimulációs és benchmark adatok esetén kapott eredmények ígéretesek. Az iparban számtalan helyen alkalmazható lenne a módszer, mivel a szenzorok egyre jobbak és olcsóbbak, tehát mindenképp rendelkezésre állna a kellő mennyiségű adat, melyek feldolgozásához használhatók az egyre nagyobb teljesítményű számítógépek. A lehetőség mellett az igény is megvan a nemlineáris rendszerek modellezésére, ugyanis egy lassú, de biztos paradigmaváltás során a munkaponton linearizált modelleket egyre

¹²Például csavarok gyártásánál az ISO 286 szabvány szerinti tűrésmező és a maximális selejtarány együttesen meghatározzák a konfidenciaintervallumot. Ez alapján is nyilvánvaló, hogy sokkal hasznosabb a konfidenciaintervallummal ellátott paraméter, mint egy szimpla valós szám.

inkább felváltják a nemlineáris modellek.

A kooperáció elsősorban olyan ipari szereplőkkel valósítható meg, melyek maguk is foglalkoznak olyan területtel, ahol a valószínűségszámítás ilyen szintű ismerete szükséges. Az önvezető autókban is nagyon gyakran alkalmazott szenzorfüzió a területnek egy már kiforrott és rendkívül sikeres ága. Magyarországon a thyssenkrupp Components Technology Hungary Kft. és a Robert Bosch GmbH egyaránt foglalkozik K+F keretein belül autonóm járművekkel, így ők potenciális partnernek számítanak.

4.2. Kalman-Bucy filter

A bemutatott módszer esetén a rendszert diszkretizálni kellett, hogy a Kálmán-szűrő alkalmazható legyen. A Kálmán-szűrőnek azonban létezik folytonos idejű általánosítása, ez az ún. Kalman-Bucy filter (Ruymgaart & Soong, 2013), (Mitter & Newton, 2005). A diszkretizálás elhagyása elvileg növelheti a pontosságot.

4.3. Extended Kalman filter és unscented Kalman filter

A Kálmán-szűrő egy másik problémája, hogy kimondatlanul is lineáris rendszerekre volt használható. Ez nem számított problémának az implementáció során, hiszen az összes nemlineáris tag $\hat{f}(z, \dot{z}) \sim \mathcal{GP}(0, k(t, t^*))$ sztochasztikus folyamattal került modellezésre. Azonban ha valamilyen nemlinearitásról tudjuk, hogy benne van a rendszerben (például egy pontos analitikus levezetés által), akkor az eredeti módszer szerint ezt nem tudjuk kihasználni, mivel ez is ismeretlen nemlinearitásként kerül modellezésre. Ha a determinisztikus, eddig teljesen lineáris részhez hozzávesszük az ismert nemlinearitást, akkor a módszer sokkal pontosabban és gyorsabb konvergenciával találja meg az ismeretlen nemlinearitást ahhoz képest, mintha e kettőt együttesen kellene vizsgálni. Ehhez azonban a Kálmán-szűrő nemlineáris változatait szükséges használni, ezek az EKF, azaz extended Kalman filter (Ribeiro, 2004) és UKF, azaz unscented Kalman filter (Wan & Van Der Merwe, 2000). A különböző típusú Kálmán-szűrőkről és alkalmazásukról remek összefoglaló tanulmány is született (Särkkä, 2013). Ebben az irányban nagyon nagy potenciál van, egyáltalán nem tartozik hozzá megjelenés az elérhető szakirodalomban.

5. Összefoglaló

Munkám során alapos szakirodalom kutatás végeztem a témakör beható tanulmányozása érdekében, a nemlineáris rendszerek, sztochasztika és gépi tanulás területein egyaránt. Elméleti bemutatót készítettem, hogy látszódjék, mely lépéseket követik a témával foglalkozó kutatók (és jómagam is). Igyekeztem ebben a részben megtalálni a matematikai szigor és az intuíció közötti egyensúlyt. Úgy gondolom, hogy ezt a célt maximálisan

sikerült elérni, ennek eldöntését az Olvasóra bízom. Az egész dolgozatban, különösen az elméleti összefoglaló részben, igyekeztem megtörni a monotonitást tudománytörténeti érdekességekkel és rámutatni a kapcsolatra más területekkel.

A dolgozat megírása előtt kitűzött célokat sikerült elérni. A dolgozat keretein belül elvégzett munka lehetővé teszi az eredeti módszer továbbfejlesztését, ami már eddig is úttörőnek számított. Sikeresen implementáltam az identifikációt végrehajtó algoritmus magját, működését teszteredményekkel bizonyítottam. Kijelöltem a továbbfejlesztés lehetséges irányait mind az ipari felhasználás, mind az elméleti levezetés területén.

Minden ábra saját készítésű, ezek elkészítéséhez és a számítások, algoritmusok végrehajtásához MATLAB szoftvert használtam.

6. Irodalomjegyzék

Alvarez, M., Luengo, D., & Lawrence, N. D. (2009, April). Latent force models. In *Artificial Intelligence and Statistics* (pp. 9-16). PMLR.

Genton, M. G. (2001). Classes of kernels for machine learning: a statistics perspective. *Journal of machine learning research*, 2(Dec), 299-312.

Hartikainen, J., & Särkkä, S. (2010, August). Kalman filtering and smoothing solutions to temporal Gaussian process regression models. In *2010 IEEE international workshop on machine learning for signal processing* (pp. 379-384). IEEE.

Ibrahim, D. (2016). An overview of soft computing. *Procedia Computer Science*, 102, 34-38.

Metropolis, N., Rosenbluth, A. W., Rosenbluth, M. N., Teller, A. H., & Teller, E. (1953). Equation of state calculations by fast computing machines. *The journal of chemical physics*, 21(6), 1087-1092.

Minh, H. Q., Niyogi, P., & Yao, Y. (2006, June). Mercer's theorem, feature maps, and smoothing. In *International Conference on Computational Learning Theory* (pp. 154-168). Springer, Berlin, Heidelberg.

Mitter, S. K., & Newton, N. J. (2005). Information and entropy flow in the Kalman–Bucy filter. *Journal of Statistical Physics*, 118(1), 145-176.

Murphy, K. P. (2012). *Machine learning: a probabilistic perspective*. MIT press.

Rasmussen, C. E. (2003, February). Gaussian processes in machine learning. In *Summer school on machine learning* (pp. 63-71). Springer, Berlin, Heidelberg.

- Ribeiro, M. I. (2004). Kalman and extended kalman filters: Concept, derivation and properties. *Institute for Systems and Robotics*, 43, 46.
- Rogers, T. J., & Friis, T. (2022). A latent restoring force approach to nonlinear system identification. *Mechanical Systems and Signal Processing*, 180, 109426.
- Rogers, T. J., Worden, K., & Cross, E. J. (2020). On the application of Gaussian process latent force models for joint input-state-parameter estimation: With a view to Bayesian operational identification. *Mechanical Systems and Signal Processing*, 140, 106580.
- Ruymgaart, P. A., & Soong, T. T. (2013). *Mathematics of Kalman-Bucy Filtering* (Vol. 14). Springer Science & Business Media.
- Särkkä, S., & Solin, A. (2019). *Applied stochastic differential equations* (Vol. 10). Cambridge University Press.
- Särkkä, S. (2008). Unscented rauch–tung–striebel smoother. *IEEE transactions on automatic control*, 53(3), 845-849.
- Särkkä, S. (2013). *Bayesian filtering and smoothing* (No. 3). Cambridge university press.
- Wan, E. A., & Van Der Merwe, R. (2000, October). The unscented Kalman filter for nonlinear estimation. In *Proceedings of the IEEE 2000 Adaptive Systems for Signal Processing, Communications, and Control Symposium (Cat. No. 00EX373)* (pp. 153-158). Ieee.