

Universität
Rostock



Lehrstuhl für Technische Thermodynamik

Beitrag zur Vorhersage von Partikelemissionen aufgrund von Schiffsmanövern unter Verwendung Künstlicher Neuronaler Netze

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor-Ingenieur (Dr.-Ing.)
der Fakultät für Maschinenbau und Schiffstechnik
der Universität Rostock

vorgelegt von:
Michèle Schaub, geb. am 17.02.1981 in Lausen (Schweiz)
aus Rostock

Rostock, 10. November 2021

eingereicht: 10.11.2021

verteidigt: 21.09.2022

Gutachter: Prof. Dr.-Ing. habil. Karsten Müller
Universität Rostock

Prof. Dr.-Ing. Torsten Jeinsch
Universität Rostock

Vorwort und Danksagung

Im Frühjahr 2014 ist die Ursprungsidee zur vorliegenden Arbeit entstanden. Meine Masterarbeit zu „Untersuchungen zu Verbrauch und Emissionen eines mittelschnelllaufenden Schiffsdieselmotors während des Manöverbetriebs“ war vollendet. Nichtsdestotrotz hat die Arbeit einige Fragen noch offen gelassen und neue Interessensgebiete aufgezeigt. Meine damaligen Betreuer, Prof. Dr.-Ing. Bert Buchholz und Prof. Dr.-Ing. Karsten Wehner motivierten mich zur Beantragung eines nationalen Drittmittelprojektes mit dem Ziel zu promovieren. Das beantragte Forschungsvorhaben unter dem Akronym MEmBran ließ lange auf sich warten.

In der Zwischenzeit durfte ich Bekanntschaft mit Prof. Dr.-Ing. habil. Dr. h.c. Egon Hassel vom Lehrstuhl für Technische Thermodynamik (LTT) machen, der mich als Doktorvater begleiten wollte. Es fehlte nur noch ein Projekt, welches die Promotion finanziell unterstützen würde. Ende 2016 war es endlich soweit, dass das Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWi) das Projekt MEmBran bewilligte. Dies geschah nur wenige Wochen bevor meine Tochter Mina das Licht der Welt erblicken durfte. Nach dem Motto „aufgeschoben ist nicht aufgehoben“ ruhte das Promotionsvorhaben, während das Projekt MEmBran dank regem Engagement meiner Kollegen sowohl an der Universität Rostock/LTT als auch an der Hochschule Wismar/ISSIMS seinen Lauf nahm.

Der Wiedereinstieg nach der Elternzeit am Institut ISSIMS am Bereich Seefahrt, Anlagentechnik und Logistik der Hochschule Wismar gestaltete sich nicht ganz einfach. Viele Themen aus dem Projekt MEmBran waren durch meine Kollegen bereits erfolgreich angearbeitet worden und mein Promotionsthema musste sich neu herauskristallisieren. Im Sommer 2018, im Laufe der Literaturrecherche in Bezug auf Methoden zur Fast-Time Simulation machte ich Bekanntschaft mit datenbasierten Verfahren, insbesondere mit den Künstlichen Neuronen Netzen. Parallel dazu zeigte sich bei den Bearbeitern von MEmBran, dass die Nachbildung von Partikelemissionen eine besondere Herausforderung darstellte. Die Basis für ein eigenständiges Thema war gefunden, nämlich die Vorhersage von Partikelemissionen mithilfe datenbasierter Verfahren. An dieser Stelle rückte das Institut für Automatisierungstechnik (IAT) unter Leitung von Prof. Dr.-Ing. Torsten Jeinsch aufgrund deren fundierter Expertise in Sachen datenbasierter Modellbildung in den Vordergrund.

Wissenschaftliche Betreuung, ein wohlwollendes familiäres Umfeld und ein Promotionsthema waren vorhanden. Die Arbeit konnte nun richtig beginnen, wäre da nicht schon das Ende vom Projekt MEmBran und somit auch jenes einer Finanzierungssicherheit in naher Zukunft sichtbar geworden. Dank meines Doktorvaters ist die Option der Landesgraduiertenförderung M-V zur Sprache gekommen, die ab Frühjahr 2019 mit einem Stipendium die Fortsetzung meiner Doktorarbeit finanziell sicherstellte.

Im Herbst 2020 wurde mein Doktorvater emeritiert. Sein Nachfolger, Prof. Dr.-Ing. habil. Karsten Müller, übernahm dankenswerterweise die Betreuung meiner Arbeit.

Ihnen allen, direkt oder indirekt genannten Wegbereiter/innen und Wegbegleiter/innen, möchte ich ein großes Dankeschön für die vielfältige Unterstützung aussprechen. Ein besonderer Dank richte ich abschließend noch an meine Tochter Mina, die mir ruhige Abende bescherte, wenn das Tagespensum für die Bearbeitung nicht ausreichend war - zumindest fast immer... Ihr sei diese Arbeit gewidmet:

*„Wenn an vielen kleinen Orten viele kleine Menschen viele kleine Dinge tun, wird sich das
Angesicht dieser Erde verändern.“
(Afrikanisches Sprichwort)*

Kurzfassung

Der weltweite Seeverkehr ist eine der Ursachen für die anthropogene Luftverschmutzung. Bei der Energieumwandlung in Dieselmotoren, insbesondere beim transienten Betrieb der Antriebsanlage, werden diverse Schadstoffe freigesetzt. Ein wesentlicher Bestandteil bilden die Partikel. Es handelt sich dabei hauptsächlich um Ruß, eine unreine Kohlenstoffsubstanz unterschiedlicher Größe, die bei der unvollständigen Verbrennung von Kohlenwasserstoffen entsteht. Auch weitere sowohl unlösliche nicht flüchtige als auch lösliche flüchtige Bestandteile zählen zu den Partikeln, deren Reduzierung Hauptmotivation dieser Arbeit ist.

Dieser Beitrag setzt sich mit der Literatur zur theoretischen, physikalischen Modellbildung von Partikelemissionen auseinander, um einerseits die Komplexität der Partikelentstehung verständlich zu machen. Andererseits wird dadurch die Notwendigkeit der experimentellen, datenbasierten Modellierung herausgearbeitet. Das wesentliche Kriterium bei dieser Recherche ist eine möglichst kurze Rechenzeit. Dieses Kriterium trägt einer praktischen Anwendung Rechnung, in welche das zu entwickelnde Modell implementiert werden soll.

Bei der praktischen Anwendung handelt es sich um eine Manöver-Assistenzsoftware, die Vorhersagen zum Bewegungsverhalten eines Schiffes während des Manövrierens tätigt. Eine Erweiterung dieser Software um eine neue Funktionalität, mit welcher der Partikelmassenstrom vorhergesagt werden kann, soll künftig den Informationsgehalt erhöhen. Wenn dem Nautiker ein vollständiges Bild über die Konsequenzen der ergriffenen Handlungen und Maßnahmen bereitgestellt wird, wird die Rolle der Schiffsführung in Bezug auf die Entscheidungsfindung für einen energieeffizienten und emissionsarmen Schiffsverkehr, insbesondere beim Manövrieren, gestärkt.

Datenbasierte Modelle stützen sich auf eine experimentelle, empirische Datengrundlage. Diese Datengrundlage entstammt in der vorliegenden Arbeit zweier Prüfstandmotoren unterschiedlicher Hersteller, beide 4-Takt Schiffsdieselmotor. Auf Basis mehrerer hundert Lastwechsel, bei denen die Partikelemissionen über ein mobiles Messgerät und zahlreiche weitere Betriebsparameter über ein stationäres Messwerterfassungssystem aufgezeichnet werden, wird in einem ersten Schritt in Anlehnung an ein bekanntes Verfahren ein halbempirisches Modell entwickelt. Dieses Modell M0 dient im Anschluss zur Erzeugung beliebig vieler und beliebig langer synthetischer Datensätze.

Die synthetisch erzeugten Datensätze bilden eine neutrale Datenbasis für die Untersuchung dreier interessierender Modellansätze M1, M2 und M3. Die zwei Ersteren, beide aus der Literatur bekannt, legen den Fokus auf die Künstlichen Neuronalen Netze, während als drittes Modell ein eigens entwickeltes Verfahren in die Untersuchungen mit einbezogen wird.

Die Erkenntnisse der Arbeit sind vielschichtig. Was die konkrete Anwendung in einer Manöver-Assistenzsoftware betrifft, haben sich zwei der untersuchten Ansätze als besonders interessant erwiesen: Der einfachen Umsetzbarkeit halber können Künstliche Neuronale Netze mit externer Dynamik gemäß Modell M1 einen nutzbringenden Dienst erweisen unter der Bedingung, dass zahlreiche, qualitativ hochwertige Messdaten zur Parametrierung zur Verfügung stehen. Training und Validierung können automatisiert ablaufen. Im Sinne der Zuverlässigkeit der Vorhersagen erfüllt das halbempirische Modell M0 - ursprünglich lediglich für die synthetische Datenerzeugung entwickelt - die Erwartungen am besten. Allerdings kann das Anlernen des Modells nicht vollautomatisiert durchgeführt werden. Einen Beitrag zur Vorhersage von Partikelemissionen, im Sinne der Zielsetzung dieser Arbeit, können beide Verfahren leisten.

Abstract

Global maritime transport is one of the causes of anthropogenic air pollution. Various pollutants are released during energy conversion in diesel engines, especially during the transient operation of the propulsion system. Particulate matter is an essential component. These are mainly soot, an impure carbon substance of various sizes, which is formed during the incomplete combustion of hydrocarbons. But various other, both insoluble non-volatile and soluble volatile, components are included in the particles, the reduction of which is the main motivation of this work.

This paper aims at discussing the literature regarding theoretical, physical modelling of particle emissions in order to make the complexity of particle formation understandable. Furthermore, it highlights the necessity of experimental, data-based modelling. The essential criterion in this research is the target calculation time. This criterion takes into account a practical application in which the to be developed model is to be implemented.

The practical application is a manoeuvre assistance software for ships that makes predictions about the manoeuvre sequence of a ship. An extension of this software with a new functionality, which predicts the particle mass flow, is intended to increase the information content in the future. Providing the navigators with a complete understanding of the consequences of their actions and measures will strengthen the role of the ship's command in terms of decision-making for energy-efficient and low-emission shipping, especially during manoeuvres, is strengthened.

Data-based models rely on an experimental, empirical database. In the present study, this database comes from two test bench engines from different manufacturers, both 4-stroke marine diesel engines. In a first step, on the basis of several hundred load changes, during which the particulate emissions are recorded via a mobile measuring device and numerous other operating parameters are recorded by a stationary data acquisition system, a semi-empirical model is created with reference to known procedures. This model M0 is then used to generate any number and any length of synthetic data sets.

The synthetically generated data sets form a neutral database for the investigation of three model approaches of interest, M1, M2 and M3. The first two, both known from the corresponding literature, focus on artificial neural networks, with a third model, a method developed in-house, being included in the studies.

The results of the work are multi-layered. As far as the concrete application in a manoeuvre assistance software is concerned, two of the four approaches investigated have turned out to be of interest: For the ease of implementation, artificial neural networks with external dynamics according to the M1 model may provide a useful service under the condition that numerous, high-quality measurement data are available for model parameterisation. Training and model validation can be carried out automatically. In terms of robustness and reliability of the predictions, the semi-empirical model M0 - originally developed only for synthetic data generation - best meets expectations. However, the training of the model cannot be fully automated and requires some manual effort.

Both methods are capable of making a contribution to the prediction of particulate emissions in the sense of the objective of this work.

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	v
Tabellenverzeichnis	xi
Nomenklatur	xiii
Lateinische Symbole	xiii
Griechische Symbole	xvi
Indizes	xvii
Abkürzungen	xviii
1 Einleitung	1
1.1 Motivation	1
1.2 Problemstellung	5
1.3 Zielstellung und Aufbau der Arbeit	7
2 Stand der Technik als Diskussionsgrundlage für die Modellwahl	9
2.1 Literaturüberblick: Theoretische Modellbildung	9
2.1.1 Motorprozessrechnung	10
2.1.2 Rußentstehung und -oxidation nach Hiroyasu	13
2.1.3 Weiterentwicklung durch Kožuch	14
2.1.4 9-stufiges, phänomenologisches Modell nach Tao	15
2.1.5 Particle Sectional Model	16
2.1.6 Abgeschlossene Forschungsprojekte zur Emissionsmodellierung beim transienten Motorbetrieb	16
2.2 Literaturüberblick: Experimentelle Modellbildung	18
2.2.1 Klassische statische Verfahren	20
2.2.2 Künstliche Neuronale Netze	21
2.2.3 Lokal lineare Modelle	25
2.2.4 Support-Vektor-Maschinen	28
2.2.5 Überblick zu statischen Modellansätzen hinsichtlich deren Nutzung für dynamische Prozesse	30
2.3 Modellwahl	33
2.3.1 Theoretisches vs. datenbasiertes Modell	33
2.3.2 Modellstrukturen	33
2.4 Theoretische Betrachtung ausgewählter Modellarchitekturen	35
2.4.1 Theorie zu stationären MLP-Netzen	35
2.4.2 Theorie zu KNN mit externer Dynamik	41
2.4.3 Theorie zu KNN mit interner Dynamik	42
2.5 Zusammenfassung und Fazit	45

3	Rahmenbedingungen	47
3.1	Festlegen der Modelleingangsgrößen	47
3.1.1	Stationärer Motorbetrieb	48
3.1.2	Transienter Motorbetrieb	50
3.2	Prüfstandaufzeichnungen als Datengrundlage	51
3.2.1	Prüfstandmotoren	51
3.2.2	Messtechnik	51
3.2.3	Partikelmessungen	53
3.2.4	Versuchsaufbau und -durchführung	54
3.3	Aufbereitung der Prüfstandaufzeichnungen	55
3.3.1	Extraktion stationärer Daten	55
3.3.2	Einheiten und zeitliche Anpassungen	55
3.3.3	Aufteilung der Daten	55
3.4	Bewertungskriterien	58
3.4.1	Kriterien für Modellansätze zur Beschreibung von stationären Zuständen	58
3.4.2	Kriterien für Modellansätze zur Beschreibung von dynamischen Prozessen	59
3.5	Zusammenfassung und Fazit	61
4	Synthetische Datenerzeugung (Modell M0)	63
4.1	Simulation der Modell-Eingangsgrößen mit Regelalgorithmus	64
4.2	Stationärer Anteil: mit statischem MLP-Netz	66
4.2.1	Training und Validierung	67
4.2.2	Testung	69
4.2.3	Übertragbarkeit der Methode	70
4.3	Transienter Anteil: mit doppelter Exponentialfunktion nach Vibe	71
4.3.1	Theorie zur doppelten Exponentialfunktion nach Vibe	72
4.3.2	Praktische Umsetzung zur Simulation des transienten Anteils an Partikelemissionen	77
4.4	Erzeugung synthetischer Daten mit Modell M0	80
4.5	Zusammenfassung und Fazit	83
5	Modellbildung unter Nutzung von KNN	85
5.1	Modell M1: KNN mit externer Dynamik	86
5.2	Modell M2: KNN mit interner Dynamik	91
5.3	Modell M3: Hybrider Ansatz mit statischem MLP-Netz und ARMA-Modell .	97
5.4	Zusammenfassung und Fazit	104
6	Ergebnisauswertung	105
6.1	Ergebnisübersicht zu den Modellen M0 bis M3	105
6.2	Diskussion der Ergebnisse	105
7	Zusammenfassung und Ausblicke	109
7.1	Zusammenfassung	109
7.2	Ausblicke	111
7.2.1	Datenbasierte Modelle in der Motorenprojektierung	111
7.2.2	Simulation der Partikelgrößenverteilung	112
7.2.3	Datenbasierte Modellbildung mithilfe der Support-Vektor-Regression .	113

Literatur	115
A Auswahl von Termen der Energiebilanz	125
B Prüfstandmotoren	127
C Synthetisch generierte Datensätze	129
C.1 Bewertung des Modells für den Stationäranteil	129
C.2 Vergleich des Modells zur synthetischen Datenerzeugung mit Messdaten . . .	130
C.3 Vier Trainings- und Validierungsdatensätze	132
C.4 Testdatensatz	134
D Darstellung von Ergebnissen	135
D.1 Abbildungen zum 1. Datensatz mit einem Lastwechsel	135
D.2 Abbildungen zur Simulation der Testdaten mit Modellen vom 1. Datensatz .	137
D.3 Abbildungen zum 2. Datensatz mit 144 Lastwechsel	140
D.4 Abbildungen zur Simulation der Testdaten mit Modellen vom 2. Datensatz .	141
D.5 Abbildungen zum 3. Datensatz mit 544 Lastwechsel	144
D.6 Abbildungen zur Simulation der Testdaten mit Modellen vom 3. Datensatz .	145
D.7 Abbildungen zum 4. Datensatz mit 12960 Lastwechsel	148
D.8 Abbildungen zur Simulation der Testdaten mit Modellen vom 4. Datensatz .	149
D.9 Veränderung der Parameter beim Modell M2	152
D.10 Modell M3: Vergleich der Simulationsergebnisse	154
E Vergleich Simulation von Messdaten vom Prüfstandmotor 6L23/30	155
Selbstständigkeitserklärung	157
Wissenschaftlicher Lebenslauf	159
Liste der Veröffentlichungen	161

Abbildungsverzeichnis

1.1	Beobachteter Partikelaustritt am Prüfstandmotor 6L23/30	2
1.2	Manöverassistenz-Software SAMMON	3
1.3	Überblick über den Aufbau der Arbeit mit Augenmerk auf die Verwendung der Daten und die Einordnung der zu untersuchenden Modellansätze.	8
2.1	Überblick über die Hauptkomponenten des Gesamtmotorprozesses	10
2.2	Schematische Darstellung des neunstufigen, phänomenologischen Rußmodells	15
2.3	Partikelbelastung bei Lastsprung (Messdaten und Simulation)	17
2.4	Rußkonzentration bei Lastsprung (Messdaten und Simulation)	17
2.5	Prinzip der Systemidentifikation	18
2.6	Übersicht über eine Auswahl an möglichen Modellarchitekturen	19
2.7	Rasterkennfeld, MLP-Netz und Fuzzy-logisches Modell für dieselmotorische Anwendung	20
2.8	Oszillation zwischen zwei Messpunkten und Divergieren bei Extrapolation bei Polynomen	21
2.9	Schematische Darstellung eines KNN	22
2.10	Darstellung der drei gebräuchlichsten KNN für statische Anwendungen	23
2.11	Vier typische Aktivierungsfunktionen für ein mathematisches Perzeptron . . .	24
2.12	Die XOR-Dichotomie	29
2.13	LOLIMOT mit drei Eingangsgrößen und der Ausgangsgröße Ruß	32
2.14	Trainingsdaten für die Berechnung von Stickoxiden und deren Nachbildung mithilfe eines MLP-Modells mit interner Dynamik	32
2.15	Schematische Darstellung der Funktionen, die in jedem mathematischen Neuron durchlaufen werden	36
2.16	Schematische Darstellung eines KNN mit externer Dynamik	41
2.17	Qualitativer Vergleich von statischen Messpunkten im Kennfeld und transientem Verlauf zwischen den Wertepaaren	42
2.18	Schematische Darstellung eines KNN mit interner Dynamik	43
2.19	Schematische Darstellung eines Prozesselements mit interner Dynamik	43
3.1	Qualitative Darstellung der Betriebspunkte von Propeller- und Generatorkurven im Motorkennfeld	48
3.2	Aufteilung der insgesamt vorhandenen Daten für Trainings-, Validierungs- und Testzwecke	56
3.3	Trainings- und Validierungsdaten und Testdaten für stationäres KNN	56
3.4	Box Plot mehrerer Lastpunkte auf der 100%-Propellerkurve	59
3.5	Mehrfach wiederholte Lastwechsel	60
3.6	Ergebnis von Lasterhöhungen auf der Generatorkurve	61
4.1	Aufteilung des Partikelmassenstroms in stationären und transienten Anteil . .	63
4.2	Schematische Darstellung eines Schiffes in stationärer Fahrt	65

4.3	Beispiel eines Lastsprungs von 30 % auf 50 % im 100%-Propellerbetrieb . . .	66
4.4	Ergebnis 4-facher Kreuzvalidierung	68
4.5	Darstellung von Trainings- und Validierungsdaten	69
4.6	Darstellung von Testdatensatz 85%-Propellerkurve	70
4.7	Box Plots von 85%-Propellerkurve	70
4.8	Brennverlauf bzw. relativer Summenbrennverlauf aus Messdaten bei 100% Leistung auf der Generatorkurve ermittelt	71
4.9	PM-Verlauf bzw. relativer Summenbrennverlauf aus Messdaten eines Lastsprungs vom 6L23/30er-Motor auf der 100%-Propellerkurve	73
4.10	PM-Verlauf beim 6M20er-Motor während eines Lastsprungs von 25 % auf 50 % auf der 100%-Propellerkurve	74
4.11	Lastreduktion: Aufteilung in stationären und transienten Anteil	78
4.12	Vorgehen zur synthetischen Datenerzeugung	80
4.13	Simulierte Lastwechsel auf der Generatorkurve	82
5.1	Vergleich Simulationsergebnis von Modell M1_1LW mit Trainings- bzw. Validierungsdatensatz von Modell M0	87
5.2	Überlagerte Lastwechsel nachgebildet mit KNN mit externer Dynamik (Modell M1)	89
5.3	Vergleich Simulationsergebnis von Modell M2_1LW mit Trainings- bzw. Validierungsdatensatz von Modell M0	92
5.4	Überlagerte Lastwechsel nachgebildet mit KNN mit interner Dynamik (Modell M1)	93
5.5	Berechnung des überlagerten Lastwechsels mit einem Abstand von 50 s zwischen zwei Kommandowechseln	95
5.6	Schematische Darstellung des hybriden Ansatzes	98
5.7	Vergleich Simulationsergebnis von Modell M3_1LW mit Trainings- bzw. Validierungsdatensatz von Modell M0	99
5.8	Überlagerte Lastwechsel nachgebildet mit hybridem ARMA-Modellansatz (Modell M3)	102
5.9	Überlagerte Lastwechsel auf Propellerkurve nachgebildet mit hybridem ARMA-Modellansatz (Modell M3)	102
7.1	Partikelgrößenverteilung (oben: normiert, unten: absolut) im stationären Propellerbetrieb für verschiedene Motorlasten [99]	113
B.1	Motorprüfstand MAN B&W 6L23/30 mit Wasserwirbelbremse	128
C.1	Box Plots von Partikelemissionen entlang der Generatorkurve: MLP-Netz (a) mit $h = 6$ links, MLP-Netz (b) mit $h = 7$ rechts; grün: gemessene Mittelwerte, magenta: Simulation	129
C.2	Box Plots von Partikelemissionen entlang der 100%-Propellerkurve: MLP-Netz (a) mit $h = 6$ links, MLP-Netz (b) mit $h = 7$ rechts; grün: gemessene Mittelwerte, magenta: Simulation	129
C.3	Verläufe aller gemessenen Lastwechsel abhängig von Motordrehzahl und Verbrauch	130
C.4	Verläufe aller mit Modell M0 synthetisch erzeugten Lastwechsel in Abhängigkeit von Motordrehzahl und Verbrauch	130

C.5	Vergleich des Modells M0 zur synthetischen Datenerzeugung mit Messdaten vom Testdatensatz	131
C.6	Mit Modell 0 synthetisch generierter Datensatz 1	132
C.7	Mit Modell 0 synthetisch generierter Datensatz 2	132
C.8	Mit Modell 0 synthetisch generierter Datensatz 3	133
C.9	Mit Modell 0 synthetisch generierter Datensatz 4	133
C.10	Mit Modell 0 synthetisch generierter Testdatensatz	134
D.1	Vergleich Simulationsergebnis von Modell M1_1LW mit Trainings- bzw. Validierungsdatensatz von Modell M0	135
D.2	Vergleich Simulationsergebnis von Modell M2_1LW mit Trainings- bzw. Validierungsdatensatz von Modell M0	135
D.3	Vergleich Simulationsergebnis von Modell M3_1LW mit Trainings- bzw. Validierungsdatensatz von Modell M0	136
D.4	Vergleich Simulationsergebnis von Modell M1_1LW mit Testdatensatz von Modell M0	137
D.5	Vergleich Simulationsergebnis von Modell M2_1LW mit Testdatensatz von Modell M0	137
D.6	Vergleich Simulationsergebnis von Modell M3_1LW mit Testdatensatz von Modell M0	137
D.7	Histogramm der prozentualen, betragsmäßigen Abweichungen der Spitzenwerte bei der Nachsimulation des Testdatensatzes mit M1_1LW	138
D.8	Histogramm der prozentualen, betragsmäßigen Abweichungen der Spitzenwerte bei der Nachsimulation des Testdatensatzes mit M2_1LW	138
D.9	Histogramm der prozentualen, betragsmäßigen Abweichungen der Spitzenwerte bei der Nachsimulation des Testdatensatzes mit M3_1LW	139
D.10	Vergleich Simulationsergebnis von Modell M1_144LW mit Trainings- bzw. Validierungsdatensatz von Modell M0	140
D.11	Vergleich Simulationsergebnis von Modell M2_144LW mit Trainings- bzw. Validierungsdatensatz von Modell M0	140
D.12	Vergleich Simulationsergebnis von Modell M3_144LW mit Trainings- bzw. Validierungsdatensatz von Modell M0	140
D.13	Vergleich Simulationsergebnis von Modell M1_144LW mit Testdatensatz von Modell M0	141
D.14	Vergleich Simulationsergebnis von Modell M2_144LW mit Testdatensatz von Modell M0	141
D.15	Vergleich Simulationsergebnis von Modell M3_144LW mit Testdatensatz von Modell M0	141
D.16	Histogramm der prozentualen, betragsmäßigen Abweichungen der Spitzenwerte bei der Nachsimulation des Testdatensatzes mit M1_144LW	142
D.17	Histogramm der prozentualen, betragsmäßigen Abweichungen der Spitzenwerte bei der Nachsimulation des Testdatensatzes mit M2_144LW	142
D.18	Histogramm der prozentualen, betragsmäßigen Abweichungen der Spitzenwerte bei der Nachsimulation des Testdatensatzes mit M3_144LW	143
D.19	Vergleich Simulationsergebnis von Modell M1_544LW mit Trainings- bzw. Validierungsdatensatz von Modell M0	144

D.20 Vergleich Simulationsergebnis von Modell M2_544LW mit Trainings- bzw. Validierungsdatensatz von Modell M0	144
D.21 Vergleich Simulationsergebnis von Modell M3_544LW mit Trainings- bzw. Validierungsdatensatz von Modell M0	144
D.22 Vergleich Simulationsergebnis von Modell M1_544LW mit Testdatensatz von Modell M0	145
D.23 Vergleich Simulationsergebnis von Modell M2_544LW mit Testdatensatz von Modell M0	145
D.24 Vergleich Simulationsergebnis von Modell M3_544LW mit Testdatensatz von Modell M0	145
D.25 Histogramm der prozentualen, betragsmäßigen Abweichungen der Spitzenwerte bei der Nachsimulation des Testdatensatzes mit M1_544LW	146
D.26 Histogramm der prozentualen, betragsmäßigen Abweichungen der Spitzenwerte bei der Nachsimulation des Testdatensatzes mit M2_544LW	146
D.27 Histogramm der prozentualen, betragsmäßigen Abweichungen der Spitzenwerte bei der Nachsimulation des Testdatensatzes mit M3_544LW	147
D.28 Vergleich Simulationsergebnis von Modell M1_12960LW mit Trainings- bzw. Validierungsdatensatz von Modell M0	148
D.29 Vergleich Simulationsergebnis von Modell M2_12960LW mit Trainings- bzw. Validierungsdatensatz von Modell M0	148
D.30 Vergleich Simulationsergebnis von Modell M3_12960LW mit Trainings- bzw. Validierungsdatensatz von Modell M0	148
D.31 Vergleich Simulationsergebnis von Modell M1_12960LW mit Testdatensatz von Modell M0	149
D.32 Vergleich Simulationsergebnis von Modell M2_12960LW mit Testdatensatz von Modell M0	149
D.33 Vergleich Simulationsergebnis von Modell M3_12960LW mit Testdatensatz von Modell M0	149
D.34 Histogramm der prozentualen, betragsmäßigen Abweichungen der Spitzenwerte bei der Nachsimulation des Testdatensatzes mit M1_12960LW	150
D.35 Histogramm der prozentualen, betragsmäßigen Abweichungen der Spitzenwerte bei der Nachsimulation des Testdatensatzes mit M2_12960LW	150
D.36 Histogramm der prozentualen, betragsmäßigen Abweichungen der Spitzenwerte bei der Nachsimulation des Testdatensatzes mit M3_12960LW	151
D.37 Nachbildung des transienten Anteils des 2. Datensatzes mithilfe der rechnerisch ermittelten Modellkoeffizienten und unter Verwendung der mit Modell M3_144LW simulierten Koeffizienten.	154
D.38 Streudiagramm zur Visualisierung der Korrelationskoeffizienten von Modell M3	154
E.1 Vergleich der Messungen vom Testdatensatz (85%-Propellerkurve) mit Simulationsergebniss von Modell M0	155
E.2 Vergleich der Messungen vom Testdatensatz (85%-Propellerkurve) mit Simulationsergebniss von Modell M1	156
E.3 Vergleich der Messungen vom Testdatensatz (85%-Propellerkurve) mit Simulationsergebniss von Modell M2	156

E.4 Vergleich der Messungen vom Testdatensatz (85%-Propellerkurve) mit Simulationsergebniss von Modell M3	156
---	-----

Tabellenverzeichnis

2.1	Übersicht zu Vor- und Nachteilen der vorgestellten Modellarchitekturen . . .	31
4.1	Vergleich des gemessenen transienten Anteils mit dessen Simulation	79
4.2	Vergleich von Messung mit Simulation des Gesamtmodells M0	81
4.3	Mit Modell M0 synthetisch generierte Datensätze für Training und Validierung	83
5.1	Aufstellung der Hyperparameterkombinationen für Modell M1	87
5.2	Darstellung ausgewählter Ergebnisse aus Training, Validierung und Testung unter Nutzung von Modell M1	88
5.3	Aufstellung der Hyperparameterkombinationen für Modell M2	93
5.4	Darstellung ausgewählter Ergebnisse aus Training, Validierung und Testung unter Nutzung von Modell M2	94
5.5	Aufstellung der Hyperparameterkombinationen für Modell M3	100
5.6	Darstellung ausgewählter Ergebnisse aus Training, Validierung und Testung unter Nutzung von Modell M3	101
6.1	Vergleich aller untersuchter Verfahren inkl. des Modells zu synthetischen Datenerzeugung mit Augenmerk auf Anwendbarkeit	106
6.2	Vergleich aller untersuchter Verfahren inkl. des Modells zu synthetischen Datenerzeugung auf Anwendbarkeit in der Praxis unter Hinzunahme der Messdaten	108
A.1	Übersicht über mögliche Berechnungsverfahren für einzelne Komponenten der Energiebilanz	125
B.1	Übersicht über die Motorprüfstände	127
D.1	Veränderung der Synapsengewichte, Schwellenwerte und Filterkoeffizienten beim Training ausgewählter KNN mit interner Dynamik (Modell M2)	152
D.2	Fortsetzung von Tabelle D.1	153

Nomenklatur

Die Nomenklatur in dieser Arbeit entspricht den gebräuchlichen Symbolen und Schreibweisen der Ingenieurwissenschaften. Vektorielle Größen werden zur Unterscheidung gegenüber skalarer Größen in fetter Schriftstärke geschrieben, Matrizen mit fetten Großbuchstaben bezeichnet.

Lateinische Symbole

Symbol	Einheit	Beschreibung
A	m^2	Fläche, Brennraumoberfläche
A	-	Parameter
\mathbf{a}	-	Filterkoeffizienten, Parametervektor
b	-	Bias, Parameter der SVR
\mathbf{b}	-	Filterkoeffizienten, Parametervektor
C	-	Trade-Off-Variable, Konstante
\mathbf{C} , bzw. $c_{j,i}$	-	Koeffizientenmatrix
\mathbf{C}^* , bzw. $c^*_{j,i}$	-	Wertungsmatrix
\mathbf{c}	-	Koeffizienten-, Schwellenwertevektor
d	-	Bezeichner für ein Differential einer Zustandsgröße
E	$J \text{ mol}^{-1}$	Aktivierungsenergie (Arrhenius-Ansatz)
e	var.	Modellfehler, Reglerdifferenz
f	-	Fettfunktion nach Kožuchz
f	Hz	Frequenz
$f()$	var.	Funktion
$f(\cdot)$	-	Modellarchitektur
G	-	Filter
H	J	Enthalpie
H	$kJ \text{ kg}^{-1}$	Heizwert
h	$J \text{ kg}^{-1}$	spezifische Enthalpie
\mathbf{h}	var.	Vektor der Ausgänge der versteckten Neuronen
I	$kg \text{ m}^{-2}$	Trägheitsmoment
i	-	Zählvariable
J	var.	Verlustfunktion
j	-	Zählvariable
K	-	Produkt, Regelkonstante, Reaktionskonstante

Symbol	Einheit	Beschreibung
k	-	Kernfunktion, diskreter Zeitpunkt, Proportionalitätsfaktor, Zählvariable
L	-	Luftbedarf
Lw	-	Zählvariable für Lastwechsel
M	-	Eingangsschicht eines KNN
M	Nm	Moment
m	-	Größe des Eingangsvektors, (Vibe-)Formfaktor
m	kg	Masse
\dot{m}	$kg\ s^{-1}$	Massenstrom
med	var.	Median
N	-	Zwischenschichten eines KNN
n	$1\ s^{-1}$	Motordrehzahl
n	var.	Störgröße bei Modellidentifikation
n	-	Konstante, Anzahl versteckter Neuronen
P	kW	Leistung
P	-	Ausgangsschicht eines KNN
p	bar bzw. Pa	(Partial-)Druck
p	%	Steigung der Propellerflügel
p	-	Größe des Ausgangsvektors
Q	J	Wärmemenge
q^{-1}	-	Zeitverschiebeoperator
R	$J\ mol^{-1}K^{-1}$	universelle Gaskonstante
R	var.	Spannweite (Statistik)
R	-	Korrelationskoeffizient
r	-	Anzahl der Vergangenheitswerte, dynamische Ordnung
r	$^{\circ}\ s^{-1}$	Rotationsgeschwindigkeit des Schiffes
S	-	Anzahl der Datenpunkte
s	var.	empirische Standardabweichung
T	K	Temperatur(-verlauf), mittlere Gastemperatur
t	s	Zeitvariable
U	J	Innere Energie
u	$J\ kg^{-1}$	spezifische Innere Energie
u	$m\ s^{-1}$	Schiffslängsgeschwindigkeit
u	var.	Eingangsgröße, Steuergröße
\mathbf{u}	var.	Eingangsvektor
\mathbf{u}^*	var.	Muster
V	m^3	Volumen

Symbol	Einheit	Beschreibung
v	$m\ s^{-1}$	Schiffsquergeschwindigkeit
\mathbf{v}	-	Vektor der aufsummierten Neuroneneingänge, Eingänge zu IIR-Filter
W	J	Arbeit
\mathbf{W} bzw. $w_{i,j}$	-	Gewichtsmatrix
w	-	(Massen-)Anteil
\mathbf{w}	-	Gewichts- oder Normvektor
X	var.	Variable
x	-	Anteil des Ausgangsstoffes bzw. der Edukte, Gleichgewichtspunkt
\mathbf{x}	-	Vektor der aufsummierten Neuroneneingänge
\mathbf{x}	var.	Abstands-, Datenpunktevektor
\bar{x}	var.	arithmetischer Mittelwert
Y	var.	Funktionsvariable
y	var.	Ausgangsgröße, Funktionswert
\hat{y}	var.	geschätzte Modellausgangsgröße
\hat{y}^*	var.	Prognose
z	var.	Filterausgangswert, Endzustand des Prozesses
\mathbf{z}	-	Zentrenvektor

Griechische Symbole

Symbol	Einheit	Beschreibung
α	$W m^{-2} K^{-1}$	Wärmeübergangskoeffizient
α	-	Lernrate, Lagrange-Multiplikator
α^*	-	Parameter der SVM
γ	var.	Linearkombination
Δ	var.	Abweichung, Differenz
δ	-	Bezeichner für ein Differential einer Prozessgröße
δ	°	Ruderwinkel
ε	-	halbe Breite der Trennebene bei SVM
Θ	°	Einspritzwinkel
ϑ	-	Datenpunkte
θ	-	Eingangs-/ Ausgangsdatenpaare
λ	-	Verbrennungsluftverhältnis, Luftzahl
∇	var.	Gradient
ξ/ξ^*	-	Schlupfvariable bei SVM
π	-	Kreiszahl Pi
ρ	-	relative Dichte
σ	-	Vektor der Standardabweichungen
τ	s	Zeitvariable
$\Phi()$	var.	System beschreibende Funktion
φ	-	Aktivierungsfunktion
φ	°	Kurbelwinkel

Indizes

Symbol	Beschreibung
A	Konstantenbezeichner
akt	aktuell, momentan
aus	Auslass
B	Brennstoff, Konstantenbezeichner
BB	Blowby, „blow by“, Leckage
D	differential (Regleranteil)
ein	Einlass
Ff	„fette Flamme“ nach Kořuch
f	(Ruß-)Bildung
fg	verdampftes Gas
gl	global
I	integral (Regleranteil)
i, j, k, m	allgemeine Zählvariable
L	Luft
M	Motor
max	Maximum
min	Minimum
O_2	Sauerstoff
o	Oxidation
ord	geordnet, kommandiert
P	Propeller, proportional (Regleranteil)
PM	Partikelemissionen, engl. „particulate matter“
R	Reaktion
s	Ruß
$stat$	stationär
T	Konstantenbezeichner
tot	gesamt
$trans$	transient
U	unterer (Heizwert)
W	Wand
x	Summe bis zum aktuellen Zeitpunkt
Z	Konstantenbezeichner
z	Ende eines Prozesses, Zylinder
0	Anfang eines Prozesses

Abkürzungen

Abkürzung	Bedeutung
ABB	Asea Brown Boveri
API	Application Programming Interface (z. Dt. Anwendungsprogrammierschnittstelle)
AR	autoregression (z. Dt. Rückführung)
ARMA	Modellansatz aus der Zeitreihenanalyse
ATL	Abgasturbolader
B&W	Burmeister & Wain
BMWi	Bundesministerium für Wirtschaft und Energie
BP	Backpropagation
CFD	Computational Fluid Dynamics (z. Dt. numerische Strömungssimulation)
C ₂ H ₂	Ethin
C _x H _y	Kohlenwasserstoffe
CO	Kohlenmonoxid
CO ₂	Kohlenstoffdioxid
DF	Defuzzifizierung
EGR	Exhaust Gas Recirculation (z. Dt. Abgasrückführung)
EN	Europäische Norm
EOT	Engine Order Telegraph (z. Dt. Maschinentelegraph)
FID	Flammenionisationsdetektor
FIR	Finite Impulse Response (z. Dt. endliche Impulsantwort)
FTS	Fast-Time Simulation (z. Dt. Schnellzeit-Simulation), i. S. v. mehrfacher Echtzeitfähigkeit
FVV	Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen
HBM	Hottinger Baldwin Messtechnik
HC	Kohlenwasserstoffe
H ₂ O	Wasser
HIA	Hallsensor der Fa. Heinzmann
HSW	Hochschule Wismar
IIR	Infinite Impulse Response (z. Dt. unendliche Impulsantwort)
IMO	International Maritime Organisation (z. Dt. Internationale Seeschiff-fahrtsorganisation)

Abkürzung	Bedeutung
ISO	International Standardization Organization (z. Dt. Internationale Organisation für Standardisierung)
ISSIMS	Institut für Innovative Schiffs-Simulation und Maritime Systeme
K.	Kapitel
KI	Künstliche Intelligenz
KNN	Künstliches Neuronales Netz
LOLIMOT	Local Linear Model Tree (z. Dt. Lokal linearer Modell-Baum)
LRGF	Locally Recurrent Globally Feedforward (z. Dt. lokal rückgekoppelt, global vorwärts gerichtet)
LTT	Lehrstuhl für Technische Thermodynamik
LW	Lastwechsel
M	Modell
MA	Gleitender Mittelwert (engl. „moving average“)
MaK	Maschinenbau Kiel
MAN	Maschinenfabrik Augsburg-Nürnberg AG
MARPOL	International Convention for the Prevention of Marine Pollution from Ships (z. Dt. Internationales Übereinkommen zur Verhütung der Meeresverschmutzung durch Schiffe)
MEmBran	Modellierung von Emissionen und Brennstoffverbrauch beim Manövrieren von Schiffen
MISO	Multiple Input, Single Output (z. Dt. Mehrfacheingang, Einzelausgang)
MLP	Multi-Layer-Perceptron (z. Dt. mehrschichtiges Perzeptron)
M-V	Mecklenburg-Vorpommern
N	nichtlinear, Stickstoff
N/A	nicht verfügbar (engl. „not available“)
N°	Nummer
NF	Neuro-Fuzzy
NSC	Ansatz von Nagle & Strickland-Constable
N ₂	Stickstoff
NO	Stickstoffmonoxid
NO ₂	Stickstoffdioxid
N ₂ O	Distickstoffmonoxid, auch Lachgas genannt
O	Sauerstoffatom
O ₂	Sauerstoff
OE	Output Error (z. Dt. Ausgangsfehler)
OT	Oberer Totpunkt
PAK	polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe
PASS	photoakustischer Rußsensor
PID	Proportional-, Integral- und Differential-Anteile eines Reglers

Abkürzung	Bedeutung
PKW	Personenkraftwagen
PM	Particulate Matter (z. Dt. Partikel)
PSM	Particle Sectional Model (z. Dt. abschnittsweise Partikelmodell)
RAPIT	Rapid Advanced Prediction & Interface Technology (z. Dt. Schnelle erweiterte Vorhersage & Schnittstellen-Technologie)
RBF	Radial-Basisfunktion
RME	Rheinmetall Electronics GmbH
rpm	rotation per minute (z. Dt. Umdrehungen pro Minute)
S	Schwefel
SAMMON	Simulation Augmented Maneuvring Design & Monitoring System (z. Dt. durch Simulation erweitertes Manöverplanungs- & Überwachungssystem)
Sek.	Sekunde
SI	Système international d'unités (z. Dt. Internationales Einheitensystem)
SO _x	Schwefeloxide
Std.	Stunde
SVM	Support-Vektor-Maschinen
SVR	Support-Vektor-Regression
TEOM	Tapered Element Oscillating Microbalance (Messgerät/Verfahren zur Bestimmung von Schwebstaub)
THIESEL	Conference on Thermo- and Fluid Dynamics Processes in Direct Injection Engines (z. Dt. Konferenz über thermo- und fluid-dynamische Prozesse in Motoren mit Direkteinspritzung)
VTG	Variable-Turbinengeometrie-Lader
X	exogenous input (z. Dt. externer Einfluss)
XOR	ausschließliches Oder

1 Einleitung

1.1 Motivation

Die Motivation für die vorliegende Arbeit besteht aus drei Aspekten:

- Was? - *Partikelemissionen* als Gegenstand der Untersuchung
- Wozu? - *Assistenzsoftware* zur praktischen Anwendung der Ergebnisse
- Wie? - *Künstliche Neuronale Netze* als Methode für die Untersuchungen

Untersuchungsgegenstand: Partikelemissionen

Der Begriff Umweltverschmutzung beschreibt die durch den Menschen verursachten Abweichungen von einer intakten Umwelt. Die anthropogenen Einflüsse sind zahlreich, oft nicht vermeidbar und ihre Konsequenzen häufig nur sehr vage abschätzbar. Umweltschutz bezeichnet demnach die Eingrenzung möglicherweise schädlicher, anthropogener Einflüsse auf die Umwelt.

Bekannt ist der Einfluss sogenannter Primär- und Sekundäraerosole auf Gesundheit und Umwelt. Unter primären Aerosolen sind Lösungen zu verstehen, die Partikel enthalten, deren Entstehungsort fest definiert werden kann. Sie werden aufgrund von mechanischen oder thermischen Prozessen in die Umgebungsluft eingebracht, wie bspw. durch Verbrennungsmotoren. Im Gegensatz dazu werden chemische Reaktionen und Anlagerungen an einen bereits vorhandenen Kondensationskern als sekundäre Aerosolpartikel bezeichnet [1].

Partikel können bei Langzeiteinwirkung und erhöhten Konzentrationen gesundheitliche Schäden nach sich ziehen und das Krebsrisiko erhöhen [2]. Was „Langzeitwirkung“ und „erhöhen“ bedeuten, ist relativ zu vielen weiteren Faktoren zu sehen. Außerdem sind konträre Effekte auf das Klima zu beobachten, je nachdem ob sich Partikel in der Troposphäre oder in der Stratosphäre befinden. Während Partikel mit Schwarzfärbung in der Troposphäre das Sonnenlicht absorbieren und die Energie als Wärmestrahlung an ihre Umgebung abgeben, fangen sie in der Stratosphäre einfallendes Sonnenlicht ab, so dass die Strahlung die Troposphäre erst gar nicht erreichen kann. Wie diese beiden Effekte das Weltklima beeinflussen und zu welchem Anteil der Mensch ursächlich für das Vorhandensein der für eine solche Untersuchung relevanten Partikel ist, ist noch nicht geklärt. Eindeutiger sind die direkten Effekte von Partikeln auf die Gesundheit, was Motivation genug ist, sich mit der Reduzierung solcher Emissionen zu beschäftigen.

Landseitig bestehen zum aktuellen Zeitpunkt (Stand Juni 2021) bereits zahlreiche Gesetze und Grenzwerte, um Luftschadstoffe aus Verbrennungsmotoren zu limitieren [3], insbesondere auch Partikelemissionen aus der Binnenschifffahrt [4]. Die Luftverschmutzung durch die Seeschifffahrt wird im Anhang VI des Internationalen Übereinkommens zur Verhütung der Meeresverschmutzung durch Schiffe (MARPOL) der Internationalen Seeschifffahrtsorganisation (IMO) geregelt [5]. Die Regel 14 betrifft die Partikel (PM, engl. „particulate matters“)

sowie die Schwefeloxide (SO_x). Schwefeloxide werden gemäß Ausführungen in Regel 14 durch den Massenanteil an Schwefel im verwendeten Brennstoff begrenzt¹. Partikel finden nur in der Überschrift der Regel 14 explizit Erwähnung. Der Zusammenhang zwischen Schwefelgehalt im Brennstoff und Partikelbildung steht außer Frage, doch auch schwefelfreier Dieseldieselkraftstoff führt bei unterstöchiometrischer Verbrennung zur Bildung von Partikeln im Abgas. Außerdem wird beim Verbrennungsvorgang immer eine geringe Menge an Schmieröl und dessen Additiven mit verbrannt, was ebenfalls zur Partikelbildung beiträgt [7]. Laut Umweltbundesamt [8] „[...] mangelt es auch an der Umsetzung von Maßnahmen in der Praxis. Die IMO verhandelt seit mehreren Jahren über die Einführung von „Black Carbon“-Minderungsmaßnahmen, um die negative Klimawirkung durch Rußemissionen in der Arktis zu senken. Noch sind jedoch weder Grenzwerte noch Minderungsmaßnahmen verabschiedet.“

Besonders stark ist die Partikelbildung während des instationären Motorbetriebs bei Lasterhöhung. Abb. 1.1 zeigt exemplarisch den deutlichen Ruß- und Partikelausstoß bei Lastwechseln an einem Schiffsdieselmotor. Dieses transiente, d.h. vorübergehende, Verhalten führt zu einer unterstöchiometrischen Verbrennung.



Abbildung 1.1: Beobachteter Partikelausstoß am Prüfstandmotor 6L23/30 infolge von (v.l.n.r.) Kaltstart, Lasterhöhung im Generatorbetrieb, Lasterhöhung im Propellerbetrieb und Stationärbetrieb.

Es existieren zahlreiche Maßnahmen und technische Lösungen, um den genannten Problemen (Partikelbildung und Partikelemission) zu begegnen, begonnen mit Abgasnachbehandlungsanlagen, innermotorischen Maßnahmen bis hin zum Einsatz alternativer Antriebssysteme. Sie alle haben ihre Berechtigung und Wirkung. Die Seefahrtbranche ist aber bekannt für langsame Anpassung und Veränderung, insbesondere aufgrund einer verhältnismäßig langen Lebens- und Betriebsdauer von 15 bis 30 Jahren je nach Schiffstyp und Lage der Weltwirtschaft [9][10]. Nachrüstungen von modernen Technologien sind oft technisch oder finanziell nicht realisierbar, so dass auf zahlreichen Schiffen auch noch in zwei oder mehr Jahrzehnten der Dieselmotor für den Antrieb und die Stromerzeugung als Hauptkomponente zu finden sein wird. Für diese Schiffe besteht aber trotzdem die Möglichkeit einer adäquaten Betriebsweise. Hierfür ist es wichtig, dass die Schiffsführung die Folgen ihres Handelns kennt und abschätzen kann, welche Manöverabläufe zu größeren bzw. weniger großen Partikelausstößen führen. Es ist daher wünschenswert und sinnvoll, wenn neben der persönlichen Erfahrung auch im Schiffsführungsprozess integrierte Assistenzsysteme für diese Abschätzung zum Einsatz kommen.

¹ MARPOL Anhang VI lässt auch die Option einer Abgasnachbehandlung (Scrubber) zu [6]

Praktische Anwendung: Assistenzsoftware

Naheliegender ist es, die Emissionsvorhersage in eine bereits existierende und bewährte Assistenz- und Monitoringsoftware für Schiffsmanöver zu integrieren. Der Name einer solchen Software lautet SAMMON, was für Simulation Augmented Manoeuvring Design & Monitoring System steht [11]. SAMMON wurde an der Hochschule Wismar (HSW) am Institut für Innovative Schiffs-Simulation und Maritime Systeme (ISSIMS) in Zusammenarbeit mit der ISSIMS GmbH entwickelt [12][13][14][15][16][17][18]. Teile dieser Software werden bereits erfolgreich in der Lehre und Weiterbildung eingesetzt. Es existieren bereits Vorhersagen zum Bewegungsverhalten der jeweiligen Schiffe, ihrer prädictierten Bahn und dem benötigten Platzbedarf, zu Geschwindigkeiten sowie zum Brennstoffverbrauch. Für die Anwendung an Bord befindet sich die Software derzeit in der Testphase. Das verwendete mathematische Schiffsmodell stellt Bewegungen mit drei bzw. sechs Freiheitsgraden dar: Längs- und Quergeschwindigkeiten, sowie Rotation um die vertikale Achse. Durch eine Modellerweiterung können auch Stampf-, Roll- und Hiebbewegungen simuliert werden. Das hydrodynamische Verhalten des Schiffes wird anhand nichtlinearer Differentialgleichungen abgebildet. Es besteht die Möglichkeit der Parametrierung zahlreicher Schiffstypen. SAMMON kann zur Vorausplanung von Manöverabläufen, zur Online-Überwachung oder zur Nachbesprechung abgeschlossener Manöver eingesetzt werden. Abb. 1.2 zeigt die Online-Vorhersage eines in einen Hafen einlaufenden Fährschiffes. Obwohl sich das Schiff noch in Geradeausfahrt befindet, berechnet die Software sofort die Auswirkungen einer Ruderkommandoänderung auf das Bewegungsverhalten des Schiffes für die kommenden Minuten und stellt die vorhergesagte Bahn graphisch dar.

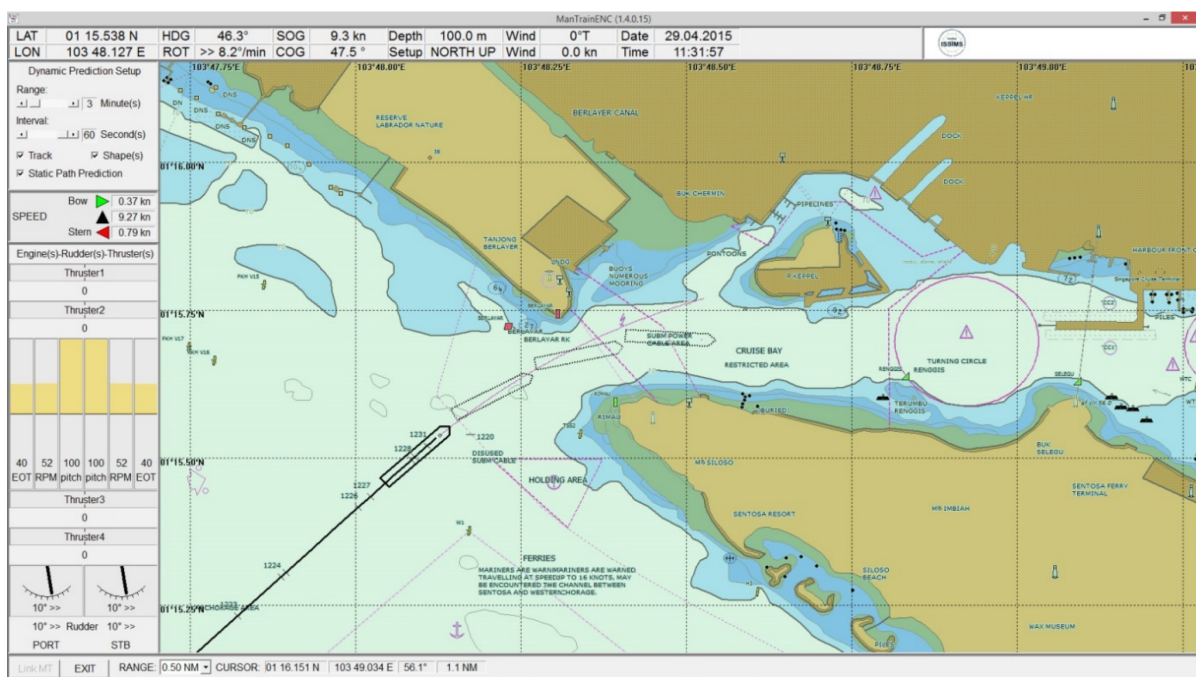


Abbildung 1.2: Manöverassistenz-Software SAMMON zur Vorhersage und zum Monitoring der Schiffsbewegungen in beschränkten Gewässern [7]

Den Kern der Software bildet eine Technologie namens Rapid Advanced Prediction & Interface Technology (RAPIT). RAPIT ist eine Art Fast-Time Simulation (FTS), d.h. eine Simula-

tion mit mehrfacher Echtzeitfähigkeit, die es ermöglicht, bis zu 24 Minuten des vorausgehenden Simulationsprozesses in nur einer Sekunde Echtzeit zu berechnen und die Ergebnisse in einer anwenderorientierten Schnittstelle anzuzeigen. Jedes weitere Untermodell, welches SAMMON durch zusätzliche Vorhersagen erweitert, sollte diesen Anforderungen entsprechen, so auch ein Modell zur Vorhersage von Partikelemissionen.

Zur Berechnung des Brennstoffverbrauchs wurde in Vorbereitung auf die vorliegende Arbeit ein PID-Regler-Algorithmus in die Software implementiert, der die in einem Zeitschritt eingespritzte Brennstoffmenge bestimmt [19].

Die vorliegende Arbeit soll u. a. untersuchen, inwiefern Vorhersagen von Partikelemissionen in dieses Assistenzsystem integriert werden können. Die Bedingungen, die dafür erfüllt sein müssen, betreffen die vorgegebene Rechenzeit, die praktische Umsetzbarkeit, sowie Zuverlässigkeit, Robustheit und Güte der Vorhersage. Die Einschränkung bzgl. Rechenzeit hat bereits in einem frühen Stadium der Arbeit dazu geführt, experimentelle, datenbasierte Modellbildung in den Fokus zu rücken, allen voran die Künstlichen Neuronale Netze (KNN).

Methode: Künstliche Neuronale Netze

Es existieren zahlreiche Studien zur phänomenologischen Nachbildung von (Ruß-)Partikeln. Die dort beschriebenen Modelle sind oft sehr umfangreich und zeitlich hoch aufgelöst, weil sie Prozesswissen berücksichtigen und dieses in die Berechnungsalgorithmen integrieren. Diese Vorteile wirken sich nachteilig auf die benötigte Rechenzeit aus, so dass eine mehrfache Echtzeitfähigkeit mit der derzeit üblichen Rechentechnik (Stand 2021) nicht erreicht werden kann (vgl. 2.1).

Neu für die Modellierung von Partikelemissionen aufgrund von Schiffsmanövern ist die Anwendung eines datenbasierten Ansatzes unter Verwendung Künstlicher Neuronaler Netze (KNN). Motivation für die Wahl eines solchen experimentellen Modellansatzes auf Basis von Künstlicher Intelligenz (KI) ist einerseits dessen erfahrungsgemäß gute Anwendbarkeit auf nichtlineare, dynamische Prozesse und andererseits die Möglichkeit, multidimensionale Eingangsräume relativ einfach erfassen und auf eine Ausgangsvariable abbilden zu können (vgl. 2.2).

Ursprünglich war es die Suche nach einem Algorithmus mit den soeben genannten Eigenschaften gewesen, welcher die Mathematik der KNN in den Fokus der Lösungsfindung gerückt hatte. Erst im Nachhinein erfolgte die Erkenntnis, dass es sich dabei um ein Teilgebiet der KI handelte. Historisch gesehen können KI und KNN auch als getrennte Forschungsgebiete betrachtet werden, die sich im Laufe der letzten drei Jahrzehnte immer mehr überlappten. Beide Forschungsgebiete haben sich der Erkenntnisse des jeweils anderen bedient. Heutzutage bilden KNN eine etablierte Methode der KI. Alternative Verfahren wie die Support-Vektor-Maschine [20] oder die Wahrscheinlichkeitslogik zum Schließen mit unsicherem Wissen durch Bayes-Netze [21] werden ebenfalls eingesetzt.

Die KNN werden in der vorliegenden Arbeit im Sinne der schwachen KI verwendet und sollen der Mustererkennung dienen: Vorgegebenen Eingangsdaten in Form von zeitlichen Verläufen (entspr. Muster) soll ein Ausgabewert (hier: Partikelmassenstrom) zugeordnet werden. Die Methode „Künstliches Neuronales Netz“ offeriert eine beachtliche Auswahl an Modellarchitekturen, wovon zwei Ausprägungen in dieser Arbeit näher beleuchtet werden.

Eine mathematische Methode dieser nur schwer zu definierenden KI auf ein Wissenschaftsgebiet anzuwenden, welches bisher noch nicht so stark mit KI-Methoden in Kontakt gekommen ist [22], war und ist eine zusätzliche Motivation zur Bearbeitung der im folgenden Abschnitt formulierten Problemstellung.

1.2 Problemstellung

Für eine genau Abgrenzung und Herausarbeitung der dieser Arbeit zugrundeliegenden Problemstellung muss zunächst die Schwierigkeit bei der Behandlung von Emissionen begrifflich und phänomenologisch beleuchtet werden.

Schiffsdieselmotoren können mit qualitativ sehr unterschiedlichen Brennstoffen betrieben werden. Der Brennstoff wird u. a. nach den Kohlenstoff- und Wasserstoff-Anteilen unterschieden. Idealisiert handelt es sich um einen Kohlenwasserstoff mit der molekularen Summenformel C_xH_y . Enthalten ist außerdem Sauerstoff (O), sowie je nach Brennstoffart auch Schwefel (S) und Stickstoff (N). Würde der Brennstoff vollständig verbrennen, befänden sich im Abgas Kohlendioxid (CO_2), überschüssiger Sauerstoff (O_2), Stickstoff (N_2) und Wasserdampf (H_2O), allenfalls auch Schwefeloxide (SO_x) und Stickoxide (NO , N_2O und weitere NO -Verbindungen). Aufgrund von unvollständiger Verbrennung treten auch Kohlenmonoxid (CO), unverbrannte Kohlenwasserstoffe (HC) und Partikel (PM) auf [23]. Während sich die CO_2 -Emissionen relativ gut über den Kohlenstoffanteil im Brennstoff und über dessen Verbrauch bestimmen lässt, bestehen für andere Abgasbestandteile weitaus komplexere Abhängigkeiten. Besonders komplex verhält es sich bei den Partikelemissionen. Allein die chemische Zusammensetzung und die molekulare Struktur der Partikel lässt sich nicht einheitlich oder eindeutig beschreiben. Eine direkte Herleitung über die Reaktionskinetik stellt sich als problematisch dar. Vielmehr handelt es sich bei Partikeln um kleine, diskrete Teilchen mit unterschiedlichstem atomaren Aufbau in festem oder flüssigem Aggregatzustand. Nach EN ISO 8178 werden als Partikel jene Bestandteile des Abgases bezeichnet, die nach Verdünnen und Auskühlen des Abgases auf unter $52^\circ C$ (so dass die löslichen organischen Moleküle nicht verdampfen) durch einen bestimmten Filter erfasst werden können [24][25].

Partikel im Abgas von Verbrennungsmotoren können in organische und anorganische Partikel unterteilt werden. Ruß zählt zu den organischen Partikeln während bspw. Sulfate zu den anorganischen Partikeln gezählt werden [26]. In [27] werden die Abgaspartikel in „unlösliche nicht flüchtige“ und „lösliche flüchtige“ Partikel unterteilt. Zu Ersteren gehören einerseits die kohlenwasserstoffhaltigen Partikel, die sich wiederum in

- Rußpartikel,
- partialverbrannte Moleküle des Motoröls,
- Brennstoffpartikel

unterteilen lassen. Des Weiteren zählen auch metallische und andere anorganische Partikel zu den unlöslichen nicht flüchtigen Partikeln, wie

- Metallteilchen und
- Staub.

Die löslichen flüchtigen Partikel können wie folgt unterteilt werden:

- schwefeldioxidhaltige Verbindungen
- nitrithaltige Verbindungen
- organische Verbindungen

Rußpartikel haben nicht nur in der medialen Diskussion den größten Anteil, sondern bilden auch den größten Anteil aller im Abgas von Schiffsdieselmotoren vorhandenen Partikel [28].

Schon alleine die Beschreibung ihrer Entstehung gestaltet sich sehr komplex, weil bspw. auch Metallteilchen in Rußpartikeln vorkommen oder löslich flüchtige Partikel mit ihnen reagieren können. Somit ist eine eindeutige, einfach nachvollziehbare Kategorisierung vom Entstehungsort von Partikeln bis hin zur Abgasmesssonde nicht möglich. Vorgänger von sichtbaren Rußpartikeln können kleiner als 10 nm sein und am Ende einen Durchmesser von mehr als 1 µm aufweisen. Die Rußpartikelbildung beginnt nach der Zündung des Brennstoff-Sauerstoff-Gemischs an Stellen des Brennraums, an denen unter Abwesenheit von Sauerstoff eine pyrolytische Zersetzung stattfindet. Während dieser Phase werden Verbindungen in den Molekülen des ursprünglichen Brennstoffs gespalten, wobei verschiedene Kohlenwasserstoffverbindungen wie bspw. Ethin (C_2H_2) entstehen. Unter Anwesenheit von Sauerstoff und ausreichend hohen Temperaturen können unverbrannte Kohlenwasserstoffe zu Kohlenmonoxid, Kohlendioxid und Wasser(-dampf) oxidieren. In sauerstoffarmen Gebieten des Brennraums bilden sich während der Pyrolyse allerdings auch bereits planare Vorläufer von Rußpartikeln wie z.B. polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe, auch bekannt als PAK. Aufgrund von Interaktionen und Zusammenlagerungen kann sich ein dreidimensionaler Partikelkeim bilden. Dieser Vorgang wird auch Nukleation genannt.

Ab der Partikelkeimbildung kann von den in Abschnitt 1.1 genannten Primäraerosolen gesprochen werden. Der Partikelkeim mit einer Größe von einigen wenigen Nanometern dient als Grundlage für weiteres Oberflächenwachstum aufgrund von Reaktionen oder Kondensation. Des Weiteren führt auch Koagulation, das Verschmelzen kollidierender Primärteilchen, zu einer Vergrößerung. Der letzte Schritt, der insbesondere für die Entstehung von sichtbarem Ruß ausschlaggebend ist, ist die Agglomeration, was ein Zusammenschluss der zuvor genannten Teilchen bedeutet. Rußpartikel können auch nachoxidieren, so dass eine theoretische Simulation nicht nur den Bildungs-, sondern auch den Oxidationsprozess berücksichtigen muss [28][29][30].

Dieser kurze Einblick in die Besonderheit, Abgaspartikel in ihrer Entstehung unter Berücksichtigung der teilweise Oxidation mathematisch zu beschreiben, kann zu drei möglichen Formulierungen der Problemstellung führen, von denen eine ausgewählt werden soll:

- 1) Auf der Grundlage detaillierter Untersuchung der thermodynamischen und chemischen Prozesse, die an der Partikelentstehung beteiligt sind, kann ein allgemeingültiges, theoretisches Modell erstellt werden.
- 2) Mit dem Fokus auf Rußpartikel als größter Anteil an der Gesamtpartikelmasse kann deren Entstehungs- und Oxidationspfad im Detail untersucht und ein theoretisches Modell erstellt werden.
- 3) Basierend auf Messdaten kann ein mathematischer Zusammenhang zwischen bekannten Eingangsgrößen und den resultierenden Partikelmessungen gesucht und auf einem empirischen Weg ein datenbasiertes Modell erstellt werden.

Weshalb in der vorliegenden Arbeit die dritte Möglichkeit der Problemstellung im Fokus steht, wird in Kapitel 2, insbesondere in Abschnitt 2.3, dargelegt.

Kurz zusammengefasst: Die Problemstellung beruht auf der Besonderheit, dass Partikel nicht als eine Menge homogener, gleichartiger Moleküle beschrieben werden können, die durch Oxidation oder Reduktion während der Verbrennung entstehen. Vielmehr fasst der Begriff Partikel verschiedenste Teilchen mit flüssigem oder festem Aggregatzustand, die löslich flüchtig

oder aber auch unlöslich und nicht flüchtig, die organischer oder anorganischer Natur sein können und einen Durchmesser vom Nano- bis zum Mikrometerbereich aufweisen, zusammen.

Der Begriff „Partikel“, sofern nicht mit dem Bestimmungswort „Ruß“ spezifiziert, umfasst im Folgenden alle festen Bestandteile des Abgasmassenstroms eines Dieselmotors, die durch die in Unterabschnitt 3.2.2 beschriebene Messtechnik erfasst werden können.

1.3 Zielstellung und Aufbau der Arbeit

Das übergeordnete Ziel dieser Arbeit ist, einen Beitrag zu einer softwaretechnischen Assistenz für effizientes Manövrieren von Schiffen zu leisten, um auf Betriebsebene eine Minderung schädlicher Abgase herbeizuführen. Voraussetzung dafür ist eine mehrfache Echtzeitfähigkeit des zu entwickelnden Modells, sowie dessen Eignung, auf für das Modell unbekannte Eingabewerte durch Inter- und Extrapolation plausible Ausgabewerte zu prädictieren. Untergeordnetes Ziel ist deshalb die Untersuchung und der Vergleich mehrerer erwägenswerter Modellansätze unter Nutzung von KNN, weil diese einerseits multidimensionale Eingangsräume relativ einfach zu erfassen und auf eine Ausgangsvariable abzubilden vermögen und außerdem nichtlineare, dynamische Prozesse nachbilden können.

Um diese Ziele zu erreichen, wird im nachfolgenden Kapitel 2 anhand ausgewählter phänomenologischer Modelle zuerst ein grundlegendes Verständnis für den Prozess der Partikelbildung geschaffen (2.1). Als Gegenüberstellung zu diesen theoretischen Modellansätzen werden in Abschnitt 2.2 experimentelle, datenbasierte Modellansätze vorgestellt, die für dieselmotorische Fragestellungen zumindest für den stationären Motorbetrieb bereits erfolgreich zur Anwendung gekommen sind. Die Modellwahl und die Vorteile von KNN werden in Abschnitt 2.3 argumentiert, woraufhin Abschnitt 2.4 die theoretischen Grundlagen zu den beiden KNN liefert, die später mit den Bezeichnern M1 und M2 bezeichnet werden.

Sich auf die datenbasierte Modellierung beziehend, beschäftigt sich Kapitel 3 mit den gegebenen Rahmenbedingungen und den daraus folgenden Fragestellungen: Welche Modelleingangsgrößen sind von Interesse und welche sind verfügbar (3.1)? Welche Qualität und welchen Umfang haben die Prüfstandaufzeichnungen (3.2) und wie begründet sich damit die Wahl des gesamten Partikelmassenstroms als Modellausgangsgröße? Wie werden die Messdaten aufbereitet (3.3) und welchen Bewertungskriterien sollte ein Modell Genüge tun, um dem übergeordneten Ziel nachzukommen (3.4)? Abschließend wird resümiert, dass die verfügbaren Messdaten qualitativ und quantitativ nicht den Ansprüchen entsprechen, um den angestrebten Modellvergleich durchführen zu können.

Folglich wird in Kapitel 4 die Möglichkeit der synthetischen Datenerzeugung in Betracht gezogen und umgesetzt. Ein neuartiges, halbempirisches Emissionsmodell zur Vorhersage von PM wird entwickelt, welches mit dem Bezeichner M0 versehen wird. Mit Modell M0 wird allein das Ziel verfolgt, die Verläufe des gemessenen Partikelmassenstroms qualitativ möglichst realitätsnah nachzusimulieren, sowie auch nicht gemessene Verläufe der Erfahrung nach plausibel abzubilden. Modell M0 soll als neutrale Datenbasis für die eigentlichen Untersuchungen dienen.

Zur Anwendung kommt diese synthetisch generierte Datenbasis in Kapitel 5, in welchem die beiden aus der Literatur bekannten Modellansätze M1 und M2 sowie ein eigens konzipierter Ansatz M3 praktisch umgesetzt und einzeln erörtert werden. Abb. 1.3 veranschaulicht den Aufbau der Arbeit mit Augenmerk auf die Verwendung der Daten und die Einordnung der zu untersuchenden Modellansätze.

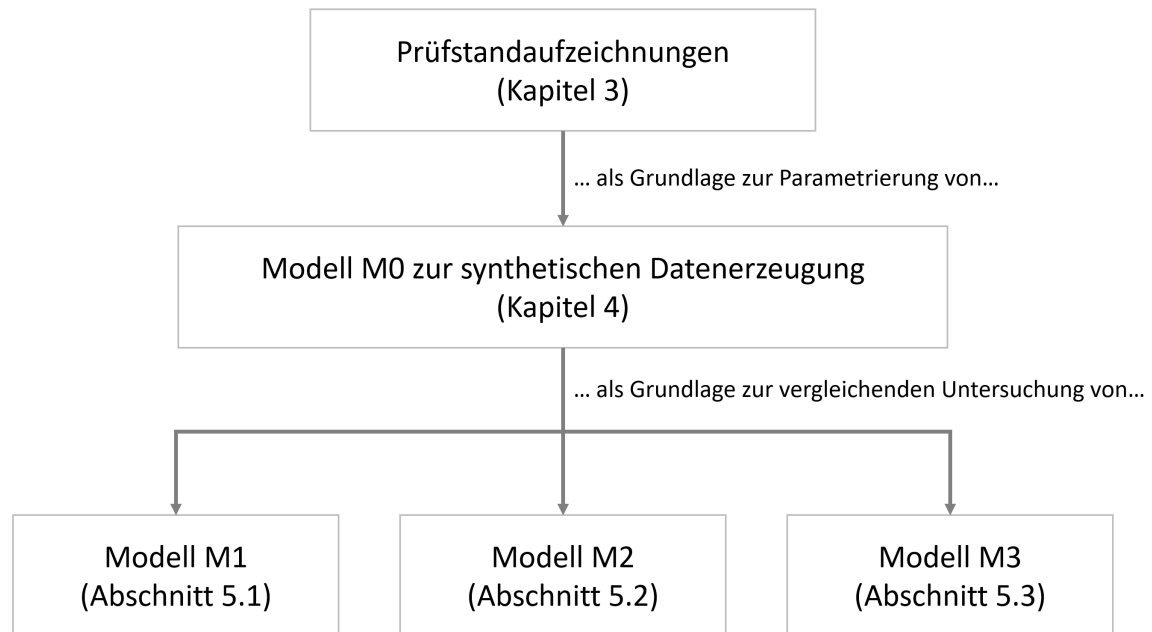


Abbildung 1.3: Überblick über den Aufbau der Arbeit mit Augenmerk auf die Verwendung der Daten und die Einordnung der zu untersuchenden Modellansätze.

Die einzelnen Ergebnisse und Erkenntnisse werden in Kapitel 6 miteinander verglichen und diskutiert. Berücksichtigung findet in dieser vergleichenden Diskussion auch das halbempirische Modell M0. Die Vergleiche und Bewertungen zwischen den Modellansätzen sind relativer Natur. Hinsichtlich des angestrebten Beitrags zur Vorhersage von Partikelemissionen an Bord von Seeschiffen sollte allerdings ein absoluter Maßstab angesetzt werden, wobei festgelegt wurde, dass die identifizierten Bewertungskriterien mit unter 50% Abweichung auf dem Testdatensatz zu erreichen sind.

Zusammenfassung und Ausblicke finden sich in Kapitel 7.

2 Stand der Technik als Diskussionsgrundlage für die Modellwahl

Ein mögliches Kriterium zur Kategorisierung von Modellansätzen ist die Unterscheidung von theoretischen und datenbasierten Modellen. Während sich Erstere bei der Modellherleitung auf Prozesswissen beziehen und häufig auch als „White-Box-Modelle“ bezeichnet werden [31][32][33], kommen Letztere auch ohne Wissen um die internen Abläufe des abzubildenden Prozesses aus. Anhand eines solchen Modells Rückschlüsse auf den tatsächlichen Prozess zu ziehen, schließen diese rein datenbasierten „Black-Box-Modelle“ aus. Sogenannte halbempirische Modelle, die weder rein empirisch sind noch eine durchgängige Nachvollziehbarkeit des simulierten Prozesses zulassen, tragen folglich den Namen „Grey-Box-Modelle“.

Sowohl die Komplexität der dieselmotorischen Verbrennung und der Partikelentstehung als auch die Rechenkapazität eines um das Jahr 2020 üblichen Arbeitsplatzrechners lassen vermuten, dass eine theoretische Simulation im Sinne eines White-Box-Modellansatzes das gesetzte Ziel Vorhersage mit vielfacher Echtzeitfähigkeit nicht erreichen wird. Nichtsdestotrotz wird im ersten Abschnitt dieses Kapitels auf die theoretische Modellbildung eingegangen, um einerseits die Komplexität und andererseits die Fortschritte der letzten Jahre bis zum aktuellen Stand der Forschung aufzuzeigen. Abschnitt 2.2 beschäftigt sich eingehend mit der datenbasierten, experimentellen Black-Box-Modellierung für stationäre nichtlineare Prozesse, um auf dieser Basis die Möglichkeiten der Ausweitung auf dynamische Prozesse zu beleuchten. Abschnitte 2.3 und 2.4 begründen die Wahl zweier KNN als erwägenswerte Modellansätze und erläutern deren Modellarchitektur.

2.1 Literaturüberblick: Theoretische Modellbildung

Die theoretische Modellbildung bezeichnet die Modellierung von Systemen anhand deren physikalischen, mechanischen, chemischen oder anderer beobachtbaren Prozesse. Ist die Zielsetzung der Forschung, ein grundsätzliches Verständnis über die Einflüsse auf die Partikel- bzw. Rußentstehung zu erlangen, dann ist der Weg der theoretischen, phänomenologischen Modellbildung aussagekräftiger und zu bevorzugen. Die theoretische Modellbildung muss auch bevorzugt werden, wenn eine erfolgreiche Testung der Ergebnisse in Aussicht steht und wenn die voraussichtlich zu erwartende Rechenzeit den Vorgaben entspricht oder irrelevant ist.

Die meisten in der Literatur zu findenden Quellen zur theoretischen, physikalischen Modellbildung zur Entstehung von Partikeln begrenzen sich auf die Entstehung und die Oxidation von Ruß. Ruß ist der wesentliche Bestandteil der im Abgas vorhandenen Gesamtpartikelmasse. Liegen lediglich Partikelmessungen ohne Information zum tatsächlichen Rußgehalt vor, kann ein Rußmodell nur näherungsweise anhand der Messdaten parametrisiert werden. Die im Folgenden ab 2.1.2 kurz vorgestellten theoretischen Modelle sind alle quasi-dimensional, was bedeutet, dass der Brennraum nicht als ideal durchmischt betrachtet wird [34]. Es existieren physikalische und chemische Teilmodelle. Diese bilden jedoch weder ein turbulentes Strömungs- noch ein turbulentes Temperaturfeld ab, so dass gewöhnliche Differentialgleichungen mit lediglich zeitlicher

Abhängigkeit als ausreichend angenommen werden. Die Rußentstehung wird in Abhängigkeit von chemischen Phänomenen wie bspw. der Gemischbildung und Reaktionskinetik beschrieben, was die Bezeichnung „phänomenologische Modelle“ begründet. Um die mittlere Gastemperatur oder gar unterschiedliche Temperaturzonen innerhalb des Brennraums bestimmen zu können, sind Modellberechnungen oder Messungen mit unterschiedlichem Detaillierungsgrad vom Motorinnenprozess bzw. vom Gesamtprozess des Motors nötig. Folgender Unterabschnitt geht umrisshaft auf den Motorprozess und dessen mögliche Modellierung ein, bevor einige ausgewählte Ansätze zur theoretischen Nachbildung von (Ruß-)Partikeln betrachtet werden.

2.1.1 Motorprozessrechnung

Die Hauptantriebsquelle in der Berufsschiffahrt ist heutzutage immer noch der Dieselmotor mit Direkteinspritzung [35]. Der Dieselmotor ist durch die innere Gemischbildung, Selbstzündung und ein näherungsweise Gleichdruckverfahren gekennzeichnet. Der Brennstoff besteht aus höher-siedenden Kohlenwasserstoffen. Ein Regler regelt über die zugeführte Menge an Brennstoff die Motordrehzahl. Für die Selbstzündung wird ein großer Luftüberschuss vorausgesetzt. Verdichtungsverhältnisse liegen derzeit zwischen 14 und 22 [23]. Das Beispiel des Versuchsmotors MAN 6L23/30 (vgl. Tabelle B.1) zeigt, dass auch kleinere Verdichtungsverhältnisse möglich sind. Die einzelnen Komponenten des Gesamtmotorprozesses sind in Abb.2.1 dargestellt.

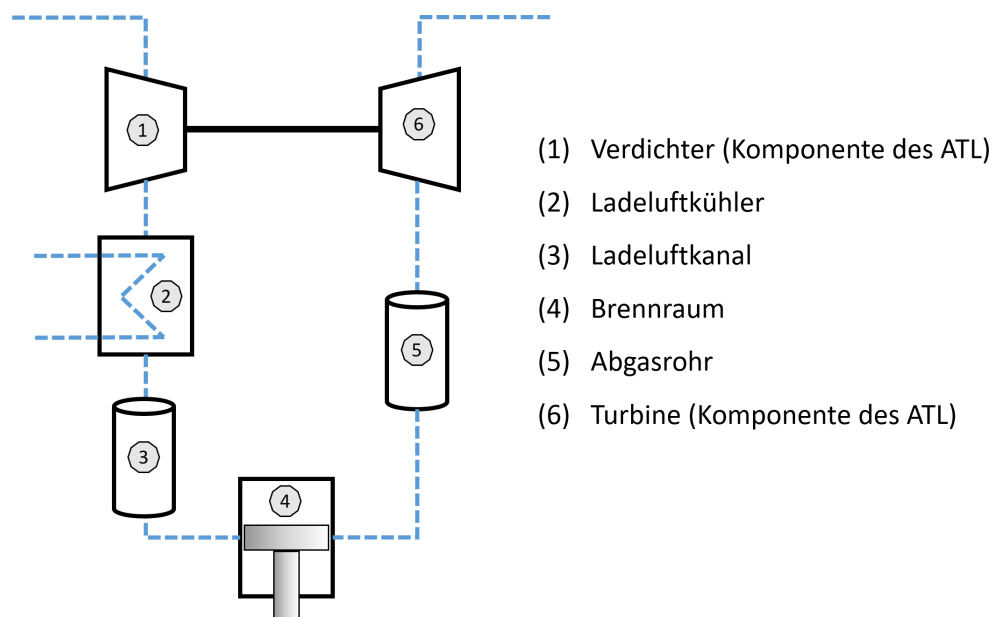


Abbildung 2.1: Überblick über die Hauptkomponenten des Gesamtmotorprozesses

Die Motorprozessrechnung kann, wie oben bereits angedeutet, auf verschiedenen Ebenen durchgeführt werden. 0-dimensionale, thermodynamische Modelle finden häufig zur vereinfachten Erläuterung und Nachbildung der Energieumsetzung beim Verbrennungsprozess Anwendung¹. Wenn die Berechnung von Schadstoffemissionen in den Fokus der Untersuchungen

¹ Als 0-dimensional wird ein ideal gerührter Behälter [24] mit nur zeitabhängigen Zustandsgrößen und ohne örtliche Auflösung bezeichnet.

rückt, werden quasi-dimensionale, phänomenologische oder multi-dimensionale CFD-Ansätze (engl. „computational fluid dynamics“) nötig [33]. Die Erfahrungen aus dem Projekt MEmBran (vgl. 2.1.6) lassen für die Verfasserin den Schluss zu, dass phänomenologische Modelle aufgrund der geringeren Rechenzeiterfordernisse für die zu behandelnde Anwendung als ausreichend erachtet werden müssen. Dabei lassen diverse Teilmodelle für einzelne Terme der Energiebilanz (vgl. Gleichung (2.1) und Tabelle A) und die Verwendung verschiedener partieller Differentialgleichungen unterschiedlich genaue Ergebnisse erwarten.

$$\frac{dU}{d\varphi} = \frac{\delta W}{d\varphi} + \frac{\delta Q_W}{d\varphi} + \frac{dH_R}{d\varphi} + \frac{dH_{\text{ein}}}{d\varphi} + \frac{dH_{\text{aus}}}{d\varphi} + \frac{dH_{\text{BB}}}{d\varphi} \quad (2.1)$$

mit

$$\frac{dU}{d\varphi} = \frac{d(m_Z \cdot u)}{d\varphi}$$

Veränderung der inneren Energie als extensive Zustandsgröße in Abhängigkeit von der Masse des Gas-Brennstoff-Gemischs im Zylinder und deren spezifischen inneren Energie

$$\frac{\delta W}{d\varphi} = -p \frac{dV}{d\varphi}$$

Volumenänderungsarbeit

$$\frac{\delta Q_W}{d\varphi} = \frac{\alpha \cdot A \cdot (T_W - T)}{2\pi f}$$

Wandwärmestrom in Abhängigkeit vom Wärmeübergangskoeffizienten α , der Brennraumoberfläche A , der Temperaturdifferenz zwischen Wand und Brennraum sowie der Motordrehzahl.

$$\frac{dH_R}{d\varphi} = \frac{d(m_B \cdot H_U)}{d\varphi}$$

die durch den Brennstoff zugeführte Reaktionsenthalpie in Abhängigkeit der umgesetzten Brennstoffmasse und von H_U als unteren Heizwert

$$\frac{dH_{\text{ein}}}{d\varphi} = \frac{d(m_{\text{in}} \cdot h_{\text{in}})}{d\varphi}$$

durch das Einlassventil mit dem Massenstrom transportierte Enthalpie

$$\frac{dH_{\text{aus}}}{d\varphi} = \frac{d(m_{\text{aus}} \cdot h_{\text{aus}})}{d\varphi}$$

durch das Auslassventil mit dem Massenstrom transportierte Enthalpie

$$\frac{dH_{\text{BB}}}{d\varphi} = \frac{d(m_{\text{BB}} \cdot h_{\text{BB}})}{d\varphi}$$

Enthalpieverluste durch Kolbenringe (engl. „blow by“)

Das Modell vom Brennraum, d.h. die Motorinnenprozessrechnung, ist von grundlegender Bedeutung für die Emissionsentstehung. Bei der Motorinnenprozessrechnung wird mithilfe dieses Einzonenmodells u. a. die mittlere Temperatur im Brennraum ermittelt, die eine wesentliche Grundlage für weitere phänomenologische Teilmodelle bildet, wie beispielsweise das Zweizonenmodell nach Heider [28]. Hierbei werden u. a. anhand der mittleren Temperatur eine Reaktionszone und eine unverbrannte Zone identifiziert. Der Berechnung des mittleren Tem-

peraturverlaufs liegt eine Energiebilanz zugrunde, welche die Veränderung der inneren Energie dU bzw. $d(m_Z \cdot u)$ impliziert (vgl. Gleichung (2.1)). Als innere Energie wird der Energieinhalt eines thermodynamischen Systems bezeichnet, der bei einem geschlossenen System durch Zu- oder Abfuhr der Prozessgrößen Arbeit oder Wärme vergrößert, bzw. vermindert wird. Durch die im eingespritzten Brennstoff gebundene chemische Energie, findet während der Verbrennung eine Freisetzung von Reaktionsenthalpie statt. Bei einem offenen System, wie es unter Berücksichtigung des Ladungswechsels der Fall ist, spielen außerdem die Stoffströme eine wesentliche Rolle [36]. Da es sich beim innermotorischen Prozess um einen kontinuierlich instationären Verlauf handelt, unterliegt die innere Energie U ständigen Veränderungen. Gleichung (2.1) stellt eine kurbelwinkelabhängige Veränderung der extensiven Zustandsgröße U dar. Je nach Anwendungsfall ist auch eine zeitabhängige Veränderung zweckdienlich.

Durch Umstellen der Energiebilanz und unter Einbezug geeigneter Untermodelle zur Berechnung einiger oben genannter Ausdrücke (vgl. Tabelle A.1) ergibt sich eine Differentialgleichung, mit der sich die Änderung der mittleren Brennraumtemperatur im Zylinder berechnen lässt.

Neben dem Verlauf der mittleren Brennraumtemperatur spielt das Verbrennungsluftverhältnis λ eine wesentliche Rolle bei der Entstehung von Partikeln. Das Verbrennungsluftverhältnis beschreibt das Massenverhältnis von der tatsächlich zur Verfügung stehenden Luft (m_L) zur stöchiometrisch gesehen notwendigen Luftmasse, um theoretisch eine vollständige Verbrennung erreichen zu können. Diese dimensionslose Kennzahl ist der Indikator dafür, ob die Verbrennung über- oder unterstöchiometrisch abläuft. Für den Dieselmotor im stationären Betrieb ist ein $\lambda_{\text{stat.}}$ von 1,2 bzw. im Leerlauf von bis zu 7 als normal anzusehen [23].

Beim Lastwechsel kommt die Trägheit des Gesamtmotorprozesses zum Tragen, was einen direkten Einfluss auf das Verbrennungsluftverhältnis hat: Wird mehr Brennstoff eingespritzt, nimmt λ ab. Es wird mehr Energie freigesetzt, die den Abgasturbolader (ATL) turbinenseitig über den Abgasmassenstrom durch das Abgasrohr erreicht. Wenn der ATL seine Drehzahl erhöht, nimmt verdichterseitig die Ladeluftzufuhr zu. Die Ladeluft gelangt über den Ladeluftkühler und den Ladeluftkanal in den Brennraum, wo während des gesamten transienten Motorbetriebs das Verbrennungsluftverhältnis unter dem $\lambda_{\text{stat.}}$ liegt.

Zusätzlich zu den in der Problemstellung beschriebenen Herausforderungen rückt die Berechnung des veränderlichen λ während des transienten Motorbetriebs nach Gleichung (2.2) gemäß [37] in den Fokus und stellt einen weiteren Bestandteil der physikalischen Modellbildung dar.

$$\frac{d\lambda}{dt} = \frac{1}{m_B^2 L_{\min}} \left(m_B \frac{dm_L}{dt} - m_L \frac{dm_B}{dt} \right) \quad (2.2)$$

mit

L_{\min}	Mindestluftbedarf, stöchiometrischer Luftbedarf
m_L	Luftmasse im Brennraum
m_B	Brennstoffmasse im Brennraum

Von der Zielstellung betroffen, den transienten Motorbetrieb und damit das veränderliche λ abzubilden, ist insbesondere das Teilmodell für den ATL mit Verdichter und Turbine. Dieses ist für die Bestimmung der zugeführten Luftmenge m_L in den Brennraum essentiell. Im stationären Betrieb befinden sich Turbine und Verdichter im Gleichgewicht. Das Verdichtermoment entspricht dem Turbinenmoment. Bei Lasterhöhung wird der Turbolader als erstes

durch die erhöhte Abgasenthalpie beschleunigt. Die verdichtete Ladeluftmasse m_L erhöht sich entsprechend.

Nicht weniger wichtig für die Betrachtung des transienten Motorbetriebs ist eine akkurate Modellierung der Brennstoffeinspritzung, um die bei Laständerung im Brennraum vorhandene Brennstoffmasse m_B zu bestimmen. Dieses Teilmodell, basierend auf einem PID-Regler, wird, im Gegensatz zu den davor diskutierten Aspekten des Motorprozesses, bei der experimentellen Modellbildung von Partikelemissionen unabdingbar sein (vgl. 4.2)).

2.1.2 Rußentstehung und -oxidation nach Hiroyasu

Die heutige Literatur bezieht sich häufig auf wissenschaftliche Veröffentlichungen von Hiroyasu et al. zu Beginn der 1980er Jahre [38][39]. Sie fasst bereits bestehendes Wissen zusammen und bildet die Grundlage für weitere Entwicklungen auf dem Gebiet der Beschreibung der dieselmotorischen Rußentstehung und -oxidation. Von Vorteil erwiesen sich damals bei den vorgestellten Untersuchungen Messmöglichkeiten mit Flammenhelligkeitsdetektor mit Fototransistor, die eine zeitliche und räumliche Messung von Ruß im Brennraum ermöglichen. Besonderen Wert wird in den Untersuchungen auf den Einfluss von Einspritzzeiten, Motordrehzahl und Brenndauer gelegt, die ihrerseits Einfluss auf die räumliche und zeitliche Verteilung von Druck und Temperatur im Brennraum haben und Rußentstehung bzw. -oxidation befördern. Hiroyasu prägte folgende drei Gleichungen, die er für jedes der zu Beginn definierten 250 Berechnungspakete mit gleicher Masse innerhalb des Brennraums anwendete [39]:

$$\frac{dm_s}{dt} = \frac{dm_{sf}}{dt} - \frac{dm_{so}}{dt} \quad (2.3)$$

mit

m_s	Rußmasse, gesamt
m_{sf}	während des Verbrennungsprozesses entstandene Rußmasse
m_{so}	Masse des oxidierten Rußes

Der Rußbildungsterm lautet gemäß Gleichung (2.4):

$$\frac{dm_{sf}}{dt} = A_f \cdot m_{fg} \cdot p^{0,5} \cdot e^{\frac{-E_{sf}}{RT}} \quad (2.4)$$

mit

A_f	Parameter, den es anhand von Messungen zu bestimmen gilt
m_{fg}	Masse des verdampften Gases
p	Zylinderdruck / bar
E_{sf}	Aktivierungsenergie für die Rußbildung ($E_{sf}=5,15 \cdot 10^4$ kJ/kmol)
R	universelle Gaskonstante ($R = 8,314$ J/(mol K))
T	Temperaturverlauf (mittlere Gastemperatur, vgl. 2.1.1) / K

Der Oxidationsterm wird gemäß Gleichung (2.5) beschrieben:

$$\frac{dm_{so}}{dt} = A_o \cdot m_s \cdot \frac{p_{O_2}}{p} \cdot p^{1,5} \cdot e^{\frac{-E_{so}}{RT}} \quad (2.5)$$

mit

A_o	Parameter, den es anhand von Messungen zu bestimmen gilt
m_s	vorhandene Rußmasse
p_{O_2}	Sauerstoff-Partialdruck / bar
E_{so}	Aktivierungsenergie für die Rußoxidation ($E_{so}=5,862 \cdot 10^4$ kJ/kmol)

Der Oxidationsterm wird von vielen Anwendern durch den bereits 1962 von Nagle & Strickland-Constable entwickelten sogenannten NSC-Ansatz ersetzt [40]. Gleichung (2.6) gibt einen Einblick in den NSC-Oxidationsterm.

$$\frac{dm_{so}}{dt} = 12 \cdot \left[\frac{1}{1 + \frac{K_T}{K_B \cdot p_{O_2}}} \cdot \left(\frac{K_A \cdot p_{O_2}}{1 + K_Z \cdot p_{O_2}} \right) + K_B \cdot p_{O_2} \cdot \left(1 - \frac{1}{1 + \frac{K_T}{K_B \cdot p_{O_2}}} \right) \right] \quad (2.6)$$

mit

K_A, K_B, K_T, K_Z temperaturabhängige Reaktionskonstanten

Trotz der genannten Ansätze, die bis heute sehr oft Verwendung finden, ist das Thema Rußmodellierung und –simulation noch lange nicht abgeschlossen. Es kann von sehr vielen Seiten her betrachtet werden, wie bspw. in „Soot formation in combustion“, einem Buch, welches Symposiumsbeiträge von Anfang der 90er Jahre zusammenfasst [29] oder dessen Nachfolgewerk [30]. Abhängig von Brennstoff, Anwendungsgebiet und Messtechnik gibt es unterschiedliche Vertiefungsrichtungen. Für die hier interessierende Modellierung von Rußemissionen für Vorhersagen in der Seeschifffahrt sollen im Folgenden noch drei Ansätze, die kurz nach der Jahrtausendwende veröffentlicht wurden, Erwähnung finden, bevor dieser Abschnitt mit einem Einblick in unlängst abgeschlossene Forschungsprojekte abschließt.

2.1.3 Weiterentwicklung durch Kožuch

Kožuch erarbeitete 2004 einen quasi-dimensionalen Ansatz anhand eines Zweizonenmodells, basierend auf einem Einzonemodell, welches 2001 in Anlehnung an Hiroyasus Ansatz entwickelt worden war [27]. Gleichung (2.7) stellt die Rußbildungsrate dar. Wie bei Hiroyasus Ansatz basiert sie auf der allgemeinen Arrhenius-Gleichung. Es besteht eine ausgeprägte Temperaturabhängigkeit. Auffällig ist die Fettfunktion f , die den Einfluss des fett² verbrennenden Brennstoffanteils hervorhebt. Die Rußoxidation wird ebenfalls mit einigen Abweichungen zum NSC und zu Hiroyasus Ansatz berechnet.

² „fett“ bezeichnet hier ein zu geringes Verbrennungsluftverhältnis λ .

$$\frac{dm_{sf}}{d\varphi} = A_f \cdot \frac{dm_B}{d\varphi} \cdot f \cdot e^{\frac{-T_{sf}}{T_{Ff}}} \quad (2.7)$$

mit

$\frac{dm_{sf}}{d\varphi}$	kurbelwinkelabhängige Masse des eingespritzten Brennstoffs
f	Fettfunktion
T_{sf}	Aktivierungstemperatur für die Rußbildung K
T_{Ff}	„fette Flammentemperatur“ [41] K

2.1.4 9-stufiges, phänomenologisches Modell nach Tao

2008 veröffentlichten Tao et al. [42] ein neunstufiges, phänomenologisches Modell, welches in Abb 2.2 schematisch dargestellt ist.

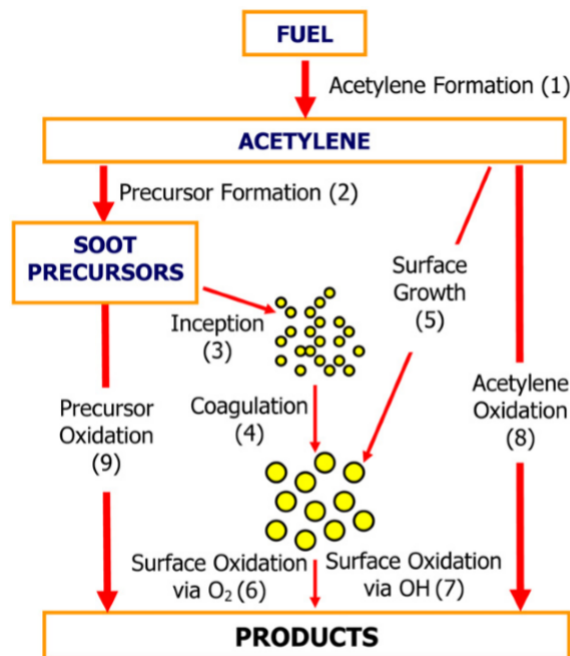


Abbildung 2.2: Schematische Darstellung des neunstufigen, phänomenologischen Rußmodells für dieselmotorische Verbrennung [42].

Der erste Schritt beschreibt die Bildung von Ethin (in Abb. 2.2 als „Acetylene“ bezeichnet) aus dem Dieseldieselkraftstoff. Schritt 2 bestimmt die Vorläuferspezies von Ruß (in Abb. 2.2 als „Soot Percursors“ bezeichnet). Der dritte Schritt betrifft die Keimbildung, während der vierte deren Koagulation beschreibt. Das Oberflächenwachstum in Schritt 5 geht sowohl aus den koagulierten Teilchen als auch aus dem Ethin hervor und führt zu dem sichtbaren Ruß. Mit den Schritten 6 bis 9 werden mögliche Oxidationspfade beschrieben, um letztendlich auf den tatsächlichen Rußausstoß zu schließen. Sowohl [41] als auch [42] haben ihre Ergebnisse erfolgreich für stationäre Betriebspunkte am betriebswarmen Motor getestet. Beide sehen ihre Modelle kritisch für deren Anwendung im transienten Betrieb.

2.1.5 Particle Sectional Model

2016 ist im Rahmen der THIESEL Konferenz ein Paper veröffentlicht worden, welches ein Particle Sectional Model (PSM) zur Rußmodellierung vorstellt [43]. Auch diesem Modell liegt das bereits oben beschriebene Wissen zu den Rußentstehungs- und Oxidationspfaden zu Grunde. Ziel dieser Forschung ist es, sowohl Partikelmasse als auch -größe rechnerisch zu erfassen, um die Erkenntnisse bereits in der Planungsphase von Dieselmotoren bezüglich der Einhaltung künftiger Abgasnormen zur Verfügung zu stellen und Abgasnachbehandlungssysteme auszuwählen. Das Besondere bei der Vorgehensweise ist die Einteilung der Partikelgrößenberechnung in mehrere Abschnitte (engl. „sections“) und diese über Transportgleichungen miteinander zu verbinden. Am Ende des Artikels wird hervorgehoben, dass Ruß bei stationären Betriebspunkten mit 50%-iger Genauigkeit simuliert werde, was ein „significant progress compared to the state of the art of soot modeling in Diesel engines“³ [43] sein soll.

2.1.6 Abgeschlossene Forschungsprojekte zur Emissionsmodellierung beim transienten Motorbetrieb

Im Zeitraum von 2012 bis 2014 wurden an der Universität Stuttgart im Rahmen des BMWi-Projektes „Instationäre Emissionsmodellierung“ Untersuchungen zur Stickoxid- und Rußentstehung und deren rechnergestützten Simulation durchgeführt mit dem Ziel, bestehende Modelle zu erweitern bzw. zu verbessern. Während die Zielsetzung bzgl. Simulation von Stickoxiden erreicht wurde, konnte aufgrund unzureichender Messtechnik für die Modellierung von Ruß keine Verbesserung erzielt werden [27].

Ein ebenfalls vom BMWi gefördertes Vorhaben mit dem Förderkennzeichen 03SX423A-E und dem Titel „Modellierung von Emissionen und Brennstoffverbrauch beim Manövrieren von Schiffen“ (MEmBran) wurde im Zeitraum von 2016 bis 2019 an der Universität Rostock und an der Hochschule Wismar als akademische Projektpartner durchgeführt. Hierbei sind unter anderem theoretische Modellansätze auf Basis der Hiroyasu-Gleichungen für den transienten Motorenbetrieb untersucht und mit Messdaten eines Schiffsdieselmotors verglichen worden. Durch Berücksichtigung von Trägheiten im Gesamtmotormodell, insbesondere beim Untermotormodell des ATL, konnten verbesserte Temperatur- und Druckverläufe ermittelt werden, was eine bessere physikalische Rußmodellierung auch im transienten Betrieb ermöglichte.

In [44] wurden erste Ergebnisse für ein echtzeitfähiges Modell vorgestellt, welches perspektivisch im Schiffsmaschinensimulator der Rheinmetall Electronics GmbH (RME) für Aus- und Weiterbildungszwecke eingebunden werden kann. Abb. 2.3 zeigt Messwerte und Simulationsergebnisse der Rußbelastung während eines Lastwechsels von 20 % auf 60 %. Bei dem entstandenen Modell handelt es sich um ein echtzeitfähiges Modell.

Weitere Ergebnisse aus dem genannten Projekt werden in [45] vorgestellt. Das darin beschriebene Gesamtmotormodell basiert auf der Programmiersprache *Modelica*[®] unter Nutzung von *Dymola*[®]. Die stationäre Rußentstehung und -oxidation wurde nach Patterson [46] modelliert, einem 2-Pfad-Ansatz, der sich wie andere zuvor beschriebene Verfahren in seinen Grundzügen auf Hiroyasu [39] bezieht. Um die Grenzen der Gültigkeit sowohl im stationären wie im transienten Betrieb zu erweitern, wurden basierend auf experimentellen Untersuchungen drei Ergänzungen formuliert:

³ z. Dt.: signifikanter Fortschritt im Vergleich zum Stand der Technik der Rußmodellierung in Dieselmotoren

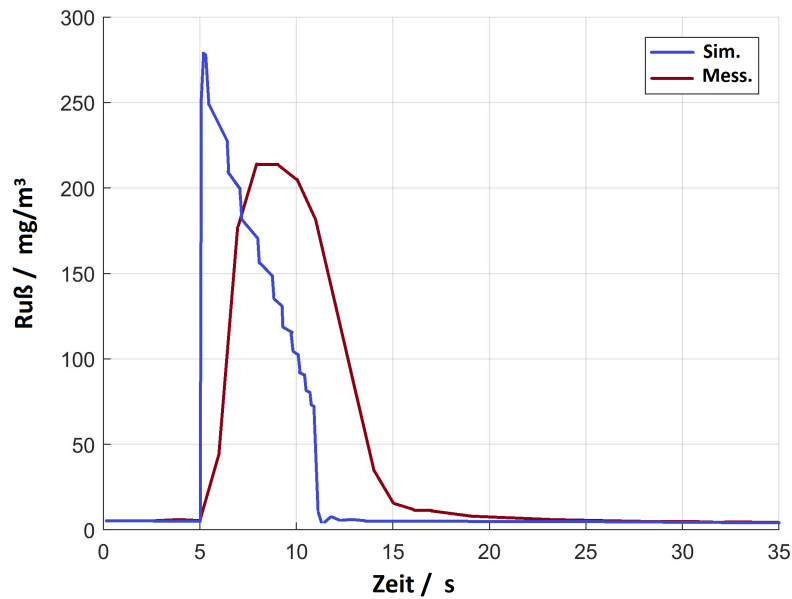


Abbildung 2.3: Rußbelastung bei einem Lastsprung von 20 % auf 60 % in Anlehnung an [44], rot: Messdaten des MAN Motors 6L23/60, blau: Simulation

- Ableitung einer Korrelationsfunktion zur Bestimmung des Partikeldurchmessers,
- exaktere Berechnung der Temperatur bei der Rußoxidation auf Grundlage des globalen Verbrennungsluftverhältnisses λ_{gl} , sowie
- die Berücksichtigung eines zusätzlichen Faktors für Betriebsbereiche mit $\lambda_{gl} < 1,5$, insbesondere während des transienten Betriebs.

Abb. 2.4 zeigt das Ergebnis einer Laständerung von 25 % auf 50 % auf der Propellerkurve. Die Berechnungszeit für eine Sekunde Echtzeit beträgt in Abhängigkeit der zu erzielenden Ergebnisqualität bis zu 5 Sekunden Simulationszeit.

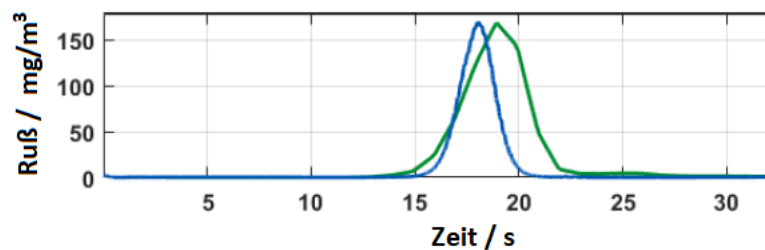


Abbildung 2.4: Rußkonzentration bei Lastsprung auf Propellerkurve (25 % → 50 %), grün: Messdaten des MaK Motors 6M20, blau: Simulation in Anlehnung an [45].

Parallel zu den theoretischen Ansätzen sind im Rahmen des Projekts MEmBran auch experimentelle Modellansätze auf ihre Anwendbarkeit hin getestet worden. Teilaspekte dieses Projekts lieferten erste Ansätze für die vorliegende Arbeit.

2.2 Literaturüberblick: Experimentelle Modellbildung

Während theoretische Modelle etwa auf Bilanzgleichungen oder phänomenologischen Gleichungen basieren, bilden Messungen die Grundlage für die Identifikation datenbasierter Modelle [33]. Deshalb werden diese Modelle oft auch als datenbasierte [32] oder als empirische [47] Modelle bezeichnet. Bohn und Unbehauen [31] bezeichnen erstere als White-Box- und Letztere als Black-Box-Modelle.

Diverse Veröffentlichungen zur experimentellen Modellbildung für dieselmotorische Anwendungen beziehen sich auf die Identifikation statischer und dynamischer Prozesse und bilden nichtlineare Zusammenhänge ab, wie bspw. in [33], [48], [49] und [50] beschrieben. Bei den Recherchearbeiten wurde keine Anwendung gefunden, welche die Vorhersage des Partikelmassestroms beim transienten Schiffsdieselmotorenbetrieb behandelt. Der Diskurs um die Wahl eines geeigneten Modells in Abschnitt 2.3 stellt auf Basis der hier erläuterten Modellansätze die Hypothese auf, dass mit der schlussfolgernd ausgewählten Methode das übergeordnete Ziel der Arbeit erreicht werden kann.

Die experimentelle Modellbildung ist die bevorzugte Herangehensweise, wenn die theoretische Modellbildung (noch) nicht alle relevanten Prozesseigenschaften erfassen kann, oder wenn durch das theoretische Modell die vorgegebene Rechenzeit überschritten wird. Datenbasierte Modelle sind bei der Parametrierung zwar oft sehr zeitintensiv, doch in der späteren Anwendung im Vergleich zu theoretischen Modellen meist schneller rechnend. An dieser Stelle sei gleich ein Nachteil angesprochen: Die optimalen Parameter zu finden, stellt den Modellierer vor eine große Herausforderung. Während bei theoretischen Modellen die Parameter bereits vor Inbetriebnahme eines Prozesses durch geometrisches, physikalisches oder chemisches Vorwissen in einem realistischen Rahmen festgelegt werden können, ist eine Parametrierung datenbasierter Modelle vor Inbetriebnahme eines Prozesses kaum möglich. Trainingsdaten des realen Prozesses oder eines theoretischen Modells sind notwendig, um ein datenbasiertes anzulernen.

Es wird nach einem Zusammenhang gesucht, der lediglich aus gemessenen Eingangsdaten und ohne Prozesswissen, einem bestimmten Algorithmus folgend, Ausgangsdaten berechnet. In dem Kontext wird auch oft von Assoziativspeichermodellen gesprochen, die einen Eingangsvektor $\mathbf{u} \in R^{1 \times m}$ auf eine Ausgangsgröße $\hat{y} \in R^{1 \times p}$ abbilden. Mit dem Vokabular aus der KI bzw. der Mustererkennung gesprochen, wird versucht, den Zusammenhang der Ein- und Ausgangsgrößen (\mathbf{u} und \hat{y}) zu modellieren, „um bei der Beobachtung eines neuen Musters $[\mathbf{u}^*]$ eine gute Prognose $[\hat{y}^*]$ abgeben zu können“ [51].

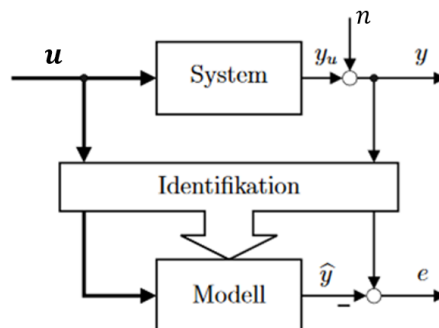


Abbildung 2.5: Prinzip der Systemidentifikation mit Eingangsvektor \mathbf{u} , Störgröße n , Systemausgang y , Modellausgang \hat{y} und dem Modell- oder Ausgangsfehler e gemäß [52].

In Abb. 2.5 ist das Prinzip der Systemidentifikation dargestellt. Das Modell enthält Parameter, die es über eine lineare Regression bzw. iterativ mit einer nichtlinearen Ausgleichsrechnung anzupassen gilt, abhängig davon, ob das Modell linear oder nichtlinear in den Parametern ist.

Die meisten natürlichen Prozesse oder Systeme sind nichtlinearer Natur. Für die Entstehung von Partikeln (\hat{y}) in Abhängigkeit von Motordrehzahl und Brennstoffverbrauch (\mathbf{u}) trifft diese Aussage ebenfalls zu, sowohl im statischen, stationären Motorbetrieb, als auch beim dynamischen, transienten Betrieb des Motors. Aus diesem Grund wird in diesem Abschnitt der Fokus auf nichtlineare Modellansätze gesetzt. In den folgenden Unterabschnitten 2.2.1 bis 2.2.4 werden mehrere entsprechende statische Modellarchitekturen kurz vorgestellt. Ergänzend zur Theorie wird dabei beispielhaft auf praktische Umsetzungen bzgl. dieselmotorischer Fragestellungen hingewiesen.

Unter Modellarchitektur wird hier eine Funktion $f(\cdot)$ verstanden, welche Eingangsdaten \mathbf{u} zu einer Ausgangsgröße \hat{y} verarbeitet. In einer Gegenüberstellung wird in Unterabschnitt 2.2.5 diskutiert, welche Modelle sich aufgrund ihrer identifizierten Eigenschaften für dynamische, nichtlineare Systeme eignen könnten. Die Modellarchitektur mit den besten Erfolgschancen wird dann auf Erweiterungsmöglichkeiten untersucht, die eine dynamische, nichtlineare Prozesssimulation zulassen.

Abb. 2.6 versucht einige wesentliche, in der Literatur diskutierte datenbasierte Modellansätze einzuordnen und gibt außerdem einen Überblick über die Schwerpunkte der Unterabschnitte 2.2.1 bis 2.2.5.

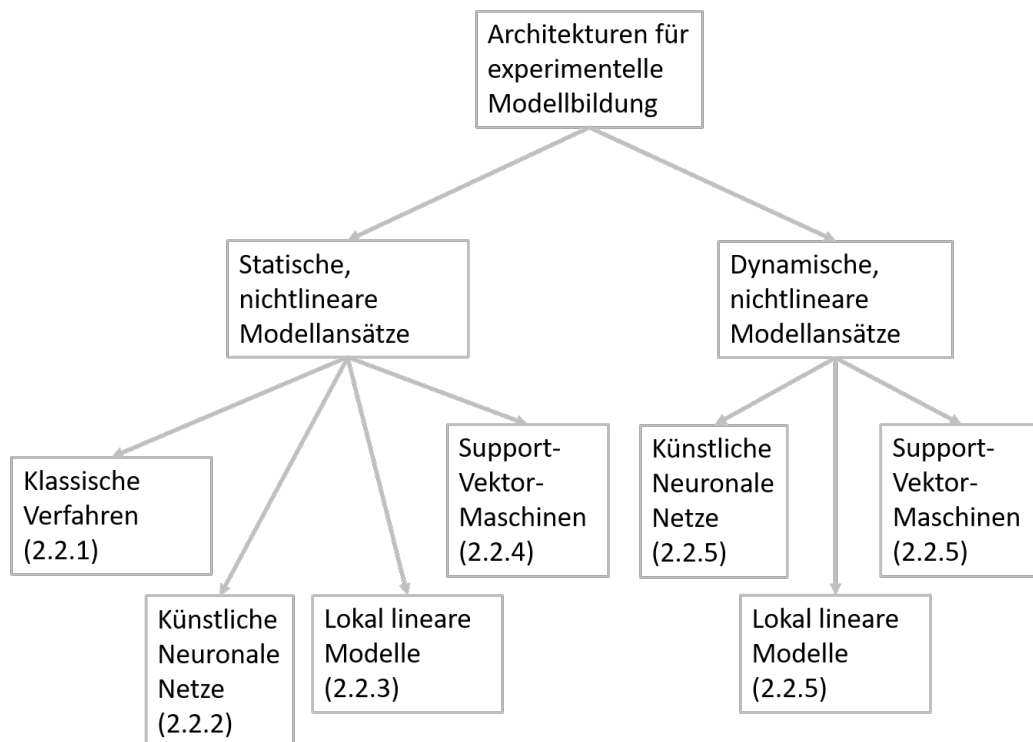


Abbildung 2.6: Übersicht über eine Auswahl an möglichen Modellarchitekturen zur Beschreibung der dieselmotorischen Partikelentstehung im stationären (statischen) Betrieb und im transienten (dynamischen) Betrieb.

2.2.1 Klassische statische Verfahren

Polynomverfahren sind mindestens seit der Antike bekannt, spätestens aber seit Euklid. Vermutlich wurden davor Rasterkennfelder, heutzutage oft auch als Lookup-Tables bekannt, benutzt, um Zusammenhänge graphisch darzustellen. Wichtiger als die reine graphische Darstellung wird die Möglichkeit gewesen sein, (Interpolations-)Werte zwischen den bekannten Messpunkten auslesen zu können. Im Folgenden wird auf beide Verfahren kurz eingegangen.

Mehrdimensionale Rasterkennfelder

Für ein- bis 2-dimensionale Eingangsräume werden Rasterkennfelder sehr häufig genutzt. Sie bieten u. a. den Vorteil, dass die Messdaten direkt in das Kennfeld übertragen werden können. Abb. 2.7(a) steht beispielhaft für ein Rasterkennfeld in der dieselmotorischen Anwendung. Bei Kennfeldern mit mehr als zwei Eingangsgrößen wird eine Visualisierung schwierig. Sequenz [53] stellt am Beispiel eines Verbrennungsmotors einen Ansatz vor, wie mit mehrdimensionalen Kennfeldern umgegangen werden kann. Die Interpolation zwischen den einzelnen Messpunkten geschieht meist linear, was in stark nichtlinearen Bereichen des Kennfeldes zu hohen Ungenauigkeiten führen kann, es sei denn, diese Bereiche werden durch ein engmaschiges Raster dichter abgedeckt. Ein weiterer Nachteil ist, dass die Messdaten keinen Ausgleich erfahren, wenn sie ohne Glättung 1:1 in das Kennfeld übernommen werden. Abhilfe schafft hier eine mehrmalige Aufzeichnung der einzelnen Rasterpunkte, um allfällige Messungenauigkeiten zu identifizieren, herauszufiltern oder zumindest die Messwerte arithmetisch zu mitteln.

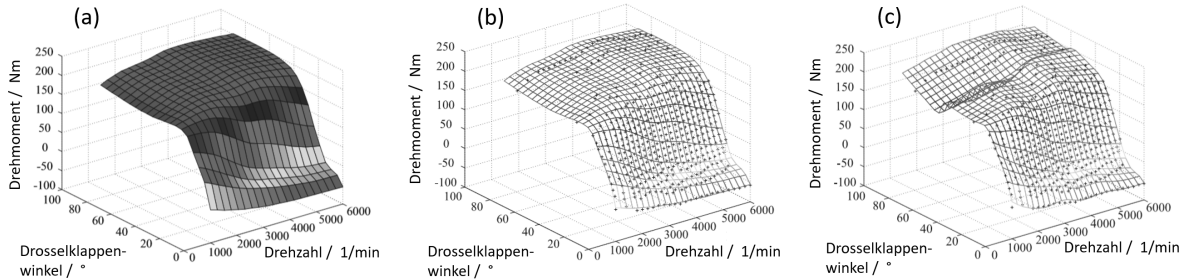


Abbildung 2.7: (a) Rasterkennfeld aus 400 Stützpunkten, (b) MLP-Netz mit 6 Neuronen in der Zwischenschicht und (c) Fuzzy-logisches Netz mit 12 Wenn-Dann-Regeln, um von Drehzahl und Drosselklappenwinkel auf das Motordrehmoment zu schließen; in Anlehnung an [33].

Nichtlineare Polynommodelle

Zur Beschreibung von statischen Nichtlinearitäten eignen sich bis zu einem gewissen Grad die klassischen Polynomansätze. Gleichung (2.8) zeigt den allgemeinen Aufbau eines Polynoms n -ten Grades mit einer m -dimensionalen Eingangsgröße $\mathbf{u} \in R^{1 \times m}$.

$$\hat{y} = c_0 + \sum_{i=1}^m c_i u_i + \sum_{i_1=1}^m \sum_{i_2=1}^m c_{i_1 i_2} u_{i_1} u_{i_2} + \dots + \sum_{i_1=1}^m \dots \sum_{i_m=1}^m c_{i_1 \dots i_m} u_{i_1} \dots u_{i_m} \quad (2.8)$$

mit

$$\mathbf{c} = [c_0, c_i, \dots, c_{i_1 \dots i_m}] \quad \text{als Polynomkoeffizienten}$$

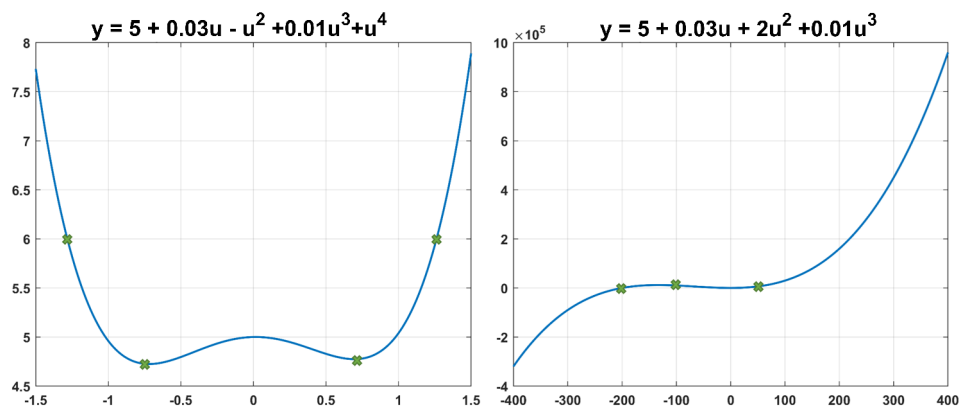


Abbildung 2.8: links: Oszillation zwischen zwei Messpunkten (grüne Kreuze), rechts: Divergieren bei Extrapolation ins $\pm\infty$ außerhalb der Messpunkte

Polynommodelle haben den großen Vorteil, dass die Ausgangsgröße linear von den Modellparametern abhängt. Das bedeutet, dass ein einstufiges, lineares Regressionsverfahren wie bspw. die Methode der kleinsten Fehlerquadrate zur Anwendung kommen kann. Dem gegenüber stehen zwei große Nachteile. Einerseits unterliegt dieser Ansatz sehr stark dem sogenannten Fluch der Dimensionalität. Mit diesem Begriff wird die Problematik angesprochen, die sich ergibt, wenn der Eingangsraum des Modells mehrdimensional wird. Folglich nimmt die Anzahl der nötigen Stichproben nicht linear, sondern exponentiell zu⁴ [54]. Eine Vergrößerung des Modell-eingangsraums führt meist auch zu einer Erhöhung der benötigten Anzahl Modellparameter. Allerdings können mit Strukturauswahlverfahren die wesentlichen Terme selektiert und somit diesem Nachteil begegnet werden. Der zweite große Nachteil ist das möglicherweise oszillierende Interpolations- und das relativ schnell bis ins $\pm\infty$ divergierende Extrapolationsverhalten [32]. Beide Verhaltensweisen können entstehen, wenn der Polynomgrad größer eins ist, wie beispielhaft in Abb. 2.8 dargestellt ist. Ein oszillierendes Interpolationsverhalten kann sich zeigen, wenn zwischen zwei gemessenen Datenpunkten ein Abstand besteht, der aufgrund des gewählten Polynomgrades nicht annähernd linear, sondern stark nichtlinear abgebildet wird.

2.2.2 Künstliche Neuronale Netze

Der Ursprung der Künstlichen Neuronalen Netze (KNN) liegt, da sind sich etliche Autoren einig [55][56][57], in der ersten Hälfte der 1940er Jahre. Ein Aufsatz von McCulloch und Pitts von 1943 beschreibt den Aufbau eines „McCulloch-Pitts“-Neurons, welches in der Lage ist, jegliche arithmetische und logische Funktionen abzubilden [58]. Bei diesem Aufsatz blieb es bei der Theorie. Veröffentlichte praktische Anwendungen folgten erst Jahre später. Ende der 1950er Jahre entstanden dank der Weiterentwicklung der Computertechnik praktische Anwendungen wie bspw. die Mustererkennung. Trotz großer Fortschritte wurden die damaligen Möglichkeiten auch überschätzt. Letzteres führte zu einem Einbruch an Popularität [57]. Nichtsdestotrotz wurde weiter geforscht und nach Lösungen gesucht, welche die bekannt gewordenen Einschränkungen (wie bspw. die Unmöglichkeit, ein XOR-Problem⁵ zu repräsentieren) überwinden wür-

⁴ Die Basis entspricht der Anzahl Stichproben für eine Dimension, im Exponenten befindet sich die Dimensionalität des Eingangsraums.

⁵ Boolesche Funktion zur Beschreibung des „ausschließenden Oders“ (vgl. 2.2.4)

den. Erst Mitte der 1990er Jahre gewannen die KNN wieder an Beliebtheit. Damals gelang es u. a. Hopfield, das „Problem des Handelsreisenden“, eine herausfordernde Optimierungsaufgabe, mithilfe des sogenannten Hopfield-Netzes zu lösen. Quasi zeitgleich wurde durch Rumelhart et al. [59] das Lernverfahren mit Backpropagation erarbeitet und veröffentlicht. Während genannte Anwendungen sich auf mathematische und informationstechnische Wissensgebiete beschränkten, kamen mit Konzepten wie Data Mining und Big Data, sowie mit den gestiegenen Rechnerkapazitäten und der Vernetzung der Menschen durch das Internet zu Beginn des 21. Jh. neue Möglichkeiten hinzu, um KNN mit neuen Zielsetzungen anwenden zu können. Die mathematisch höchst interessanten und vielseitig einsetzbaren unterschiedlichen Kategorien der KNN haben diese zu einer der wesentlichen Methoden der Künstlichen Intelligenz (KI) werden lassen [21]. Die Faszination der KNN liegt wohl darin, dass es sich um ein lernfähiges System handelt, das keiner expliziten Programmierung bedarf, dafür aber ausgesprochen viele Trainingsdaten von hoher Qualität benötigt.

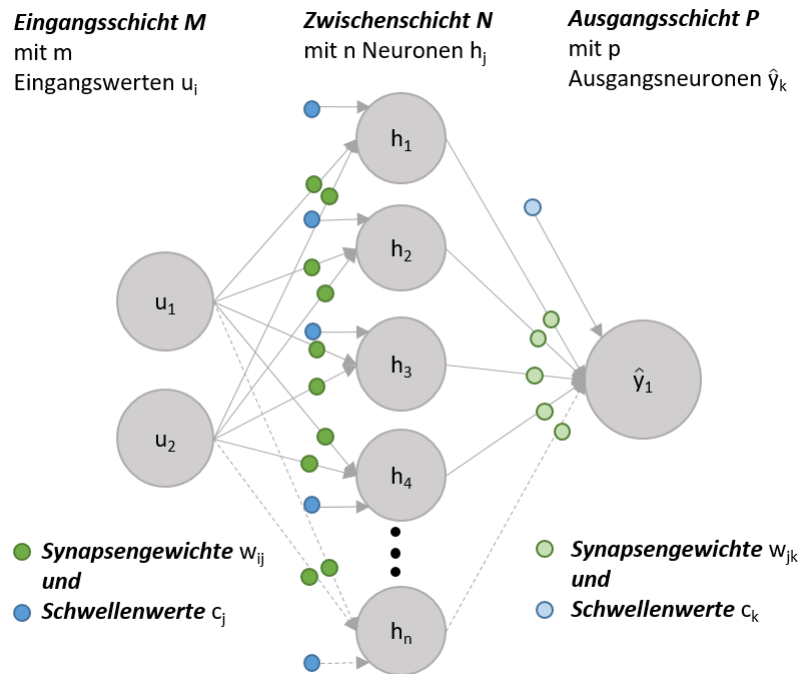


Abbildung 2.9: Schematische Darstellung eines KNN (vorwärtsgerichtetes Multi-Layer-Perzeptron-Netz) in Anlehnung an Darstellungen aus [60] mit Angaben zu den in dieser Arbeit verwendeten Bezeichnern und Indizes.

Mit der schematischen Darstellung eines vorwärtsgerichteten KNN in Abb. 2.9 werden auch gleich die im weiteren Verlauf dieser Arbeit verwendeten Bezeichner bzw. Indizes festgelegt: In der Eingangsschicht M befinden sich m Eingangsneuronen u_i , in denen keine Veränderungen der Eingangswerte vorgenommen werden. Sie leiten diesen lediglich an die Neuronen der Zwischenschicht N weiter. In der Schicht der n versteckten Neuronen h_j , auch als Prozesselemente bezeichnet [61], werden Informationen parallel verarbeitet. Die Anzahl der versteckten Schichten N_1, N_2, N_3, \dots ist theoretisch unbegrenzt und richtet sich nach der konkreten Anwendung und der Rechenkapazität. In der Ausgangsschicht P befinden sich p Ausgangsneuronen \hat{y}_k , die den Ausgangsvektor bilden. Jedes Neuron besitzt beliebig viele Eingänge und gibt einen

einzelnen Ausgabewert aus. Die Verarbeitungsrichtung folgt den Pfeilen. Die einfachsten Netze sind die ausschließlich vorwärts gerichteten Netze, ohne Rückkopplungen oder laterale Verbindungen. Die Parameter des KNN aus Abb. 2.9 werden Synapsengewichte und Schwellenwerte genannt. Die Indizes richten sich danach, zwischen welchen beiden Schichten sich die Verbindung befindet bzw., welche Schicht mit dem Schwellenwert beaufschlagt wird.

Diese statischen KNN werden als Universalapproximatoren (engl. „universal approximators“) bezeichnet. Sie folgen dem Universalapproximator-Theorem, welches besagt, dass mit KNN jeder beliebige funktionale Zusammenhang dargestellt werden kann, sofern ausreichend viele Neuronen in der bzw. den Zwischenschichten vorhanden sind [62].

Abb. 2.10 gibt einen Überblick über die zwei gebräuchlichsten KNN und ein Neuro-Fuzzy (NF) Netz, deren Ähnlichkeiten im strukturellen Aufbau liegen und deren Unterschiede bezüglich der Prozesselemente in der Darstellung verdeutlicht werden [63].

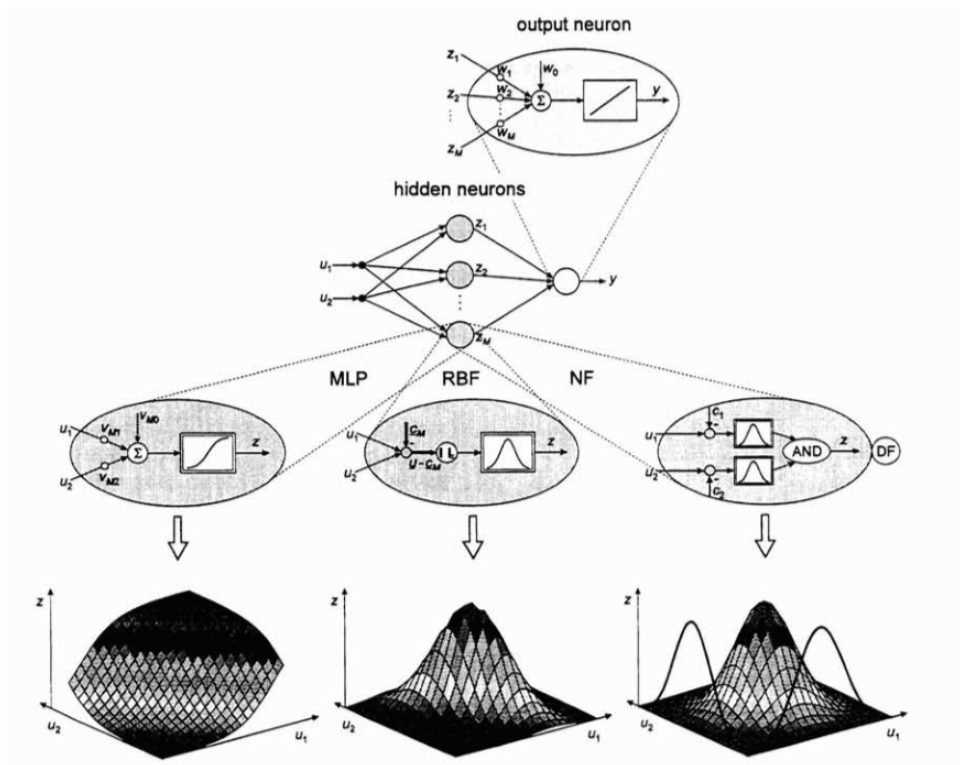


Abbildung 2.10: Darstellung der drei gebräuchlichsten KNN für statische Anwendungen und ihre Ausprägungen: das Multi-Layer-Perzeptron-Netz (links), das Radial-Basisfunktions-Netz (Mitte) und das Neuro-Fuzzy-Netz (rechts) [63, S. 949].

Die häufigsten Vertreter der KNN sind nach Isermann [64] das Multi-Layer-Perzeptron-Netz (MLP-Netz) und das Radial-Basisfunktions-Netz (RBF-Netz). Des Weiteren können auch Support-Vektor-Maschinen (SVM) aufgrund ihrer „historischen Entwicklung und ihrer mathematischen Verwandtschaft zu linearen Netzen“ [21] den KNN zugeordnet werden. Manche Autoren betrachten die SVM auch als getrenntes Verfahren, welches als separate Methode neben den KNN einzuordnen ist [65]. Im Folgenden wird kurz auf die beiden KNN-Verfahren MLP-Netz und RBF-Netz eingegangen, bevor im Unterabschnitt 2.2.3 das Fuzzy-logische Netz, das Neuro-Fuzzy-Netz und in 2.2.4 die SVM erläutert werden.

Multi-Layer-Perzeptron Netze

Das MLP-Netz besteht aus mehreren mathematisch formulierten Neuronen, die zusammengeschaltet im Prinzip jede arithmetische oder logische Funktion berechnen können. Der Funktionswert h_j des j -ten Neurons errechnet sich aus der Summe aller eingehenden, gewichteten Signale, die einer Aktivierungsfunktion zugeführt werden. Die Eingangswerte \mathbf{u} werden durch sogenannte Synapsengewichte \mathbf{W} gewichtet, bevor sie aufsummiert werden. Die Zwischensumme x_j bildet jeweils zusammen mit dem Schwellenwert c_j das Argument für eine Aktivierungsfunktion $\varphi_j(x_j - c_j)$. Typische Aktivierungsfunktionen sind in Abb. 2.11 dargestellt. Der Schwellenwert c dient der Verschiebung des Funktionsgraphen auf der Abszisse.

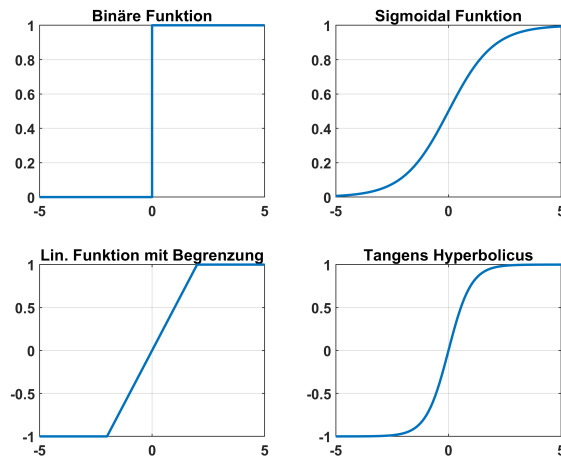


Abbildung 2.11: Vier typische Aktivierungsfunktionen für ein mathematisches Perzeptron

Die einzelnen Teilgleichungen eines Neurons lauten entsprechend (2.9) und (2.10):

$$x_j = \sum_{i=1}^m w_{i,j} u_i \quad (2.9)$$

$$h_j = \varphi_j(x_j - c_j) \quad (2.10)$$

Der Ausgangswert h_j eines verdeckten Neurons wird an die Neuronen der nächsten Schicht weitergegeben, dort gewichtet und mit den ebenfalls gewichteten Ausgangswerten der anderen Neuronen aus derselben Schicht aufaddiert. Mit diesem Vorgehen können nichtlineare Zusammenhänge mit relativ geringem Aufwand abgebildet werden. Abbildung 2.7(b) auf Seite 20 zeigt diese Möglichkeit am Beispiel eines Dieselmotorkennfeldes.

Radial-Basisfunktions-Netze

RBF-Netze weisen eine sehr ähnliche, übergeordnete Architektur wie die MLP-Netze auf. Sie folgen jedoch einem anderen Prinzip. Vom Eingangsvektor $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^{1 \times m}$ wird nach Abzug des Zentrenvektors \mathbf{z} ein quadratisches Abstandsmaß gebildet.

$$\mathbf{x}_j = \|\mathbf{u} - \mathbf{z}_j\|^2 \quad (2.11)$$

Der Abstandsvektor \mathbf{x}_j enthält die Argumente für die n radialen Basisfunktionen $\varphi(\mathbf{u}, \mathbf{z}_j, \boldsymbol{\sigma}_j)$, die meist in Form einer Gaußfunktion wie in Gleichung (2.12) formuliert werden.

$$\varphi_j(x_j) = e^{\left[-\frac{1}{2} \cdot \left(\frac{-(u_1 - z_{j,1})^2}{\sigma_{j,1}^2} + \frac{-(u_2 - z_{j,2})^2}{\sigma_{j,2}^2} + \dots + \frac{-(u_m - z_{j,m})^2}{\sigma_{j,m}^2} \right) \right]} \quad (2.12)$$

mit

$\mathbf{u} = [u_1, u_2, \dots, u_m]$	Eingangssignalsvektor mit m Komponenten
$\mathbf{z}_j = [z_{j,1}, z_{j,2}, \dots, z_{j,m}]$	Zentrenvektor der Glockenkurven des j -ten Neurons
$\boldsymbol{\sigma}_j = [\sigma_{j,1}, \sigma_{j,2}, \dots, \sigma_{j,m}]$	Vektor der Standardabweichungen des j -ten Neurons

In der Aktivierungsfunktion werden die einzelnen Ausgangswerte der radialen Basisfunktionen aufaddiert. Meist besitzen RBF-Netze nur eine versteckte Schicht, so dass sich die Ausgangsgleichung nach Gleichung (2.13) darstellen lässt.

$$\hat{y} = \sum_{j=1}^n w_j \cdot h_j = \sum_{j=1}^n w_j \cdot \varphi_j(x_j) \quad (2.13)$$

mit

$\mathbf{w} = [w_1, w_2, \dots, w_n]$	Gewichtsvektor mit n Komponenten
---------------------------------------	------------------------------------

Der Ausgangswert h_j eines jeden Neurons wird mit dem Gewicht w_j multipliziert und anschließend aufsummiert. Nichtlineare Zusammenhänge lassen sich auf diese Weise sehr gut abbilden. Da die zu optimierenden Gewichte zwischen nichtlinearer Aktivierungsfunktion und Ausgang liegen, können lineare Optimierungsverfahren angewendet werden. Diese Vereinfachung bedingt jedoch, dass die Zentren \mathbf{z}_j und die Standardabweichungen $\boldsymbol{\sigma}_j$ im Voraus festgelegt werden. Sollen diese ebenfalls Teil der Optimierung sein, muss auf ein iteratives, nichtlineares Optimierungsverfahren zurückgegriffen werden.

2.2.3 Lokal lineare Modelle

Bei lokal linearen Modellen werden Informationen ebenfalls parallel in den Prozesselementen berechnet. Diese Eigenschaft haben sie mit den oben genannten KNN gemeinsam. Diese Gemeinsamkeit ist mitunter ein Grund, weshalb einzelne lokal lineare Modellansätze je nach Autor auch zur den Architekturen der KNN gezählt werden, wie beispielsweise die Neuro-Fuzzy Netze (vgl. Abb. 2.10). Die n Prozesselemente bestehen jeweils aus zwei Funktionen: Dem linearen Teilmodell und der Basisfunktion. Das lineare Teilmodell wird, wie in Gleichung (2.14) durch die Linearkombination γ_j gebildet.

$$\gamma_j(\mathbf{u}) = c_{j,0} + c_{j,1}u_1 + \dots + c_{j,m}u_m \quad (2.14)$$

mit

$\mathbf{c}_j = [c_{j,0}, c_{j,1}, \dots, c_{j,m}]$	Koeffizienten der Linearkombination
---	-------------------------------------

Die Basisfunktion $\varphi_j(\mathbf{u})$ wird gelegentlich auch als Validierungsfunktion bezeichnet [33]. Sie legt den Gültigkeitsbereich des linearen Teilmodells im Eingangsraum fest. Die Teilmodelle überlappen sich in deren Randregionen. Trotz dieser Überlagerung können die Prozesselemente mit ihren Gültigkeitsbereichen eindeutig zugeordnet werden, was die Interpretierbarkeit dieser Modellansätze im Gegensatz zu klassischen MLP-Netzen bis zu einem gewissen Grad ermöglicht.

Die Ausgangsgleichung eines Prozesselements lautet:

$$h_j = \sum_{j=1}^n \gamma_j(\mathbf{u}) \cdot \varphi_j(\mathbf{u}) \quad (2.15)$$

Zu den lokal linearen Modellen zählen nach [66] beispielsweise:

- Splines und stückweise lineare Modelle,
- Statistische Ansätze, wie die Gaussian-Mixture-Regression,
- Fuzzy-logische Modelle und
- Neuro-Fuzzy-Modelle.

Auf die beiden Letzteren soll kurz eingegangen werden, da in der Literatur Anwendungen zu dieselmotorischen Fragestellungen gefunden wurden, bei denen mithilfe dieser Modellarchitekturen bereits Kennwertberechnungen für den statischen bzw. dynamischen Motorbetrieb durchgeführt worden sind.

Fuzzy-logische Modelle

Fuzzy-Logik, auch als Unschärfelogik bezeichnet, arbeitet mit unscharfen Mengen. Bekannt wurde sie in den frühen 1960er Jahren [67]. Die Zugehörigkeit eines Elements zu einer unscharfen Menge muss nicht zu 100% gewährleistet sein, sondern kann auch nur einen gewissen Zugehörigkeitsgrad aufweisen. Beispielsweise kann eine als warm gefühlte Temperatur zu 50% als kalt und zu 50% als heiß bezeichnet werden, sofern nur diese beiden relativen Wertungen zur Auswahl stehen. Fuzzy Modelle sind wissensbasiert und folgen WENN-DANN Regeln, wie bspw.: WENN der Drosselklappenwinkel des Motors klein und die Motordrehzahl hoch ist, DANN liegt am Motor ein geringes Moment an (vgl. Abb. 2.7).

Mit Expertenwissen werden relative Wertungen wie z.B. „klein“, „hoch“ und „gering“ in Zugehörigkeitsfunktionen (engl. „membership functions“) dargestellt. Werden diese relativen Wertungen mathematisch verwertbaren, numerischen Werten zugeordnet, wird von Fuzzifizierung gesprochen. Über WENN-DANN Regeln werden die Eingangswerte miteinander verknüpft und akkumuliert. Mit der Defuzzifizierung (in Abb. 2.10 mit DF abgekürzt) bekommt der akkumulierte Wert eine Bedeutung und bildet den Ausgangswert [68].

Ein reines Fuzzy Modell beruht auf Expertenwissen. Eine Ergänzung hierzu bildet das Takagi-Sugeno-Kang Fuzzy Modell, welches die Möglichkeit des datenbasierten Lernens eröffnet. Der WENN-Teil der Regel entspricht dem des reinen Fuzzy Modells. Im DANN-Teil der Berechnung werden Linearkombinationen der Eingangswerte relevant [68]:

$$\text{WENN } u_1 \text{ bedeutet } c_{j,1}^* \text{ und } u_2 \text{ bedeutet } c_{j,2}^* \text{ und ... und } u_m \text{ bedeutet } c_{j,m}^* \quad (2.16)$$

$$\text{DANN gilt } \gamma_j(\mathbf{u}) = c_{j,0} + c_{j,1}u_1 + \dots + c_{j,m}u_m \quad (2.17)$$

mit

\mathbf{C}^* bzw. $c_{j,i}^*$	Wertungsmatrix, rel. Wertung der Eingangsvariable u_i in der j -ten Regel
\mathbf{C} bzw. $c_{j,i}$	Koeffizientenmatrix, Koeffizienten des linearen Teilmodells der j -ten Regel

Über das gewichtete Mittel der Ergebnisse der Teilmodelle wird die Ausgangsgleichung (2.18) erhalten:

$$\hat{y}(\mathbf{u}) = \frac{\sum_{j=1}^n \gamma_j(\mathbf{u}) \cdot w_j}{\sum_{j=1}^n w_j} \quad (2.18)$$

mit

$$\mathbf{w} = [w_1, w_2, \dots, w_n] \quad \text{Gewichtsvektor mit } n \text{ Komponenten}$$

Der Gültigkeitsbereich wird beim Takagi-Sugeno-Kang Fuzzy Modell durch den WENN-Teil der Regel festgelegt. Der DANN-Teil ist die Linearkombination – ein lokal lineares Modell. Durch die Fuzzy-Logik überlappen sich die Teilmodelle derart, dass die Übergänge nicht sprunghaft, sondern stetig verlaufen [69].

Neuro-Fuzzy Netze

Neuro-Fuzzy (NF) Netze sind, wie der Name es schon andeutet, eine Verbindung zwischen KNN und Fuzzy Modellen. Ein besonderer Vertreter der NF-Netze ist LOLIMOT (Local Linear Model Tree). LOLIMOT kann als eine Erweiterung der RBF-Netze angesehen werden, die sich Kenntnissen aus der Fuzzy-Logik, im Speziellen des Takagi-Sugeno-Kang Fuzzy Modells, bedient. LOLIMOT greift die Idee der stückweise linearen Funktion auf. Das T im Akronym LOLIMOT, welches für Tree (z. Dt. Baum) steht, bezieht sich auf die Baumstruktur, die sich ergibt, wenn der Eingangsraum iterativ in n Teilmodelle aufgeteilt wird. Jedes Prozesselement des LOLIMOT spiegelt einen Gültigkeitsbereich wider, in dem das jeweilige lokal lineare Teilmodell Gültigkeit besitzt. Die Validierungsfunktion wird deshalb oft auch als Gültigkeitsfunktion (engl. “validity function,”) bezeichnet. Das Zentrum der Validierungsfunktion liegt in der Mitte der Hyperebene.

Anfänglich besteht das Netz aus nur einem Neuron, sprich einem linearen Modell und einer Validierungsfunktion. Jedes lokal lineare Teilmodell wird separat über die Methode der kleinsten Fehlerquadrate parametrisiert, die Parameter der Validierungsfunktion über nichtlineare Optimierungsverfahren. Beim Anlernen des Modells werden nicht nur die Modellparameter angepasst, sondern auch die Anzahl n der Teilmodelle und deren Lokalisierung im m -dimensionalen Eingangsraum. Nach jeder Iteration spaltet sich der Eingangsraum entlang einer Eingangsachse, wobei immer das Teilmodell mit der geringsten Güte geteilt wird. Dieses Verfahren wurde über die Zeit ergänzt und erweitert, so dass viele Varianten davon existieren.

Die Teilmodelle werden mit Linearkombinationen $\gamma_j(\mathbf{u})$ jeweils angenähert.

$$\gamma_j(\mathbf{u}) = c_{j,0} + c_{j,1}u_1 + \dots + c_{j,m}u_m \quad (2.19)$$

mit

$\mathbf{c}_j = [c_{j,0}, c_{j,1}, \dots, c_{j,m}]$	Konstanten der Linearkombination
$\gamma_j(\mathbf{u})$	Ergebnis der lokalen Linearkombination des j-ten Teilmodells.

Diese Vorgehensweise bietet den Vorteil, dass Eingangssignale, die für das jeweilige Neuron keine Wirkung haben, mit dem Gewicht $c_{j,i} = 0$ versehen werden können. Das lokal lineare Teilmodell wird mit dem Ergebnis der Validierungsfunktion $\varphi_j(\mathbf{u})$ multipliziert, um den Ausgangswert des Prozesselements zu erhalten, wie Gleichung (2.20) zu entnehmen ist. Als Validierungsfunktion $\varphi_j(\mathbf{u})$ wird üblicherweise eine normierte Gauß-Funktion gewählt, die den Gültigkeitsbereich des j-ten Teilmodells festlegt. Durch die Normierung ergeben sich Ausgangswerte im Intervall $[0,1]$.

$$\hat{y}(\mathbf{u}) = \sum_{j=1}^n \gamma_j(\mathbf{u}) \cdot \varphi_j(\mathbf{u}) \quad (2.20)$$

Die Darstellung der Gleichung (2.20) ist identisch mit der allgemeinen Darstellung der Ausgangsgleichung von lokal linearen Modellen, vgl. Gl. (2.15). Weiterführende Erläuterungen zu diesem Verfahren sind u. a. in [33][50][32] zu finden.

2.2.4 Support-Vektor-Maschinen

Aus aktuellen Literaturquellen wie bspw. [70] und [71] geht hervor, dass SVM bereits in maritimen Anwendungen Relevanz haben, bspw. zur Vorhersage von Schiffsbewegungen. Der Algorithmus der SVM wurde 1995 durch Vapnik [72] beschrieben und verfolgt das Prinzip, Datenpunkte ϑ von Systemeintritten und -ausgängen $(\mathbf{u}_\vartheta, \hat{y}_\vartheta)$ in einen höherdimensionalen Raum zu transformieren, um Klassifizierungs- oder Regressionsprobleme zu lösen. Für das Verständnis einfacher ist die Erläuterung anhand einer linearen Klassifizierungsproblematik: Es sollen Datenpunkte im 2-dimensionalen Raum durch eine Gerade getrennt werden. Die Gerade sollte dabei so weit wie möglich von den Datenpunkten beider Gruppen entfernt eine räumliche Trennung herbeiführen. Jene Datenpunkte beider Klassen, die denselben Abstand ε zur Geraden haben, werden als Stützvektoren (engl. „support vectors“) bezeichnet und verleihen dem Verfahren auch dessen Namen [21]. Bei linear nicht lösbaren Problemen kommt die Hyperebene zum Tragen. Heinert [73] erklärt dieses Vorgehen am oben bereits kurz angedeuteten XOR-Problem: Den Wertepaaren $(0, 0)$ und $(1, 1)$ wird der Wert 0 und den Paaren $(0, 1)$ und $(1, 0)$ der Wert 1 zugewiesen. „Das XOR-Problem besteht in der Aufgabe, die zweidimensional kartesisch aufgetragenen Wertepaare in Bezug auf ihren Ausgabewert in der Ebene durch eine beliebige Linie zu separieren. In der Ebene ist diese Aufgabe linear unlösbar (Abb. 2a). Spannen aber die Funktionswerte eine weitere Dimension auf, wird eine Hyperebene den entstandenen Merkmalsraum geeignet trennen können, so dass die Muster gemäß ihres Funktionswertes eindeutig geschieden sind (Abb. 2b)“ [73, S. 180]. Die Gleichung für die Hyperebene lautet:

$$\hat{y} = (\mathbf{w}^T \mathbf{u}) + b \quad (2.21)$$

mit

- \mathbf{w} Normvektor
- \mathbf{u} Datenpunkte-Vektor
- b Bias, der die Entfernung der Hyperebene zum Ursprung angibt

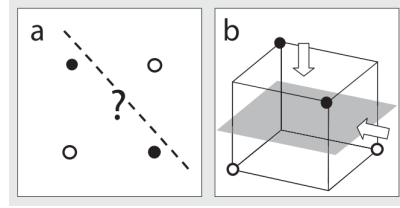


Abbildung 2.12: Die XOR-Dichotomie a) im zweidimensionalen Datenraum, b) im dreidimensionalen Merkmalsraum mit den Normalenvektoren der Abbildungen [73]

Wie in Abb. 2.12 rechts zu sehen ist, werden durch die Transformation die Datenpunkte auf einen Vektor im mehrdimensionalen Raum abgebildet. Während bei der Klassifizierung der Abstand der Hyperebene zu den einzelnen Datenpunkten möglichst groß sein sollte ($\geq \varepsilon$), verlangt die Regression eine Minimierung dieser Abstände. Jene Datenpunkte, die sich innerhalb des Trennbereichs mit der Breite 2ε befinden, werden vernachlässigt, während jene außerhalb über eine sogenannte Schlupfvariable ξ Einfluss auf die Optimierung ausüben. Die Minimierungsaufgabe lautet in ihrer ursprünglichsten Form (primal formula) entsprechend Gleichung (2.22).

$$J(\mathbf{w}, \xi^*, \xi) = \frac{1}{2} \left(\mathbf{w}^T \mathbf{w} + C \left(\sum_{\vartheta=1}^S \xi^* + \sum_{\vartheta=1}^S \xi \right) \right) \quad (2.22)$$

mit

- \mathbf{w} Normvektor
- S Anzahl Datenpunkte
- C Trade-Off-Variable: regelt Flachheit der Hyperebene und Überlappung der Datenmengen
- ξ Schlupfvariable auf der einen Seite der Hyperebene
- ξ^* Schlupfvariable auf der gegenüberliegenden Seite der Hyperebene

unter den Bedingungen:

$$y_{\vartheta} - (\mathbf{w}^T \mathbf{u}_{\vartheta}) - b \leq \varepsilon + \xi_{\vartheta}^*, \vartheta = 1, \dots, S \quad (2.23)$$

$$(\mathbf{w}^T \mathbf{u}_{\vartheta}) + b - y_{\vartheta} \leq \varepsilon + \xi_{\vartheta}, \vartheta = 1, \dots, S \quad (2.24)$$

$$\xi_{\vartheta}^* \geq 0, \vartheta = 1, \dots, S \quad (2.25)$$

$$\xi_{\vartheta} \geq 0, \vartheta = 1, \dots, S \quad (2.26)$$

Ziel ist es, eine Funktion $f(\mathbf{u})$ zu finden, die sich maximal um ε von y_{ϑ} unterscheidet und so flach wie möglich verläuft. Durch Ableitung des Duals des Optimierungsproblems (dual formula) mithilfe eines Lagrange-Multiplikators ergeben sich neue Erkenntnisse, welche das Problem ggf. einfacher lösbar machen. Datenpunkte, die nicht in der Trennebene liegen, werden berücksichtigt. Ihre Stützvektoren sind für die Berechnung relevant.

Für nichtlineare Optimierungsprobleme (linear nicht trennbare Datenpunkte) findet der sogenannte Kernel-Trick [74] Anwendung, der eine stetige, symmetrische Kernfunktion k definiert, welche eine Überführung in einen höherdimensionalen Raum ermöglicht und in die Ausgangsgleichung (2.27) eingesetzt wird. Die Parameter α , α^* und b müssen berechnet werden, was im Falle von b nicht ganz trivial ist [75].

$$\hat{y} = \sum_{\vartheta=1}^S (\alpha_{\vartheta} - \alpha_{\vartheta}^*) k(\mathbf{u}_{\vartheta}, \mathbf{u}) + b \quad (2.27)$$

mit

α, α^*	Lagrange-Multiplikatoren, duale Variablen
k	Kernfunktionen für den nichtlinearen Fall, die die Mercer-Bedingung erfüllen müssen
b	Parameter

2.2.5 Überblick zu statischen Modellansätzen hinsichtlich deren Nutzung für dynamische Prozesse

Die in den Abschnitten 2.2.1 bis 2.2.4 angesprochenen Modellarchitekturen eignen sich für nichtlineare Systeme, die unabhängig vom zeitlichen Verlauf, also statischer Natur sind. In der vorliegenden Arbeit soll die Anwendbarkeit von Modellarchitekturen hinsichtlich dynamischer, nichtlinearer Prozesse untersucht werden. Dynamik impliziert die Zeitabhängigkeit eines Systems. Das bedeutet, dass der Systemausgang nicht nur vom aktuellen Eingangswert bzw. den aktuellen Eingangswerten abhängig ist, sondern von deren zeitlichen Verläufen vor dem aktuellen Zeitpunkt k . Mit dem Begriff „externe Dynamik“ werden Modellansätze bezeichnet, die Vergangenheitswerte eines Systems bzw. eines Prozesses am Modelleingang berücksichtigen, um den aktuellen Ausgabewert zu berechnen. Für die externe Dynamik kommen deshalb erst einmal alle oben genannten Modellansätze in Frage. Deshalb soll geprüft werden, welche Ansätze eine bessere Eignung beim Umgang mit hochdimensionalen Eingangsräumen aufweisen. Tabelle 2.1 fasst kurz die wichtigsten Vor- und Nachteile der genannten Verfahren zusammen, die der Literatúrauswertung entnommen werden können.

Im Hinblick auf das Hauptkriterium, nämlich der effektiven Datenverarbeitung bei hochdimensionalen Eingangsräumen, scheinen das MLP-Netz und die SVM am erfolgversprechendsten zu sein. Wird jedoch davon ausgegangen, dass der Eingangsvektor trotz Hinzunahme der Vergangenheitswerte relativ klein bleibt (ca. 4 Komponenten), ist es durchaus auch möglich, erfolgreich mit einer anderen Modellarchitektur zu arbeiten, die für hochdimensionale Eingangsräume als eher ineffektiv bezeichnet wird. So wurde bspw. in der Literatur ein LOLIMOT-Ansatz gewählt, mit welchem Testalgorithmen nach Hammerstein-, Wiener- und nichtlinearen Differenzialgleichungs-Ansätzen erfolgreich nachgebildet werden konnten [32]. In der Literatur [64][76][77] finden sich Anwendungsbeispiele, bei denen mit einem LOLIMOT-Ansatz NO_x - und Rußemissionen für den transienten Betrieb eines PKW-Dieselmotors simuliert wurden.

Tabelle 2.1: Übersicht zu Vor- und Nachteilen der vorgestellten Modellarchitekturen

Modellarchitektur	Vorteile	Nachteile
Rasterkennfeld (2.2.1)	<ul style="list-style-type: none"> • Benötigt wenig Rechenleistung • Nutzbar auf Geräten mit geringer Speicherkapazität • Direkte Nutzung der Messdaten, ohne Regression 	<ul style="list-style-type: none"> • Fluch der Dimensionalität, max. 4 Dimensionen, 1-2 sind wirklich praktikabel • Nicht-differenzierbar
Polynome (2.2.1)	<ul style="list-style-type: none"> • Linear in den Parametern 	<ul style="list-style-type: none"> • Ggf. oszillierendes Interpolations- und unerwünschtes Extrapolationsverhalten • Selektion wesentlicher Terme kann Fluch der Dimensionalität reduzieren.
KNN: MLP (2.2.2)	<ul style="list-style-type: none"> • Vielseitig anwendbar • Nichtlinearen Aktivierungsfunktionen können Nichtlinearitäten sehr gut nachgebildet • deshalb für hohe Eingangsdimension geeignet. 	<ul style="list-style-type: none"> • Findet nicht immer eine effiziente Lösung • Nichtlineares Optimierungsverfahren ist zeitaufwändig • Strukturoptimierung komplex • geringe Interpretierbarkeit
KNN: RBF (2.2.2)	<ul style="list-style-type: none"> • Schnelles und zuverlässiges Training mit linearen Optimierungsverfahren 	<ul style="list-style-type: none"> • Nichtlineares Optimierungsverfahren ist zeitaufwändig • Durch den lokalen Charakter eher ungeeignet für hohe Eingangsdimensionen
Fuzzy-logische Modelle (2.2.3)	<ul style="list-style-type: none"> • Sehr gut interpretierbar 	<ul style="list-style-type: none"> • Reagiert sensibel auf die gewählte Anzahl der Zugehörigkeitsfunktionen und Regeln • Ungeeignet für hochdimensionale Eingangsräume
Neuro-Fuzzy-Modelle, speziell: LOLIMOT (2.2.3)	<ul style="list-style-type: none"> • Effizienter Trainingsalgorithmus • Modellkomplexität wird beim Training angepasst • relativ gute Interpretierbarkeit 	<ul style="list-style-type: none"> • Ineffektiv für hochdimensionale Probleme bei Achsenorthogonalität im Eingangsraum
Support-Vektor-Maschinen (2.2.4)	<ul style="list-style-type: none"> • geeignet für hochdimensionale Eingangsräume, da kein Einfluss auf die Modellkomplexität besteht 	<ul style="list-style-type: none"> • nicht robust gegen starkes Messrauschen • Ermittlung der (Hyper-) Parameter ist nicht trivial • eingeschränkte Interpretierbarkeit

Auch ein Takagi-Sugeno-Kang Fuzzy Model soll unter bestimmten Bedingungen für Dynamik geeignet sein [69].

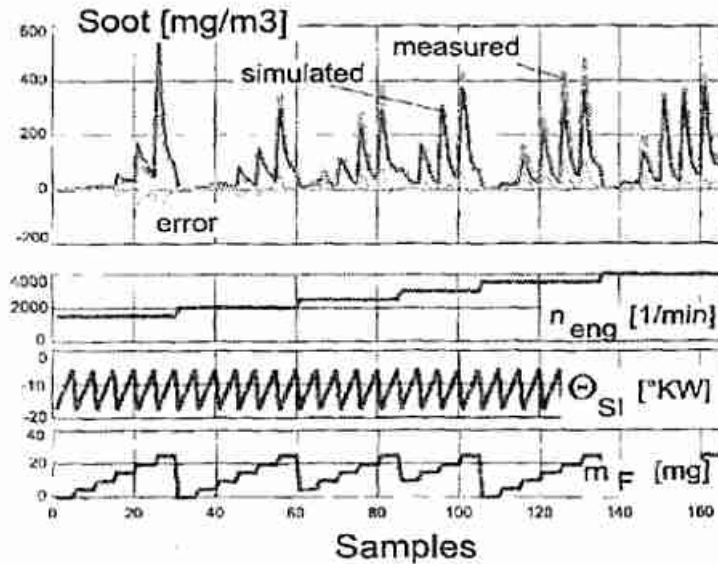


Abbildung 2.13: LOLIMOT mit drei Eingangsgrößen (Brennstoffmasse, Maschinendrehzahl und Einspritzwinkel), 15 versteckten Neuronen und Ruß als Ausgangsgröße [77, S. 8156].

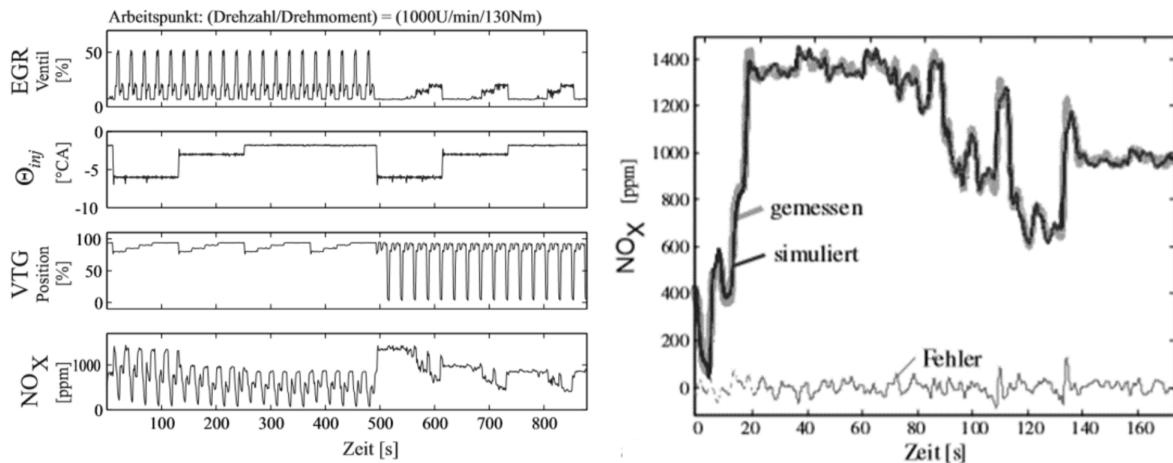


Abbildung 2.14: Trainingsdaten für die Berechnung von Stickoxiden (NO_x) in Abhängigkeit von Abgasrückführungsventil (EGR), Einspritzwinkel (Θ) und Position der Turbolader-Leitschaufeln (VTG) (links) und deren Nachbildung mithilfe eines MLP-Modells mit interner Dynamik (rechts) [33].

Wird berücksichtigt, dass Dynamik auch über die sogenannte „interne Dynamik“ erfolgen kann, dann rücken andere Kriterien, wie bspw. die Stabilität in den Vordergrund (vgl. 2.4.3). Abb. 2.14 zeigt beispielhaft eine Anwendung mit einem MLP-Netz mit interner Dynamik mit drei Eingangsgrößen „Öffnung von Abgasrückführungsventil“ (EGR), „Einspritzwinkel“

Θ sowie „Position der Turbolader-Leitschaufeln“ (VTG) und der Ausgangsgröße „Stickoxide“ (NO_x). Links sind die Trainingsdaten zu sehen, rechts ein Ausschnitt aus der Simulation.

Dieser Überblick zur Literatur datenbasierter Modelle mit den Schwerpunkten dynamische Prozesssimulation und dieselmotorische Prozesse bzw. Emissionsentstehung erhebt keinen Anspruch auf Vollständigkeit. Die Literaturrecherche hat keine Ergebnisse erbracht, welche die Motivation dieser Arbeit bereits zufriedenstellend beantworten würde, dafür aber zahlreiche, nützliche Hinweise, in welche Richtung Untersuchungen vertieft werden können. Nachstehender Abschnitt führt eine Diskussion zur Modellwahl auf Grundlage der obigen Erkenntnisse.

2.3 Modellwahl

2.3.1 Theoretisches vs. datenbasiertes Modell

Das zu entwickelnde Partikelemissionsmodell soll

- den insgesamt gemessenen Partikelmassenstrom (vgl. 3.2.2) widerspiegeln und
- mehrfache Echtzeitfähigkeit besitzen, um innerhalb einer Sekunde Rechenzeit als Untermodell eines mathematischen Schiffsmodells (vgl. 1.1) Vorhersagen für mehrere Minuten treffen zu können.

Beide Vorgaben können von den derzeit vorhandenen theoretischen Ruß- oder Partikelmodellen nicht erfüllt werden, was die Wahl eines empirischen Modellansatzes begründet. In Tabelle 2.1 wurden mehrere Verfahren für statische nichtlineare Anwendungen zusammenfassend dargestellt. Die KNN des Typs MLP sowie auch die SVM, bzw. die Support-Vektor-Regression SVR, haben sich während der Literaturrecherche als sehr interessant für den gesuchten Lösungsansatz erwiesen. Aufgrund ihres höheren Bekanntheitsgrades in der Literatur wurde entschieden, den Fokus für die weitere Diskussion auf die MLP-Netze zu richten. Nicht nur für statische Anwendungen werden sie häufig eingesetzt, sondern auch zur Modellierung dynamischer, nichtlinearer Systeme.

2.3.2 Modellstrukturen

Dynamische Systeme sind dadurch gekennzeichnet, dass ein Speichereffekt vorhanden ist, der sich Werte bzw. Verläufe aus der Vergangenheit explizit oder implizit „merkt“. Über das Filter $G(q^{-1})$ wird ein zeitdiskretes Eingangssignal mit seinen Vergangenheitswerten dem Modell oder einem Prozesselement zugeführt. Der Zeitverschiebeoperator q^{-1} hat dabei folgende Bedeutung:

$$u(k)q^{-1} = u(k-1) \quad (2.28)$$

mit

- u hier als Eingangsgröße in das Modell oder Prozesselement
- k als aktuellen, diskreten Zeitpunkt.

Nicht nur für Eingangswerte, sondern auch für Ausgabewerte kann dieser Speichereffekt genutzt werden. Mit anderen Worten: Auch gemessene oder simulierte Vergangenheitswerte der Ausgangsgröße (y bzw. \hat{y}) können in den Modelleingangsraum zurückgeführt werden. Je nach

Art der Berücksichtigung von Werten aus der Vergangenheit wird zwischen Gleichungsfehler- und Ausgangsfehlermodellen unterschieden.

Gleichungsfehlermodelle

Gleichungsfehlermodelle sind durch eine Rückführung der gemessenen Systemausgänge y über das Filter $G(q^{-1})$ in den Modelleingangsraum gekennzeichnet. Sie werden auch als seriell-parallele Modelle bezeichnet. Die vergangenen Systemausgangswerte können die einzige Eingangsgröße zum Modell darstellen und geben den Modellunterklassen aufgrund der Rückführung dieser Information die Zusatzbezeichnung „autoregressive“ (AR). Die Unterklassen, die zusätzlich zum zurückgeführten Ausgangswert mit externen Eingangsgrößen \mathbf{u} beaufschlagt werden, erhalten den Zusatz „X“ (für „exogenous input“) hinter dem Kürzel AR. Mit dem Buchstaben „N“ wird darauf hingewiesen, dass es sich um ein nichtlineares bspw. ARX-Modell handelt. Die Notation eines NARX-Modells lautet:

$$\hat{y} = f(u(k-1), \dots, u(k-r), y(k-1), \dots, y(k-r)) \quad (2.29)$$

mit

r dynamische Ordnung, Anzahl der Vergangenheitswerte

Ausgangsfehlermodelle

Ausgangsfehlermodelle laufen parallel zum realen Prozess ab. Ein wichtiger Vertreter dieser Modelle ist die Unterklasse der „output error“-Modelle mit dem Kürzel OE. Das nicht-lineare OE-Modell ist eng mit dem ARX-Modell verwandt: OE-Modelle führen jedoch die simulierten Modellausgänge \hat{y} über das Filter $G(q^{-1})$ in den Simulationsprozess zurück, wie Gleichung(2.30) zeigt:

$$\hat{y} = f(u(k-1), \dots, u(k-r), \hat{y}(k-1), \dots, \hat{y}(k-r)) \quad (2.30)$$

Durch die Rückführung bietet sich zwar der Vorteil zusätzlicher Information, andererseits kann die Stabilität eine erhebliche Beeinträchtigung erfahren [32]. (N)OE-Modelle sind aufgrund der Rückführung immer nichtlinear in den Parametern, d.h. iterative Parameterschätzverfahren werden auch bei linearen Modellen notwendig. Ausgangsfehlermodelle existieren jedoch auch ohne Rückführung, als „echt parallele Modelle“ [52]. Die Unterklasse der (N)FIR-Modelle, also der (nichtlinearen) Filter mit endlicher Impulsantwort (engl. „finite impulse response filter“), kommt ohne jegliche Rückführung aus.

MLP-Netze können sowohl Ausgangs- als auch Gleichungsfehlermodelle darstellen. Für die vorliegenden Untersuchungen werden Gleichungsfehlermodelle ausgeschlossen, da eine Rückführung gemessener Systemausgänge nicht Bestandteil des angestrebten Modells sein wird. Das Modell soll parallel zum realen Prozess Vorhersagen treffen resp. unabhängig davon simulieren können.

In Kapitel 5 werden ausschließlich Ausgangsfehlermodelle betrachtet. In erster Linie wird der Fokus auf die NFIR-Modellstruktur gelegt und MLP-Netze mit externer Dynamik betrachtet (5.1). MLP-Netze mit interner Dynamik (5.2) weisen äußerlich ebenfalls eine NFIR-Modellstruktur auf, ihre Prozesselemente beinhalten aber ein IIR-Filter, d.h. ein Filter mit

unendlicher Impulsantwort (engl. „infinite impulse response“). Die Filterausgänge werden über Zeitverschiebeoperatoren q^{-1} diesem Untermodell wieder zugeführt. Der Begriff IIR-Filter entstammt der digitalen Signalverarbeitung. In der Zeitreihenanalyse werden diese Strukturen auch als ARMA-Modelle (engl. „autoregressive moving average“) bezeichnet [78]. Unter dem Begriff ARMA-Modell wird im dritten zu untersuchenden Ansatz (5.3) ein eigenständiges OE-Modell bezeichnet, welches die dynamischen Anteile des Partikelmassenstroms abbilden soll.

Auf die Theorie der MLP-Netze wird im nächsten Abschnitt eingegangen, ausgehend von stationären MLP-Netzen (2.4.1) bis hin zu den beiden Erweiterungsmöglichkeiten mit externer (2.4.2) bzw. interner (2.4.3) Dynamik.

2.4 Theoretische Betrachtung ausgewählter Modellarchitekturen

Die Methode „Künstliches Neuronales Netz“ offeriert eine beachtliche Auswahl an Modellarchitekturen, die allesamt Informationen parallel verarbeiten können. Die Verarbeitungsrichtung ist durch eine vordefinierte, unidirektional gerichtete Verbindung zwischen einzelnen Prozesselementen (Neuronen) gegeben. Jedes Prozesselement hat beliebig viele Eingänge, besitzt eine Aktivierungsfunktion und gibt einen Ausgabewert aus. Prozesselemente können auch lokale Speicher besitzen.

2.4.1 Theorie zu stationären MLP-Netzen

Ein Multi-Layer-Perceptron-Netz, d.h. ein KNN mit Perzeptronen, die sich in mehreren Schichten des Netzes befinden, wurde bereits in der Übersicht in 2.2.2 auf Seite 21 kurz umrissen.

Das Perzeptron

Ein Perzeptron ist die einfachste Form eines KNN und soll an dieser Stelle zur Erläuterung dienen. Es besteht aus nur einem Neuron, welches einen Eingabevektor \mathbf{u} auf einen Ausgabewert \hat{y} abbildet. Es handelt sich dabei um einen Assoziativspeicher. Anhand des Perzeptrons lassen sich Begriffe aus der Theorie der KNN und deren Wirkung sehr gut beschreiben.

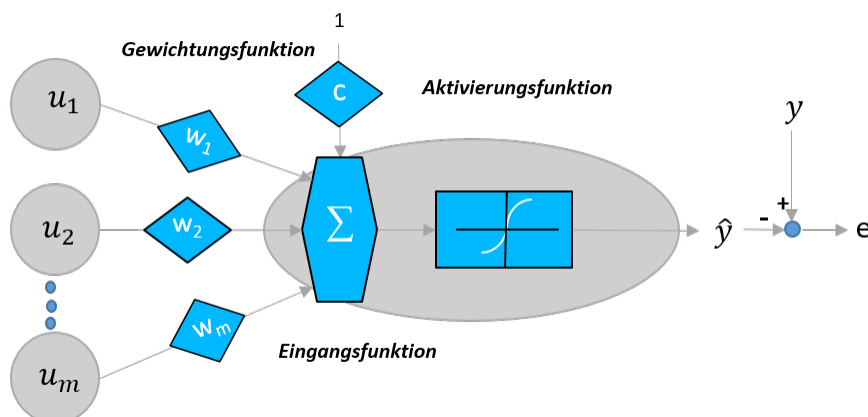


Abbildung 2.15: Schematische Darstellung der Funktionen, die in jedem mathematischen Neuron durchlaufen werden: Gewichtungsfunktion, Eingangsfunktion & Aktivierungsfunktion.

Abb. 2.15 zeigt graphisch, was die Gleichungen (2.9) und (2.10) auf Seite 24 beschreiben: In einem ersten Schritt werden die Eingangswerte \mathbf{u} mit \mathbf{W} gewichtet und anschließend aufsummiert. Die sich für jedes Neuron ergebende Zwischensumme x_j geht, mit dem Schwellenwert verrechnet, als Abszissenwert in die Aktivierungsfunktion $\varphi(z_j)$ ein. Der mit c_j gewichtete Schwellenwert wird in der Eingangsfunktion subtrahiert. Der Ausgangswert des Neurons h_j entspricht im Falle eines einzelnen Perzeptrons dem Modellausgangswert \hat{y}_k , weshalb beim einzelnen Perzeptron gilt: $n = p = 1$. Ist mehr als ein Eingangswert vorhanden und unterscheiden sich diese um Größenordnungen, dann empfiehlt sich eine Normierung der Ein- und Ausgabewerte.

Die Synapsen- und Schwellenwertgewichte sind die eigentlichen Modellparameter. Die Gewichtungsfunktion legt die Intensität fest, mit der die Eingangswerte beim Neuron ankommen. Hat ein Eingangswert keinen Einfluss auf den Modellausgang, so wird sein Synapsengewicht zu null. Etwas besonders verhält es sich mit dem Schwellenwert, auch Bias (zu Dt. Verschiebung) genannt. Sein Ursprungswert ist immer 1 und seine Gewichtung c_j bewirkt eine Verschiebung von x_j entlang der Abszisse der Aktivierungsfunktion.

Aktivierungsfunktionen können Sprungfunktionen sein oder, wie im Allgemeinen üblich, monoton steigende (stückweise) lineare oder nichtlineare, sigmoide Funktionen (vgl. Abb. 2.11 auf Seite 24). Der Funktionswert der Aktivierungsfunktion bestimmt den Ausgabewert des Perzeptrons. Die logistische Sigmoidfunktion und die Sigmoidfunktion Tangens hyperbolicus werden wegen ihrer guten Differenzierbarkeit in KNN sehr häufig verwendet. Die Differenzierbarkeit der Aktivierungsfunktion ermöglicht erst das Anlernen der Gewichte, bspw. über den Backpropagation-Algorithmus, der bei KNN mit mehr als einem Perzeptron eine große Bedeutung erreicht hat.

Das MLP-Netz

Beim MLP-Netz handelt es sich, wie beim Perzeptron, um ein Assoziativspeichermodell. Während das Perzeptron-Netz die Eingangsgrößen direkt auf das Ausgangsneuron abbildet, existiert beim MLP-Netz mindestens eine sogenannte versteckte Schicht (engl. „hidden layer“), auch Zwischenschicht genannt. Um die Bezeichner und Indizes im Folgenden richtig zuzuordnen zu können, sei an dieser Stelle auf Abb. 2.9 auf Seite 22 verwiesen. In Abb. 2.15 wurden die Bezeichner entsprechend verwendet.

In einem vorwärts gerichteten MLP-Netz können die in Abb. 2.15 genannten Gewichts-, Eingangs- und Aktivierungsfunktionen folgendermaßen zusammengefasst notiert werden:

$$h_j = \varphi(z_j) = \varphi\left(\sum_{i=1}^m w_{ij}u_i - c_j\right) \quad (2.31)$$

mit

h_j	Ausgangswert des j-ten Neurons
z_j	Argument für die Aktivierungsfunktion
w_{ij}	Gewicht zwischen i-tem Eingangswert und j-tem Neuron
u_i	i-ter Eingangswert
c_j	Synapsengewicht des j-ten Neurons
φ_j	Aktivierungsfunktion des j-ten Neurons

Als Aktivierungsfunktion wurde der üblicherweise verwendete Tangens hyperbolicus gewählt, weshalb aus (2.31) Gleichung (2.32) wird:

$$h_j = \tanh\left(\sum_{i=1}^m w_{ij}u_i - c_j\right) = \frac{2}{1 + e^{-2(\sum_{i=1}^m w_{ij}u_i - c_j)}} - 1 \quad (2.32)$$

Als Startwerte für die Gewichte \mathbf{W} und \mathbf{c} dienen Zufallswerte im Intervall $[-1,1]$. Es existieren zwar für gewisse Anwendungen Methoden, die Gewichtsmatrizen zu Beginn bereits in eine bestimmte Richtung zu lenken [32]. Diese werden hier jedoch nicht näher betrachtet und in der Umsetzung nicht verwendet. Bei einem vorwärts gerichteten MLP-Netz mit nur einem Ausgabewert ($p = 1$) lautet die Berechnungsvorschrift:

$$\hat{y} = \sum_{j=1}^n w_{jk} \tanh\left(\sum_{i=1}^m w_{ij}u_i - c_j\right) - c_k \quad (2.33)$$

mit

w_{jk} Synapsengewicht zwischen j-tem Neuronenausgangswert und k-tem Ausgangsneuron
 c_k Schwellenwertgewicht des k-ten Ausgangsneurons

Es ist üblich, das Ausgangsneuron mit einer linearen Aktivierungsfunktion zu versehen.

Hyperparameter

Bevor die eigentlichen Modellparameter ermittelt werden, sollten erst die Hyperparameter festgelegt werden, ein Vorgang der auch als Hyperparameter Tuning bezeichnet wird [79]. Als Hyperparameter werden Parameter bezeichnet, welche die Rahmenbedingungen für das Modelltraining definieren [80]. Die wichtigsten für das Anlernen eines MLP-Netzes sind:

- die Anzahl der versteckten Neuronen n ,
- die Aktivierungsfunktion $\varphi(z_j)$,
- die Anzahl Zwischenschichten N ,
- die Lernrate α ,
- die Größe eines Batches⁶
- die Anzahl Epochen, welche die Anzahl der Trainingsdurchläufe mit jeweils allen vordefinierten Batches bezeichnet.

In der Praxis stellt sich die Suche nach den passenden Hyperparametern als eine Herausforderung dar, der mit Faustregeln, Erfahrung und heuristischer Suche begegnet wird [82].

⁶ Der Begriff „Batch“ beschreibt ein Set von einem oder mehreren zeitlich zusammengehörenden Eingangs-/Ausgangsdatenpaare θ . Wenn die Batchgröße = 1 angegeben wird, dann handelt es sich um ein Single Sample, wenn alle Messzeitpunkte gleichzeitig bewertet werden, dann wird oft von dem einen Batch gesprochen. Werden Untergruppen gebildet, werden diese als Mini-Batches bezeichnet [81].

Backpropagation-Algorithmus

Sigmoide Aktivierungsfunktionen sind nichtlinear in den Parametern, was dazu führt, dass die Synapsen- und Schwellenwertgewichte nicht direkt über die Methode der kleinsten Fehlerquadrate geschätzt werden können. Ein implizites, iteratives Optimierungsverfahren wird notwendig [31]. Die Schätzung erfolgt über den standardmäßigen Backpropagation-Algorithmus (BP-Algorithmus), der in der hier genutzten Form in [59] beschrieben ist. Der BP-Algorithmus eignet sich für überwachtes Lernen, was bedeutet, dass iterativ in jeder Trainingsepoche für jedes (Mini-)Batch, bzw. Single Sample, ein Vergleich zwischen Modellausgang \hat{y} und Zielwert y erfolgt, wie in Abb. 2.15 rechts dargestellt ist. Der Fehler e wird durch das Netz „zurückpropagiert“, was dem Algorithmus den Namen verleiht.

Zur Anwendung des BP-Algorithmus‘ muss die Verlustfunktion J bestimmt und partielle Ableitungen nach den Gewichten c und w vorgenommen werden.

$$J = \frac{1}{2}(y - \hat{y})^2 \quad (2.34)$$

Ziel ist es, die Verlustfunktion (2.34) durch Anpassung der Gewichte w und c zu minimieren.

$$J = f(w, c) \rightarrow \min \quad (2.35)$$

Das BP-Verfahren ist eine Lernmethode, die mithilfe der (mehrfachen) Kettenregel die partiellen Ableitungen der Verlustfunktion nach den einzelnen Gewichten berechnet und somit den Einfluss einer Gewichtsänderung Δw bzw. Δc auf den Modellfehler e bestimmt. Gleichung (2.36) zeigt die Ableitung nach einem Gewicht der Ausgangsschicht P.

$$\frac{\partial J}{\partial w_{jk}^P} = \frac{\partial J}{\partial \hat{y}} \cdot \frac{\partial \hat{y}}{\partial w_{jk}^P} = (y - \hat{y}) \cdot h_j \quad (2.36)$$

Für die Zwischenschicht N lautet die Berechnung entsprechend Gleichung (2.37):

$$\frac{\partial J}{\partial w_{ij}^N} = \frac{\partial J}{\partial \hat{y}} \cdot \frac{\partial \hat{y}}{\partial h_j} \cdot \frac{\partial h_j}{\partial z_j^N} \cdot \frac{\partial z_j^N}{\partial w_{ij}^N} = (y - \hat{y}) \cdot w_{jk}^P \left[1 - \tanh^2 \left(\sum_{i=1}^m w_{ij}^N u_i - c_j \right) \right] u_i \quad (2.37)$$

Für die Gewichte der Schwellenwerte wird die partielle Ableitung analog der obigen Verfahren durchgeführt. Anschließend erfolgt die Anpassung der Gewichte:

$$w \rightarrow w' = w - \alpha \frac{\partial J}{\partial w} \quad \text{bzw.} \quad c \rightarrow c' = c - \alpha \frac{\partial J}{\partial c} \quad (2.38)$$

mit

w' bzw. c' neuer Wert für das jeweilige Gewicht

α Lernrate

Anhand der Lernrate α wird bestimmt, um welchen Anteil des Gradienten ∇J das jewei-

lige Gewicht in Richtung des Gradienten verändert wird. Eine passende Lernrate α ist über das Hyperparameter Tuning experimentell zu bestimmen, was bei einem Verfahren mit fester Schrittweite und sehr steilem negativen Gradienten ein Problem darstellen kann: Ist die Lernrate zu groß, kann dies zu einem Oszillieren um das (lokale) Optimum führen, ist sie zu klein, wird die Konvergenz verlangsamt und Anzahl benötigter Trainingsepochen steigt. Eine in [83] diskutierte Lösung dafür ist die dynamische Anpassung der Lernrate.

Das Ergebnis der Backpropagation ist meist ein lokales Optimum oder lediglich eine Näherung desselben. Welches (lokale) Optimum angestrebt wird, hängt stark von der Wahl der Startwerte für die Synapsengewichte und Schwellengewichte ab. An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass unabhängig von den in Abschnitt 3.4 festgelegten Bewertungskriterien die nichtlineare Optimierung nach dem Verfahren des BP-Algorithmus' lediglich eine Minimierung der Abweichung zwischen aktueller Netzausgabe und erwartetem Ausgabewert zum Ziel hat.

Verzerrung-Varianz-Dilemma

Die Anzahl Gewichte bei einer einzigen Zwischenschicht errechnet sich mit:

$$\text{Anzahl_Parameter} = n(m + 1) + p(n + 1) \quad (2.39)$$

Eine Aufgabe der Modellbildung ist es, die Parameteranzahl derart zu bestimmen, dass dem Verzerrung-Varianz-Dilemma (engl. „bias-variance trade-off“) zumindest näherungsweise begegnet wird. Jener Punkt sollte gefunden werden, an dem Verzerrungs- und Varianzfehler möglichst klein sind. Bei Erhöhung der Anzahl der Modellparameter verlaufen die beiden Fehlerkurven entgegengesetzt. Wird die Modellkomplexität zu gering gewählt, dann dominiert der Verzerrungsfehler. Dabei handelt es sich um einen systematischen Fehler aufgrund fehlender Modellflexibilität (Unteranpassung). Der Fehler kann verkleinert werden, indem die Modellkomplexität erhöht wird. Je komplexer das Modell, desto dominanter wird jedoch der Varianzfehler. Begrenzte Datensätze und verrauschte Messdaten führen dazu, dass im ungünstigsten Fall das Modell perfekt an die Messwerte und deren Rauschen angepasst wird (Überanpassung). Dem Varianzfehler kann mit geringerer Modellkomplexität und großen Trainingsdatensätzen begegnet werden [84][32].

Im Zusammenhang mit KI ist es wichtig, eine Überanpassung zu vermeiden. Ziel ist nicht das Auswendiglernen von Trainingsdatensätzen, sondern die Fähigkeit, das Gelernte gut generalisieren zu können. Die Gewichte der angelernten neuronalen Modelle speichern über das gesamte Netz verteilt die Informationen. Kleinen Störungen gegenüber verhält sich das Modell relativ robust. So können bspw. in der Mustererkennung von den Trainingsbildern leicht abgewandelte Bilder dem Netz vorgeführt werden, während dieses den richtigen Begriff dem jeweiligen Bild zuordnet. Diese Robustheit aufgrund von verteilter Information hat den Nachteil, dass es schwierig oder gar unmöglich wird, die Wirkung eines einzelnen Neurons zu verstehen. Anders ausgedrückt: „Sie (die KNN) sind in der Lage, ohne ein explizites Ähnlichkeitsmaß Assoziationen zu ähnlichen Objekten herzustellen. Allerdings gibt es keine Garantie für die ‚richtige‘ Lösung, ähnlich wie bei der heuristischen Suche oder bei menschlichen Entscheidungen“ [21, S. 260f].

2.4.2 Theorie zu KNN mit externer Dynamik

Der Begriff „Künstliche Neuronale Netze mit externer Dynamik“ ist der Terminologie von Isermann (vgl. u. a. [33]) entliehen. Die Dynamik eines Prozesses wird von außen, also extern, dem Modell übergeben, so dass sich der Modelleingangsraum um eine gewisse Anzahl von Daten aus der Vergangenheit vergrößert (Abb. 2.16).

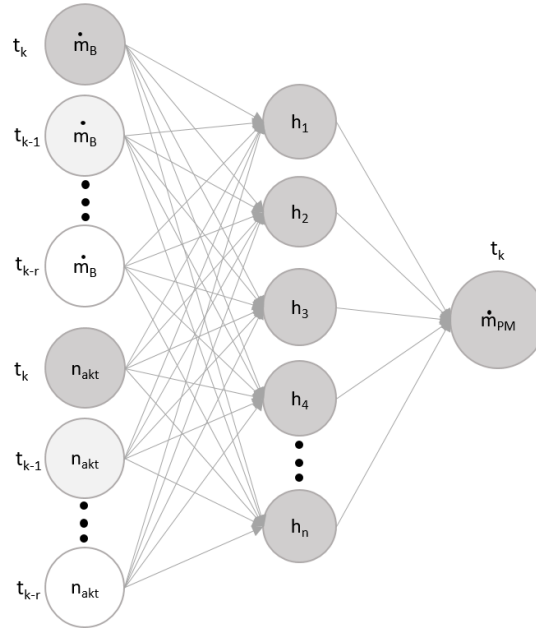


Abbildung 2.16: Schematische Darstellung eines KNN mit externer Dynamik. Mit k wird der jeweils aktuelle, mit $k - r$ der zeitlich am weitesten zurückliegende Eingangswert bezeichnet.

Diese Methode wird oft auch als „Time Delay Neural Network“ (zu Dt. Neuronales Netz mit Zeitverzögerung) bezeichnet. Eine externe Dynamik kann rein theoretisch jeder statischen Modellarchitektur aufgeprägt werden, wodurch die Dimension des Eingangsraums je nach Prozessdynamik und Anzahl der relevanten Eingangsgrößen sehr groß werden kann. Sie stellt somit einen quasistatischen Ansatz dar. Abb. 2.17 zeigt anhand eines Beispiels, wie die externe Dynamik zu verstehen ist. Seien A und B zwei Sensorwerte. Es soll gelten $B(k = 1) \approx f(A(k = 1))$ und $B(k = 2) \approx f(A(k = 2))$, d.h. die Messwerte von Sensor B sind abhängig von den Größen, die Sensor A anzeigt. Die Funktion $f()$ kann eine der oben genannten Modellarchitekturen repräsentieren und nach Anlernen mit zahlreichen Messdaten ein statisches Kennfeld mit Eingang A und Ausgang B beschreiben.

Werden nun die Messdaten der Sensoren A und B beim Hochfahren des Motors von A_1 nach A_2 aufgezeichnet, dann stimmen für Anfangs- und Endpunkt die Zusammenhänge zwischen B und A zwar noch gemäß des statischen Zusammenhangs, die Zwischenwerte weichen jedoch von den Vorhersagen des statischen Modells ab. Es ist nicht mehr möglich, eindeutig von A auf B zu schließen. Werden die Messversuche wiederholt, und zeichnet es sich ab, dass eine Wiederholbarkeit der Messverläufe gewährleistet ist, dann kann geschlussfolgert werden, dass anhand von r Vergangenheitswerten von Messreihe A auf Messwert B zum aktuellen Zeitpunkt geschlossen werden kann. Das Muster des Messwerteverlaufs von A lässt dann eindeutig auf den aktuellen Wert von B schließen. Die Herausforderung ist nun herauszufinden, wie viele

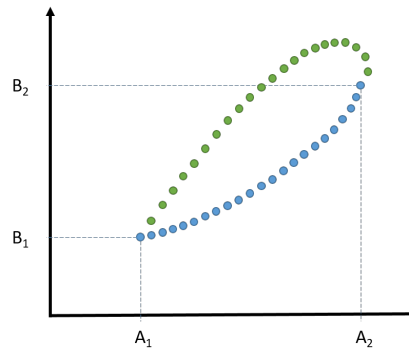


Abbildung 2.17: Qualitativer Vergleich von statischen Messpunkten im Kennfeld (blaue Punkte) und transientem Verlauf zwischen den Wertepaaren (A_1/B_1) und (A_2/B_2) (grüne Punkte)

vergangene Messdaten von A ($A(k), \dots, A(k-r)$) notwendig sind, um eine eindeutige Aussage für B zum Zeitpunkt k zu finden. Die Anzahl r der festgelegten Vergangenheitswerte multipliziert mit der Anzahl unterschiedlicher Sensor- oder auch Rückführungswerte, gibt einen Hinweis auf die Dimension des Eingangsraums beim quasistatischen Modell. In Kapitel 5 wird diese Herangehensweise praktiziert, wobei auf die Rückführung von Ausgangswerten gänzlich verzichtet wird. Abgesehen von der Vergrößerung des Eingangsraums durch Werte aus der Vergangenheit ist die theoretische Beschreibung dieser Methode identisch mit den Erläuterungen zum statischen MLP-Netz aus dem vorangegangenen Unterabschnitt. Die dynamische Ordnung r , d.h. die Anzahl Vergangenheitswerte, ist ein zusätzlicher Hyperparameter, den es für die dynamische Prozesssimulation zu bestimmen gilt [80].

In der Sprache der KI-Wissenschaft handelt es sich bei den KNN mit externer Dynamik um ein Mustererkennungsverfahren. Je eindeutiger das Muster des Eingangsvektors ist, desto größer ist die Wahrscheinlichkeit, dass der Ausgangswert bestimmbar ist. Die Bestimmbarkeit und Güte des Ausgabewertes hängt jedoch auch von den anderen Hyperparametern ab, welche bereits bei den theoretischen Erläuterungen zum stationären MLP-Netz Erwähnung gefunden haben.

2.4.3 Theorie zu KNN mit interner Dynamik

Im Rahmen seiner Dissertation [61] hat sich Ayoubi ausgiebig mit Architekturen Neuroner Netze mit interner Dynamik beschäftigt, insbesondere mit der Methode, die er als „Neural Network with locally distributed dynamics“ bezeichnet. Diese hat er erfolgreich für die Simulation von dynamischen Motorprozessen angewendet. Die ursprüngliche Bezeichnung „Locally recurrent globally feedforward (LRGF) architecture with infinite impulse response (IIR) synapse multilayer perceptron (MLP)“⁷ geht auf Tsoi und Back [85] zurück. Die Ausprägungen von KNN mit interner Dynamik sind vielseitig, wie bspw. Barbounis et al. [86] anhand von praktischen Beispielen darlegt. Das LRGF-IIR-MLP-Netz, wie Ayoubi es angewendet hatte, ist eine Möglichkeit, die im Folgenden konkreter vorgestellt wird.

Der Aufbau eines LRGF-IIR-MLP-Netzes gestaltet sich äußerlich wie ein statisches MLP-

⁷ zu Dt. „Mehrschichtiges Perzeptron (MLP) mit lokal rekursiver, global vorwärtsgerichteter (LRGF) Architektur mit Synapsen mit unendlicher Impulsantwort (IIR)“

Netz, wie dies bspw. in Abb. 2.9 auf Seite 22 dargestellt ist. Statt einer Erweiterung mit einem vergrößerten Eingangsraum, wird das statische Modell mit internen Speichern versehen und mit IIR-Filtern als Untermodelle ergänzt. Abb. 2.18 zeigt eine schematische Darstellung eines solchen KNN mit interner Dynamik.

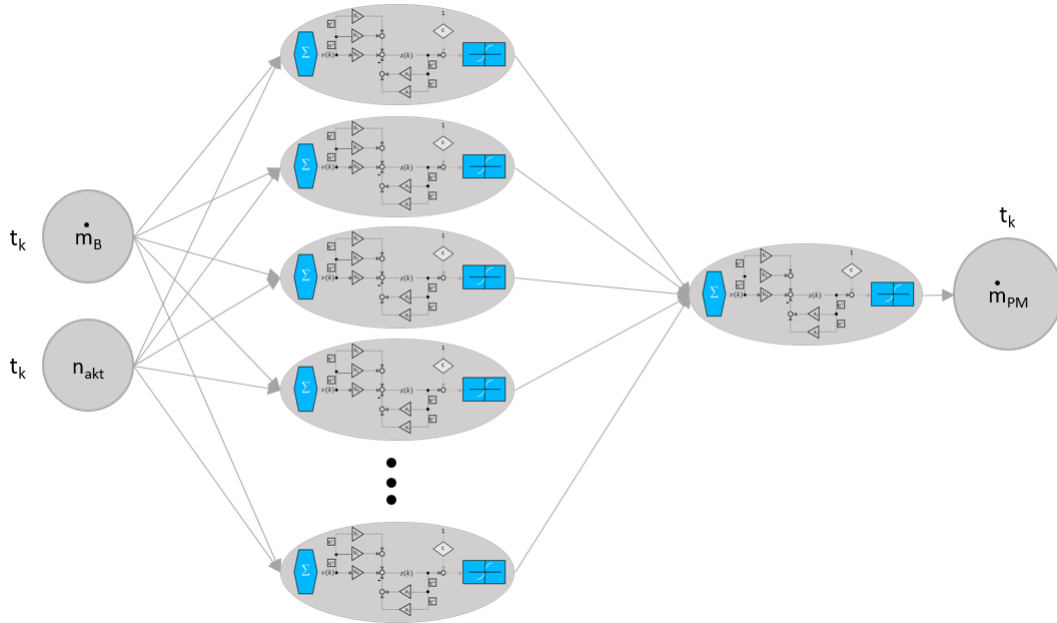


Abbildung 2.18: Schematische Darstellung eines KNN mit interner Dynamik auf Basis von IIR-Filtern, die als interne Speicherelemente dienen.

Abb. 2.19 zeigt ein einzelnes Perzeptron mit lokaler Rückkopplung vor der Aktivierungsfunktion. Das Filter, welches die interne Dynamik bewirkt, bezeichnet eine unendliche Impulsantwort (IIR). Es wird durch Gleichung (2.40) dargestellt.

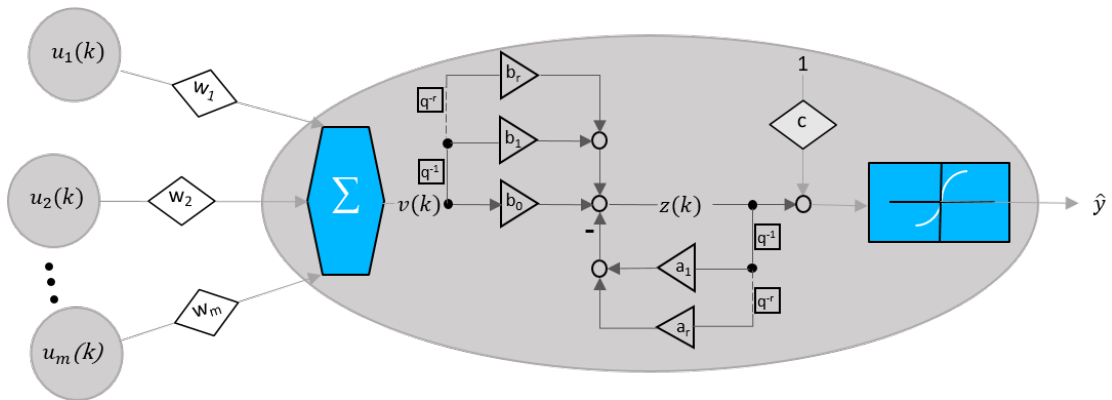


Abbildung 2.19: Schematische Darstellung eines Prozesselements mit interner Dynamik nach Ayoubi [61] mit den Synapsengewichten \mathbf{w} und dem Schwellenwert c . Zwischen der summenbildenden Eingangsfunktion und der Aktivierungsfunktion befindet sich ein lokales IIR-Filter mit den Parametern \mathbf{a} bzw. \mathbf{b} .

$$z(k) = b_0 v(k) + b_1 v(k-1) + \dots + b_r v(k-r) - a_1 z(k-1) - \dots - a_r z(k-r) \quad (2.40)$$

mit

$\mathbf{b} = [b_0, b_1, \dots, b_r]$	Parametervektor für die Filtereingangswerte v
$\mathbf{a} = [a_1, \dots, a_r]$	Parametervektor für die Filterausgangswerte z
r	Filtergrad bzw. -ordnung

Dieses Untermodell bzw. Filter ist linear. Der jeweils aktuelle Filterausgangswert $z(k)$ bildet das Argument für die Aktivierungsfunktion des Prozesselements bzw. des Neurons. Die Anzahl der zu bestimmenden Gewichte und Filterkoeffizienten eines MLP-Netzes mit interner Dynamik mit einer einzelnen Zwischenschicht N errechnet sich anhand von Gleichung (2.41):

$$\text{AnzahlParameter} = n(m + f + 1) + p(n + f + 1) \quad (2.41)$$

mit

m	Anzahl der Eingangswerte
n	Anzahl der versteckten Neuronen
p	Anzahl der Ausgangsneuronen
f	Anzahl der Filterkoeffizienten a und b

Als Startwerte für die Gewichte \mathbf{w} und \mathbf{c} dienen Zahlenwerte sehr nahe Null [61]. Die Filterkoeffizienten werden mit $b_0 = 1$, die übrigen mit Werten im Intervall $(-1, 1)$ initiiert. Die Berechnungsvorschrift für ein verstecktes Neuron j lautet gemäß Gleichungen (2.42) bis (2.44):

$$h_j(k) = f(z_j(k)) = f\left(c_j + z_j(k)\right) \quad (2.42)$$

$$z_j(k) = b_{j,0} v_j(k) + b_{j,1} v_j(k-1) + b_{j,2} v_j(k-2) - a_{j,1} z_j(k-1) - a_{j,2} z_j(k-2) \quad (2.43)$$

$$v_j = \sum_{i=1}^m w_{ij} u_i \quad (2.44)$$

mit

k	aktueller Zeitpunkt
h_j	Ausgangswert des j -ten Neurons
z_j	Argument für die Aktivierungsfunktion des j -ten Neurons
c_j	Schwellenwertgewicht des j -ten Neurons
$b_{j,0}, b_{j,1}, b_{j,2}, a_{j,1}, a_{j,2}$	Filterkoeffizienten des j -ten Neurons (bei Filter 2. Ordnung)
v_j	Eingangswert des IIR-Filters des j -ten Neurons
u_i	i -ter Modelleingangswert
w_{ij}	Gewicht zwischen i -tem Eingangswert und j -tem Neuron

Ayoubi [61] benutzt sowohl eine RBF- als auch eine MLP-Architektur, um die interne Dynamik zu implementieren. Bei beiden Untersuchungen kommt er zum Schluss, dass es sich bei KNN mit interner Dynamik nicht mehr um universelle Approximatoren handelt, was für ein statisches MLP-Netz ansonsten der Fall ist.

2.5 Zusammenfassung und Fazit

Die theoretische Modellbildung (2.1) beschäftigt sich mit der physikalischen, thermodynamischen und reaktionskinetischen Beschreibung der Partikelentstehung. Bisher ist der Verfasserin kein entsprechendes Modell bekannt, welches den gesamten messbaren Partikelmassenstrom aus Verbrennungsmotoren abbilden kann. Allein die Rußmodellierung, welche sich mit dem Hauptbestandteil der verbrennungsmotorischen Partikelemissionen beschäftigt, stellt sich im stationären Betrieb keineswegs trivial dar. Entsprechend groß ist die Herausforderung, einen Berechnungsweg für Partikelaustritt im transienten Motorbetrieb zu finden. Durch Trägheiten, insbesondere bei der Ladeluftzufuhr, verhalten sich Verbrennungsluftverhältnis sowie Temperaturverteilung und -verlauf im Brennraum während des transienten Betriebes teilweise erheblich anders als im stationären Motorbetrieb.

Theoretische Modelle haben den Vorteil, dass die zugrundeliegenden Prozesse nachvollziehbar sind. Prozesswissen geht in die Modellbildung mit ein, was auch als „White-Box-Modellierung“ bezeichnet werden kann. Diese Modelle sind anschließend auch interpretierbar, was bedeutet, dass neues Prozesswissen mithilfe des Modells generiert werden kann. Außerdem können solche Modelle bereits vor der Inbetriebnahme zur Auslegung eines Prozesses dienen. Physikalische Grenzen sind existent, so dass keine gänzlich unplausiblen Extrapolationen zu erwarten sind. Diesen Vorteilen steht der Nachteil der relativ hohen Rechenzeiten entgegen, da der Motorinnenprozess mit $\leq 1^\circ\text{KW}$ (Grad Kurbelwinkel) oder mit der entsprechenden zeitlichen Auflösung gerechnet werden muss.

Die experimentelle Modellbildung (2.2) hingegen stützt sich auf Messdaten oder, sofern vorhanden, auch auf Simulationsdaten theoretischer Modelle. Sie bietet den Vorteil, relativ wenig Rechenzeit zu beanspruchen und kein oder nur wenig Prozesswissen für die Modellbildung zu benötigen. Nachteilig ist, dass sie einen relativ großen Trainingsdatensatz erfordert und teils eine stark eingeschränkte bzw. gar keine Interpretierbarkeit aufweist.

Angestrebt werden sollte auf alle Fälle, dass die Grenzen zu einem experimentellen Teilmodell so spät wie möglich gesetzt werden. Mit anderen Worten: Wird das Gesamtsystem, z.B. das Schiff, betrachtet, dann sollten so viele übergeordnete Prozesse wie möglich mit theoretischen Modellen beschrieben werden. Erst wenn mangels Information oder aufgrund zu hoher Rechenzeiten Teilprozesse nicht mehr theoretisch beschreibbar oder zu zeitintensiv sind, sollte auf ein datenbasiertes empirisches Modell ausgewichen werden. Bestenfalls erlaubt dieses noch, physikalisch sinnvolle Bedingungen und Erfahrungen zu berücksichtigen, sodass es sich nicht um ein reines „Black-Box-“ sondern um ein sogenanntes „Grey-Box-Modell“ handelt.

Nach eingehender Literaturrecherche fiel die Entscheidung auf die Wahl der Multi-Layer-Perzeptron-Netze, eine Klasse der KNN, zur Bearbeitung der Problemstellung (2.3). Die grundlegende Theorie zu den MLP-Netzen für stationäre und dynamische Anwendungen wurde dargestellt (2.4), so dass darauf aufbauend das halbempirische Modell in Kapitel 4 sowie drei experimentelle Modellansätze in Kapitel 5, praktisch umgesetzt werden können. Die Erläuterungen der Rahmenbedingungen, welche für die praktische Umsetzung und anschließende Bewertung dienen werden, sind Inhalt des folgenden Kapitels.

3 Rahmenbedingungen

Abschnitte 3.1 bis 3.3 erläutern die relevanten Daten, deren Herkunft sowie die Datenaufbereitung. Auf dieser Grundlage werden in Abschnitt 3.4 die Bewertungskriterien für die spätere Validierung und Testung der zu untersuchenden Verfahren argumentiert und festgelegt.

Perfekte ungestörte Daten, denen ggf. ein kontrolliertes Rauschen aufgeprägt werden kann, wären eine ideale Voraussetzung für die vorliegenden Untersuchungen. Die Rahmenbedingungen gestalteten sich jedoch anders: Die Verfügbarkeit eines theoretischen Modells zur Generierung einer beliebig großen Datenmenge wurde von der Verfasserin geprüft. Zum gegebenen Zeitpunkt stand jedoch kein theoretisches Simulationsmodell zur Verfügung, welches - ohne den Faktor Zeit zu berücksichtigen - den in 3.4 festgelegten Bewertungskriterien genüge.

Als Alternative boten sich zwei Möglichkeiten an:

- Nutzung von Messdaten eines Motorprüfstands.
- Erstellung eines vereinfachten Modells zur synthetischen Generierung beliebig vieler Datensätze.

Aufzeichnungen von zwei Prüfstandmotoren, beides 4-Takt Schiffsdieselmotoren, standen für die Untersuchungen zur Verfügung (vgl. Tabelle B.1). Im Gegensatz zu Messungen an Bord eines realen Schiffes können am Motorprüfstand mit höherer Präzision zahlenmäßig mehr und eindeutiger definierte Lastpunkte und Lastwechsel gefahren werden. Nachteilig ist der Umstand, dass die Zahl der Lastwechsel dennoch begrenzt und ihre exakte Wiederholbarkeit z.B. aufgrund von Temperaturänderungen während der Betriebsdauer nur eingeschränkt möglich ist. Sowohl die Wiederholbarkeit als auch eine sehr große Zahl an Trainingsdaten sind Voraussetzungen für eine objektive Beurteilung datenbasierter Verfahren, denen ein Modell - wenn auch nur ein vereinfachtes - besser nachkommen würde. Die Daten über ein vereinfachtes Modell synthetisch zu generieren, wird in Kapitel 4 eingehend beleuchtet.

3.1 Festlegen der Modelleingangsgrößen

Die Frage nach sinnvollen Modelleingangsgrößen beantwortet sich mit der Antwort auf die Frage: Welche Größen beeinflussen die Entstehung von Partikeln? Die in Kapitel 2.1 erläuterte Motorprozessrechnung und die im Anschluss vorgestellten phänomenologischen Modelle beantworten diese Frage recht zielführend, zumindest für die Rußentstehung. Hauptverantwortlich sind die Temperaturen im Brennraum sowie die Abwesenheit von Sauerstoff. Kritische Temperaturen, die eine Rußbildung befördern, liegen zwischen 1500 K und 1900 K bei einem zu geringen Verbrennungsluftverhältnis λ [37]. Die Schnittstelle zum anvisierten Schiffsmodell bietet jedoch weder Information zu Temperaturen noch zum Verbrennungsluftverhältnis, weshalb Alternativen gefunden werden müssen.

3.1.1 Stationärer Motorbetrieb

Hinsichtlich des stationären Motorbetriebs kann festgehalten werden, dass die Temperatur und deren zeitlicher und räumlicher Verlauf im Brennraum vom jeweiligen Betriebspunkt abhängig ist. Ebenso verhält es sich mit dem Verbrennungsluftverhältnis. Betriebsparameter werden im Motorkennfeld in Abhängigkeit von Motordrehzahl und –moment bzw. der Leistung angegeben, wie Abb. 3.1 beispielhaft zeigt.

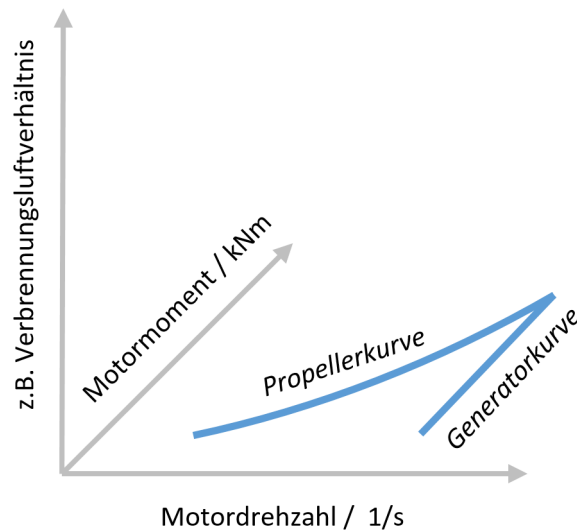


Abbildung 3.1: Qualitative Darstellung der Betriebspunkte von Propeller- und Generatorkurven im Motorkennfeld (x-y-Ebene), sowie Kennzeichnung eines davon abhängigen Betriebsparameters auf der Ordinate

Allen Betriebspunkten auf der Propeller- bzw. Generatorkurve kann im stationären Betrieb ein Verbrennungsluftverhältnis zugeordnet werden. Dasselbe gilt für die örtliche und zeitliche Temperaturverteilung im Brennraum. Daraus wird geschlussfolgert, dass auch die Entwicklung von Partikeln in einem eindeutigen Zusammenhang mit Motordrehzahl und –moment steht. An dieser Stelle muss angemerkt werden, dass diese Zusammenhänge mit einer gewissen Schwankungsbreite behaftet sind, da zahlreiche Faktoren, wie die Betriebsdauer, das Alter des Motors, die Zusammensetzung des verwendeten Brennstoffs und einige weitere Faktoren ebenfalls auf das Verbrennungsluftverhältnis, die Temperaturen und somit auch auf die Partikelemissionen Einfluss haben. Diese weiteren Faktoren werden als konstant oder nahezu konstant angenommen.

Es gilt:

$$\dot{m}_{PM} \approx f(n_{akt}, M_{M,akt}) \quad (3.1)$$

mit

\dot{m}_{PM}	Partikelmassenstrom in $mg s^{-1}$
n_{akt}	aktuelle Motordrehzahl in s^{-1}
$M_{M,akt}$	aktuelles Motormoment in $kNm s^{-1}$

Im stationären Motorbetrieb entspricht das abgegebene Motormoment $M_{M,akt}$ dem Gegenmoment $M_{P,akt}$ ¹. Die vom Motor abgegebene Energie in Form eines Drehmoments ist das Ergebnis des dieselmotorischen Verbrennungsprozesses. Ursächlich dafür ist die chemisch gebundene Energie, die in Form von Brennstoff in den Brennraum gelangt, so dass ebenfalls folgender Zusammenhang (3.2) gilt [87]:

$$\dot{m}_{PM} \approx f(n_{akt}, \dot{m}_B) \quad (3.2)$$

mit

\dot{m}_B Massenstrom des eingespritzten Brennstoffs in g/s

Im Stationärbetrieb gilt:

$$n_{akt} = n_{ord} \quad (3.3)$$

mit

n_{ord} geordnete Drehzahl

und auch das Drehmoment des Motors korreliert über die Drehzahl mit der Leistungsvorgabe:

$$P_{ord} = P_{akt} = M_{M,akt} \cdot n_{akt} \cdot 2\pi \quad (3.4)$$

mit

n_{akt} aktuelle Motordrehzahl in s^{-1}
 P_{ord} geordnete Motorleistung in kW
 P_{akt} aktuelle Motorleistung in kW

Aus Gleichungen (3.1), (3.3) und (3.4) folgt:

$$\dot{m}_{PM} \approx f(n_{ord}, P_{ord}) \quad (3.5)$$

Unter der Leistungs- oder Lastvorgabe für den Motor versteht sich dessen gewünschte abzugebende Leistung. Die Lastvorgabe wird über das Gegenmoment des Motors eingestellt. Beim Motorprüfstand MAN 6L23/30 entsteht dieses durch eine Wasserwirbelbremse, an Bord eines Schiffes hängt es u. a. von der Geometrie, dem Zustand und der Anströmung des Propellers ab. Schiffe, die mit konstanter Drehzahl ihren Motor auf der Generatorkurve betreiben, sind häufig mit einem Verstellpropeller ausgerüstet, dessen Propellerblätter in ihrem Anstellwinkel veränderbar sind. Auf diese Weise wird mehr oder weniger Leistung vom Motor abgefordert, sofern die Drehzahlvorgabe n_{ord} derweilen als konstant angenommen wird. Sowohl die Eingangsgrößen aus Gleichung (3.2) als auch jene aus Gleichung (3.5) werden im weiteren Verlauf der Arbeit von Bedeutung sein. Die Notwendigkeit, sowohl n_{akt} als auch \dot{m}_B bzw. n_{ord} und P_{ord} in Kombination miteinander zu berücksichtigen, lässt sich leicht an folgendem Beispiel veranschaulichen: Ist das Gegenmoment des Motors aufgrund eines Verstellpropellers sehr

¹ Der Index P steht für Propeller.

gering, bspw. weil sich seine Propellerblätter in Nullschub-Stellung befinden, kann die geordnete Drehzahl mit deutlich geringerer Füllung erreicht werden, als wenn die Propellerblätter einen Anstellwinkel für vollen Vorausschub aufweisen. Trotz identischer Drehzahl, werden unterschiedliche Mengen an Brennstoff benötigt, weshalb es zu einer veränderten Zusammensetzung der Abgasemissionen kommt. Ebenso ist es möglich, bei gleichem Brennstoffdurchsatz eine unterschiedliche Motordrehzahl zu fahren, was ebenfalls zu einer veränderten Zusammensetzung des Abgasmassenstroms führt.

3.1.2 Transienter Motorbetrieb

Die Erläuterungen zu den Zusammenhängen im Stationärbetrieb haben die Notwendigkeit eines MISO-Modells (Multiple Input, Single Output) verdeutlicht. Diese Notwendigkeit wird noch deutlicher, wenn der transiente Motorbetrieb betrachtet werden soll. Wie bereits weiter oben erwähnt, spielen beim transienten Betrieb die Trägheiten des Gesamtmotorprozesses eine wesentliche Rolle: Wird eine höhere Drehzahl vom Motor verlangt, weicht die Reglerdifferenz $e(t)$ von ihrem (idealerweise) stationären Wert Null ab. Die Abweichung führt zu einer Erhöhung der Brennstoffeinspritzung. Dank eines Verbrennungsluftverhältnisses, das auch im stationären Betrieb > 1 ist, kann bei der erhöhten Einspritzmenge auch verfügbarer Sauerstoff in sonst evtl. nicht erreichten Bereichen des Brennraums mit dem Brennstoff reagieren. Folglich wird mehr chemische Energie in mechanische umgewandelt. Der vorhandene Sauerstoff und dessen lokale Verfügbarkeit reichen jedoch noch nicht aus, um die erhöhte Brennstoffmenge vollständig zu verbrennen. Unverbrannte Kohlenwasserstoffe, Partikel und Kohlenmonoxide finden sich im Abgasmassenstrom wieder. Da es sich bei der Verbrennung um eine exotherme Reaktion handelt, steigen auch Temperatur und Druck im Abgas umso mehr an, je mehr chemisch gebundene Energie beim Verbrennungsprozess umgesetzt wird. Diese Enthalpieerhöhung im Abgasmassenstrom ist ursächlich für eine Beschleunigung der ATL-Drehzahl und verantwortlich für eine höhere Vorverdichtung der Ladeluft. Erst wenn die ATL-Drehzahl erhöht wird, kann mehr Ladeluft in die Zylinder befördert und das Verbrennungsluftverhältnis wieder auf einen Wert gebracht werden, der dem neuen λ_{stat} entspricht. Bei Schiffsdieselmotoren bewegt sich dieser Einschwingvorgang bis zum Erreichen eines neuen stationären Betriebspunktes im Bereich von mehreren Sekunden bis zu mehreren Minuten. Die Dauer hängt hauptsächlich von drei Faktoren ab, die gemeinsam den Lastgradienten bestimmen:

- die Einstellung des Reglers,
- die Größe des vorgegebenen Lastsprungs und
- die Trägheit des zu beschleunigenden Systems.

Zusätzlich zu n_{akt} und \dot{m}_{B} wäre das jeweils aktuelle Verbrennungsluftverhältnis sicherlich ein idealer Indikator, um die Partikelemissionen im transienten Betrieb zu bestimmen. Das vereinfachte, rechenzeitsparende Motormodell des für diese Arbeit benutzten Assistenzsystems SAMMON (1.1) gibt jedoch keine Auskunft zu diesem Wert. Stellt sich also die Frage, welche zusätzlich zur Verfügung stehende Information die Partikelbildung im transienten Motorbetrieb eindeutig beschreibt. Zwei Möglichkeiten drängen sich auf, die beide eine näherungsweise Reproduzierbarkeit von Prüfstandversuchen voraussetzen. Konkret bedeutet dies, dass ausgehend von einem stationären Betriebspunkt mit $n_{\text{ord},1}$ und $P_{\text{ord},1}$ ein neuer Betriebspunkt mit

$n_{\text{ord},2}$ und $P_{\text{ord},2}$ angefahren werden soll. Führt eine mehrfache Wiederholung desselben Lastwechsels zu reproduzierbaren Verläufen der Messwerte n_{akt} , \dot{m}_{B} und \dot{m}_{PM} , ist diese Bedingung erfüllt. Dann kann

1. aus einem zeitlichen Verlauf der gemessenen Eingangsgrößen n_{akt} und \dot{m}_{B} eindeutig auf den jeweils aktuellen Wert von \dot{m}_{PM} geschlossen werden, sowie
2. aus einer Änderung der geordneten Werte für n_{ord} und P_{ord} auf einen eindeutigen Verlauf der resultierenden Partikelemissionen geschlossen werden.

Beide Sichtweisen werden in den Kapiteln 4 und 5 aufgegriffen, diskutiert und umgesetzt.

3.2 Prüfstandaufzeichnungen als Datengrundlage

3.2.1 Prüfstandmotoren

Zwei Prüfstandmotoren lieferten die Messdaten für die Untersuchungen. Zur Modellbildung und zu Vergleichszwecken wurden hauptsächlich Datenaufzeichnungen eines mittelschnelllaufenden 4-Takt Schiffsdieselmotors der Firma MAN B&W eingesetzt. Parallel zu diesen Aufzeichnungen wurden auch Messdaten von einem Prüfstandmotor der Firma Caterpillar MaK erfasst. Letztere sollen im Rahmen von Kapitel 4 die Generalisierbarkeit des Ansatzes zur synthetischen Datenerzeugung untermauern und folglich auf die Übertragbarkeit der Aussagen zu den untersuchten Methoden auf andere Schiffsdieselmotoren schließen lassen.

Tabelle B.1 im Anhang gibt einen Überblick zu den wichtigsten Kennwerten und Randbedingungen der beiden Motoren. Während der MaK-Motor 6M20 beinahe ausschließlich für Forschungszwecke genutzt wird, ist das Haupteinsatzgebiet des MAN-Motors 6L23/30 die Ausbildung angehender Schiffsbetriebstechniker. Daher entspricht die Messtechnik bei Letzterem eher der an Bord von Schiffen der Berufsschifffahrt vorhandenen Ausrüstung. Wegen seiner flexibleren Verfügbarkeit wurde er für die Untersuchungen bevorzugt benutzt.

3.2.2 Messtechnik

Die vorhandene Messtechnik an beiden Motorprüfständen umfasst ein weitaus größeres Spektrum an Betriebsgrößen als für die vorliegenden Untersuchungen notwendig sind. Zur Überprüfung der Plausibilität ist es im Zweifel immer von Vorteil, einige zusätzliche Betriebsgrößen vorrätig zu wissen. Welche Daten für die Untersuchungen tatsächlich notwendig sind, wurde im vorangehenden Abschnitt erörtert. Kurz zusammengefasst handelt es sich um

- die aktuelle Motordrehzahl n_{akt} ,
- die geordnete Motordrehzahl n_{ord} ,
- den Brennstoffmassenstrom \dot{m}_{B} ,
- die angeforderte Leistung P_{ord} und
- der Partikelmassenstrom \dot{m}_{PM} .

Die Messtechnik an den beiden Prüfstandmotoren stammt von unterschiedlichen Herstellern und folgt teilweise abweichenden Messprinzipien. Die Aufzeichnungssoftware basiert an beiden Prüfständen auf dem grafischen Programmiersystem *LabVIEW*[®].

Messtechnik am Motorprüfstand MAN 6L23/30

Die geordnete Motordrehzahl n_{ord} sowie die geordnete Leistung P_{ord} werden beim MAN 6L23/30-Motor als Norm-Analogwert (0-10 V) auf die MAN-Maschinenüberwachung und -steuerung übergeben. n_{akt} wird ebenfalls von der MAN-Steuerung erfasst, welche diesen Messwert auf das Leitsystem überträgt und bei Drehzahlabweichung die Regelung durchführt. Die Brennstoffeinspritzung erfolgt mechanisch. Die Einspritzpumpen sind über das Füllungsgestänge mechanisch mit dem Drehzahlregler verbunden. Dieser erhält ein elektronisches Signal, um mehr oder weniger Füllung zu geben. Der Durchfluss des Brennstoffs \dot{m}_B wird über ein ABB VORTEX Wirbel-Durchflussmesser erfasst [88]. Ein sogenannter Störkörper im strömenden Medium bewirkt eine Wirbelablösung, deren Frequenz lediglich von der Durchflussgeschwindigkeit abhängt. Die Wirbelablösung ist für lokale Druckänderungen verantwortlich, die über einen Piezo-Sensor detektiert und in elektrische Impulse umgewandelt werden. Der daraus berechnete Durchflusswert wird als Gleichstromsignal (4-20 mA) an das Leitsystem übertragen.

Das Moment $M_{M,\text{akt}}$ resultiert aus der Messung an der Wasserwirbelbremse: Die Wasserwirbelbremse ist auf der Motorwelle angebracht. Es handelt sich dabei um eine hydraulische Kupplung, deren Abtriebsseite, ein Stator, fest gelagert ist. Die drehende Motorwelle verwirbelt das Wasser in der Wasserwirbelbremse. Die kinetische Energie der Wasserteilchen belastet den Stator mit einem Drehmoment, welches über einen Hebelarm mit einer Druckmessdose verbunden ist: $M_{M,\text{akt}} = \text{Kraft}(\text{Druckmessdose}) \cdot \text{Hebelarm}$. Die mechanische Arbeit des Motors wird in der Wasserwirbelbremse zum größten Teil in dissipative Energie umgewandelt. Über die Wasserfüllung kann das Gegenmoment des Motors geregelt werden. Am Prüfstand wird über das Leitsystem ein Soll-Wert P_{ord} vorgegeben, welcher mit dem Ist-Wert verglichen wird. Bei Bedarf wird die Öffnung des Zu- bzw. Ablaufventils der Bremse geregelt [89].

Messtechnik am Motorprüfstand MaK 6M20

Beim Prüfstandmotor MaK 6M20 wird für das elektronisch geregelte Common Rail-Einspritzsystem ein HEINZMANN-Digitalregler eingesetzt. Ein Hallsensor HIA 32 44/08 dient der Bestimmung der Ist-Drehzahl. Die Drehzahlvorgabe erfolgt durch den Sollwertgeber, der je nach Anwendungsfall als Potentiometer mit Spannungssignal, mit Stromsignal oder mit digitaler Sollwertvorgabe zur Anwendung kommen kann. Im HEINZMANN-Steuergerät können unterschiedliche Drehzahlrampen hinterlegt werden. Die Einspritzmenge wird entsprechend angepasst, sobald vom Regler eine Abweichung zwischen aktueller Drehzahl und Drehzahlvorgabe festgestellt wird [90]. Der Brennstoffdurchfluss wird von einem KRAL Volumeter erfasst. Zwei Schraubenspindeln werden durch das Medium angetrieben, wobei die Spindeldrehzahl von der Durchflussgeschwindigkeit abhängt. Aus der Drehzahl der Spindeln lässt sich der Volumenstrom ermitteln [91]. Anstelle der zuvor beschriebenen Wasserwirbelbremse bewirkt beim MaK 6M20 ein Generator das Gegenmoment des Motors. Die Drehmomentvorgabe wird vom Leitsystem an den Generator übertragen, worauf sich beim Generator die Last entsprechend einstellt. Ein Drehmomentmessflansch HBM K-T40FM dient der Ermittlung des Moments auf der Welle [92].

Zwei weitere wichtige Messgrößen sind die ATL-Drehzahl und der Ladeluftvolumenstrom. Aufgrund der Trägheiten im Abgaskanal, am ATL selbst und bei der Ladeluftzufuhr schwingt sich die ATL-Drehzahl bei einer Laständerung als eine der letzten Größen ein. Damit liefert

die Drehzahl des ATL eine wesentliche Information, wenn es darum geht, einen Lastsprung als beendet zu betrachten. Der Ladeluftvolumenstrom² dient der Umrechnung der Partikelmessung (Ausgabe in mg/m^3) in die zeitlich integrierbare Größe mg/s .

3.2.3 Partikelmessungen

Als Ausgangsgröße sind Partikelanzahl bzw. -massenstrom von Interesse. Es bestehen diverse Verfahren der Ruß-, Rauch- oder Partikelmessung für den stationären und auch einige wenige für den transienten Betrieb, wie bspw. in Pischinger [94] beschrieben. Zum Erscheinungsdatum dieser Monographie 1989 waren alle genannten dynamischen Verfahren noch zu wenig ausgereift, um sie für praktische Untersuchungen zu nutzen, wie wir sie hier durchzuführen haben. Die Herausforderungen sind vielschichtig: Form und Größe der Partikel sind ungewiss sowie auch deren Zusammensetzung. Außerdem führen die chemischen Eigenschaften einiger Abgaskomponenten dazu, dass die Entnahme verdünnt und abgekühlt werden muss, um die Abgasprobe für die Sensoren verträglich zu machen. Mehr als zwei Jahrzehnte später, im Forschungsbericht des FVV [27] von 2015, werden folgende Verfahren diskutiert:

- Gravimetrisches Verfahren mit einem elektrischen Mobilitätsspektrometer → war im Projekt des FVV anvisiert, jedoch für die Förderung als zu teuer eingeschätzt(!);
- Lichtextinktionsverfahren in einem Opazimeter → wurde genehmigt, die Ansprechzeit von mehreren Sekunden taugte nicht für die geplanten dynamischen Messungen;
- Photoakustisches Verfahren mit einem Ruß-Sensor (PASS) → ausgelegt für Rußmessung, wurde nur für Messungen im Stationärbetrieb verwendet;
- Flammenionisationsdetektor (FID) → misst ausschließlich HC-Emissionen.

An beiden oben genannten Motorprüfständen wurden die Abgaspartikel mit ein und derselben portablen Messtechnik, einem Pegasor Mi3 Partikelmessgerät, aufgezeichnet. Dieses beruht auf dem gravimetrischen Verfahren und verfügt über ein elektrisches Mobilitätsspektrometer. Um Verluste durch Thermophorese zu vermeiden, wird das heiße, unverdünnte Rohabgas zur Analyse verwendet [95]. Dieses wird mit einer Pumpe zum Sensor geleitet und erst dort mit komprimierter, gefilterter Luft verdünnt. Die verdünnte Abgasprobe durchläuft eine Ionenfalle, bei der die Anzahl der Partikel erfasst wird [96]. Die Messfrequenz beträgt maximal 100 Hz. Die Antwortzeit des Gerätes beträgt 0,2 Sekunden, was für Messungen unter den vorliegenden transienten Bedingungen als ausreichend erachtet werden kann. Laut Herstellerangaben [97] können Partikel bis runter auf 10 nm Durchmesser detektiert werden. Die messbaren Partikelkonzentrationen liegen beim Pegasor Mi3 im Bereich von 300 cm^{-3} bis $1,3\text{ cm}^{-3}$, bzw. zwischen $1\text{ }\mu\text{g}/\text{m}^3$ und $290\text{ mg}/\text{m}^3$. Die volumenbezogene Gesamtmasse der detektierten Partikel wird über eine eingebare, mittlere Partikelmasse berechnet.

An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass datenbasierte Verfahren die aufgezeichneten Messdaten als „Wahrheit“ betrachten, sofern keine Referenzmessungen oder Herstellerangaben eine Korrektur der aufgezeichneten Daten in der Datenaufbereitung nahelegen. Aus diesem Grund kann das Ergebnis eines datenbasierten Modells dem wahren Prozess nie realitätsnäher sein, als die Messtechnik dies selbst zulässt.

² Während sich die Aufzeichnungen des Ladeluftvolumenstroms am Prüfstand 6L23/30 als nutzbar erwiesen, wurde am Prüfstand 6M20 diese Größe über die sogenannte Brettschneider-Formel [93] berechnet.

3.2.4 Versuchsaufbau und -durchführung

Gemäß Ertel [21] geht es bei der Modellparametrierung darum, mit Trainingsdaten das Wissen zur Verfügung zu stellen, welches durch ein Lernverfahren extrahiert werden soll. Die Stichprobe für Trainings-, Validierungs- und Testdaten sollte dabei so repräsentativ wie möglich sein. Mit dem Begriff „repräsentativ“ ist insbesondere die Verteilung der Messdaten im Eingangsraum gemeint.

Gängige Schiffsdieselmotoren sind derart ausgelegt, dass sie im Stationärbetrieb die Betriebspunkte auf den in der Schifffahrt üblichen Kennlinien problemlos anfahren können. Diese Kennlinien sind die Generatorkurve und die Propellerkurve wie sie in Abb. 3.1 auf Seite 48 bereits qualitativ dargestellt wurden. Der Versuchsaufbau richtet sich in erster Linie nach diesen beiden Kennlinien, was die stationären Lastpunkte betrifft. Eine weitere Propellerkurve, welche die Nenndrehzahl bei 85 % der Motornennleistung erreicht, wurde ebenfalls im Versuchsaufbau berücksichtigt, um eine größere Anzahl und Vielfalt an Daten zu generieren. Außerdem ist eine leicht in Richtung Abszisse versetzte Propellerkurve hinsichtlich größerem Schiffswiderstand aufgrund von Bewuchs oder veränderlichem Beladungszustand des Schiffes realistisch. Die Sensorwerte bei Stationärbetrieb wurden in Schritten von 10 % Leistungsänderung aufgezeichnet, beginnend mit 20 %, was der niedrigsten Last entspricht, die am 6L23/30-Motor einstellbar ist.

Die Ablaufplanung der Lastwechsel wurde zum einen rein systematisch durchgeführt (z.B. 20 % → 30 %, 20 % → 40 %, 20 % → 50 %, ...), zum andern wurden aber auch Erfahrungswerte aus der praktischen Manöverfahrt berücksichtigt [98]. Diese Referenzwerte zeigen, dass mehrheitlich kleinere Lastwechsel in Folge ($< 10\%$) stattfinden, selten auch größere. Es empfiehlt sich dennoch, auch größere Lastwechsel für die Untersuchungen zu verwenden, damit die seltenen, aber von ihrem Partikelaustritt nicht minder ins Gewicht fallenden Maschinenmanöver ebenfalls zahlreich in der Datenbasis repräsentiert werden [33]. Der Versuchsraum wurde durch die stationären Kennlinien vorgegeben und eingegrenzt. Welche Auswirkungen die transienten Versuche haben würden, welche „Pfade“ sowohl Eingangsgrößen als auch der Partikelmassenstrom im transienten Betrieb nehmen würden (vgl. Prinzipbild in Abb. 2.17 auf Seite 42), ist ein Ergebnis der Untersuchungen und war bei der Versuchsplanung unbekannt.

Die Versuche wurden derart geplant, dass sie in einem engen Zeitraum innerhalb von sechs Tagen durchgeführt werden konnten. Idealerweise sollten alle Versuche nacheinander am warmgelaufenen Motor stattfinden. Die Arbeitszeiten und Kapazitäten des Laborpersonals erlaubten jedoch nicht, während der notwendigen rund 50 Stunden Versuchszeit durchgehend den Prüfstand zu bedienen, so dass der Versuchsmotor täglich neu gestartet werden musste. Pro Lastwechsel wurde mit 10 bis 15 Minuten gerechnet, damit sich die ATL-Drehzahl auf einem neuen stationären Niveau einschwingen konnte.

Etwa im selben Zeitraum fanden am Prüfstandmotor MaK 6M20 im Rahmen des BMWi-Projektes MEmBran ebenfalls Versuchsdurchläufe statt. Der Schwerpunkt war etwas anders gelagert: Es wurden Parameter wie bspw. Einspritzzeitpunkt und Raildruck variiert. Die Versuche fanden nach ISO 8178-4 statt [99]. Somit können nur Teile jener Versuche als Vergleichsdaten herangezogen werden.

3.3 Aufbereitung der Prüfstandaufzeichnungen

Nach Sichtung aller Aufzeichnungen kann Bilanz gezogen werden: Von der Generatorkurve liegen 69 brauchbare Lastwechsel vor, wovon 38 eine Lasterhöhung beschreiben. Bei der 100%-Propellerkurve sind es insgesamt 83, wobei 39 dieser Laständerungen positiv sind. Der instationäre Betrieb auf der 85%-Propellerkurve wird durch 81 Lastwechsel charakterisiert. 43 davon stellen eine Lasterhöhung dar.

3.3.1 Extraktion stationärer Daten

Die Arbeit fokussiert den transienten Motorbetrieb und dessen Auswirkung auf Partikelemissionen. Nichtsdestotrotz fanden zu Beginn Untersuchungen zum stationären Motorbetrieb statt. Zwischen diesen stationären Lastpunkten erfolgten im Anschluss die Lastwechsel. Nach jedem Lastwechsel wurde abgewartet, bis der Stationärzustand wieder erreicht war. Für das Erstellen eines statischen Modells (vgl. 4.2) wurden zusätzlich diese stationären Betriebssequenzen aus den dynamischen Messdurchläufen extrahiert, um eine größere Menge an Daten zur Verfügung zu haben.

3.3.2 Einheiten und zeitliche Anpassungen

Den in 3.2.2 aufgelisteten Messgrößen wurde während der Datenverarbeitung besondere Beachtung geschenkt. Die Zeitstempel mussten überprüft und, wo nötig, angepasst werden. Speziell für die Messreihen im transienten Betrieb mussten die Totzeiten, d.h. die zeitliche Verzögerung von tatsächlichem Einsetzen eines Effekts bis zu dessen Aufzeichnung, abgeschätzt und angepasst werden. Außerdem wurde teilweise ein Umrechnen der Einheiten notwendig. Die Daten werden mit folgenden Einheiten benutzt:

- die aktuelle Motordrehzahl n_{akt} in s^{-1} ,
- die geordnete Motordrehzahl n_{ord} in $\%$,
- den Brennstoffmassenstrom \dot{m}_B in gs^{-1} und
- die angeforderte Leistung P_{ord} in $\%$.
- der Partikelmassenstrom \dot{m}_{PM} in mgs^{-1} ,

3.3.3 Aufteilung der Daten

Datenbasierte Modelle benötigen Trainingsdaten, um eine Bestimmung der (Hyper-)Parameter durchführen zu können. Als Parameter werden hier Modellkoeffizienten bezeichnet. Bei den KNN sind dies namentlich die Synapsengewichte und die Gewichte der Schwellenwerte. Der Begriff „Hyperparameter“ steht für diejenigen Parameter, welche die Modellarchitektur und ein mit hoher Wahrscheinlichkeit zielführendes Parametertraining beschreiben. Diese sind bspw. die Anzahl versteckter Neuronen, die Anzahl der Trainingsepochen und die Lernrate.

Zur Vermeidung einer Modell-Überanpassung (engl. „over-fitting“) dienen Validierungs- und Testdaten. Je nach Autor werden die beiden letzteren Begriffe unterschiedlich verwendet. Hier wird auf die Technik der 3-Split-Validierung verwiesen [100]. Die Datenmenge wird gemäß Abb. 3.2 in drei Teildatensätze unterteilt: Trainingsdaten, Validierungs- und Testdaten.

Die Theorie der 3-Split-Validierung bedient sich üblicherweise rund 60 % der zur Verfügung stehenden Daten für Trainingszwecke, 30 % für Validierungs- und 10 % für Testzwecke.

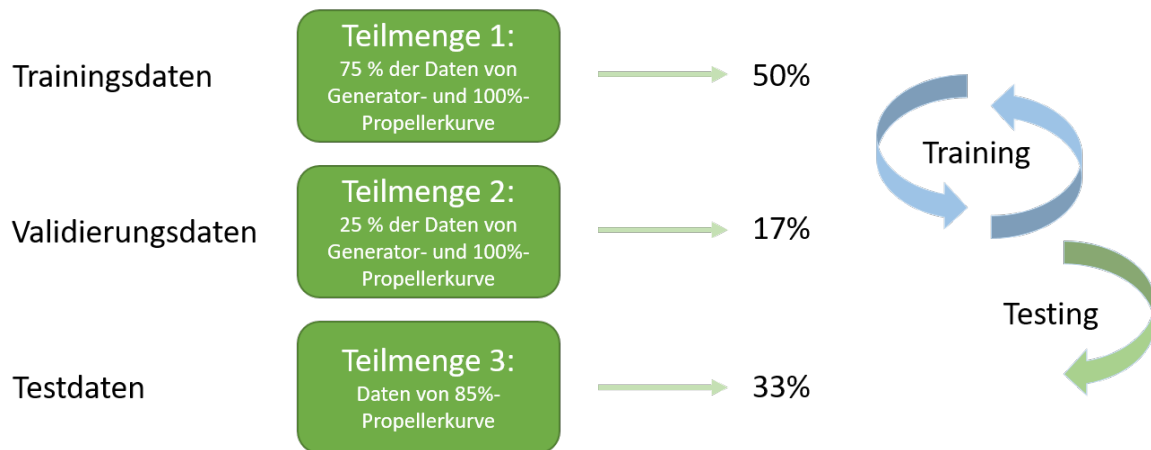


Abbildung 3.2: Aufteilung der insgesamt vorhandenen Daten für Trainings-, Validierungs- und Testzwecke in Anlehnung an Darstellung aus [100].

Von diesem Vorschlag wurde leicht abgewichen und für Training- und Validierung lediglich die Daten der 100%-Propeller- und Generatorbetrieb verwendet, was rund zwei Dritteln der insgesamt vorhandenen Daten ausmacht. Eine Aufteilung derselbigen in Trainings- und Validierungsdaten geschah im Verhältnis 3:1. Für Testzwecke verblieben die Daten von der 85%-Propellerkurve, welche etwa einem Drittel der gesamten Datenmenge entsprechen und kaum Abhängigkeit bzw. Überlappung mit den Trainings- und Validierungsdaten aufweisen. Abb. 3.3 visualisiert die Aufteilung anhand der stationären Messpunkte.

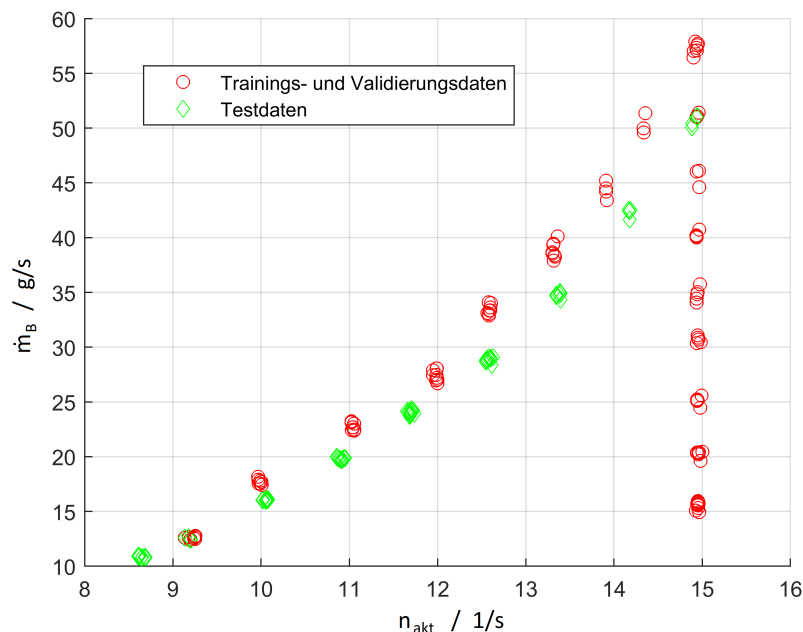


Abbildung 3.3: Trainings- und Validierungsdaten (rot) und Testdaten (grün) für stationäres KNN, welche in Kapitel 4 Verwendung finden werden.

Trainingsdaten

Im Rahmen der beiden nachfolgenden Kapitel wird wie folgt vorgegangen:

- K.4 Für das Training der stationären KNN werden zufällig ausgewählte 3/4 der stationären Lastpunkte von Generator- und 100%-Propellerbetrieb verwendet. Zum Training des transienten Verhaltens wird die entsprechende Menge an Messdaten vom transienten Betrieb herangezogen (Modell M0).
- K.5 Zum Training der drei zu untersuchenden Modellansätze M1 bis M3 werden synthetisch erzeugte Daten von Modell M0 verwendet, und zwar sowohl vom transienten Generatorbetrieb als auch vom Betrieb entlang der 100%-Propellerkurve. Die Trainingsdaten betragen 75 % der mit diesen beiden Betriebsmodi generierten Daten, welche im Voraus festgelegt sind.

Validierungsdaten

Die Validierung dient der Überprüfung der Prognosegüte mit den im Training verwendeten (Hyper-)Parametern. Ziel ist es, ein weitgehend allgemeingültiges Modell zu erhalten, welches möglichst den festgelegten Bewertungskriterien (vgl. Abschnitt 3.4) entspricht und dennoch keiner Überanpassung unterliegt. Zur praktischen Umsetzung, beschrieben in den Kapiteln 4 und 5, werden entsprechend der obigen Auflistung die verbleibenden 25 % der Daten zur Validierung eingesetzt.

Training und Validierung bilden zusammen einen iterativen Prozess, an dessen Ende ein Ergebnis zu erwarten ist, welches mit großer Wahrscheinlichkeit ein lokales Optimum darstellt, sowohl was die Wahl der Hyperparameter als auch die resultierende Simulation betrifft. Um eine objektive Entscheidung fällen zu können, welche Kombination von (Hyper-)Parametern für die anschließenden Testung übernommen wird, hilft die Durchführung einer mehrdimensionalen k -fachen Kreuzvalidierung [101]: k steht dabei für die Anzahl der Teilmengen. Für den Fall stationärer KNN gilt $k = 4$. Das heißt, dass jeweils 3/4 der Daten per Zufallsprinzip zum Training, die übrigen 25 % zur Validierung genutzt werden. Es werden k Trainingsdurchgänge durchgeführt, wobei immer $k - 1$ Teile zum Training, der ausgeschlossene Teil zur Validierung verwendet werden. Diese 4-fache Kreuzvalidierung wird nicht nur einmalig, sondern 3 Mal wiederholt, um das Ergebnis nicht zu sehr dem Zufall zu überlassen³. Mit „mehrdimensional“ wird angedeutet, dass diese dreimal wiederholte 4-fache Kreuzvalidierung zusätzlich noch mit verschiedenen Kombinationen von Hyperparametern durchgeführt wird, um eine möglichst robuste Modellarchitektur zu erreichen. Diese Vorgehensweise wird auch als Grid Search (z.Dt. Rastersuche) bezeichnet [102][103].

Für gewisse Untersuchungen in Kapitel 5 wird von der Kreuzvalidierung abgesehen, was bedeutet, dass für die Rastersuche die 25 % Validierungsdaten im Voraus festgelegt werden.

Testdaten

Wenn für den jeweiligen Anwendungsfall eine Modellparametrierung als die geeignetste identifiziert wurde, kommen die Testdaten zur Anwendung. Sie dienen der Ermittlung einer letzten, unabhängigen Prognosegüte vor allen Dingen auch, um das Modell auf Überanpassung hin zu

³ Es sei hier angemerkt, dass die Startwerte jeweils zufällig gewählt werden.

prüfen. Wenn der Prognosefehler in den Testdaten signifikant größer ist als jener der Validierungsdaten, kann davon ausgegangen werden, dass über die mehrfache Kreuzvalidierung auch eine Anpassung der Modellstruktur an die Validierungsdaten stattgefunden hat. Da dieser Umstand nicht wünschenswert ist, müsste in einem solchen Fall der Trainings-Validierungs-Zyklus von vorne begonnen werden. Bezogen auf die beiden nachfolgenden Kapitel dienen als Testdaten:

K.4 Die stationären Lastpunkte auf der 85%-Propellerkurve (vgl. grüne Messpunkte in Abb. 3.3), sowie die transienten Messungen von der 85%-Propellerkurve.

K.5 Synthetisch erzeugte Daten von Modell M0 vom Betrieb entlang der 85%-Propellerkurve.

Zu der Frage, ob dieses endgültige Modell „gut“ sei, schreibt Kuhlmann in [101]: „In der Literatur findet sich kein Hinweis darüber, ab welchem Unterschied in den Prognosefehlern zwischen Schätz- und Prüfdatensatz noch von einer guten Prognosefähigkeit ausgegangen werden kann. So bleibt es dem Anwender überlassen, eine akzeptable Differenz festzulegen.“ Dieser Festlegung wollen wir uns im nächsten Abschnitt widmen.

3.4 Bewertungskriterien

Kriterien sind hilfreich, um die Güte von Modellergebnissen objektiv bewerten zu können und ein Maß für die Vergleichbarkeit von Verfahren zu haben. Die hier aufgestellten Kriterien werden im Verlauf der Arbeit noch an mehreren Stellen hilfreich sein, sei es beim Bewerten von Modell M0 für die synthetische Datenerzeugung (Kapitel 4) oder bei der Bewertung der einzelnen Verfahren M1 bis M3 in Kapitel 5. Wenn nicht anderweitig angegeben, ist es das Bestreben der Verfasserin, die z. T. sehr anspruchsvoll definierten, quantitativen Kriterien mit einer Abweichung von $< 50\%$ zu erfüllen. Dieser Anspruch begründet sich mit den Ergebnissen aus der aktuellen Forschung bzgl. theoretischer Modelle, erläutert in Abschnitt 2.1.

3.4.1 Kriterien für Modellansätze zur Beschreibung von stationären Zuständen

Für stationäre Betriebspunkte sind der arithmetische Mittelwert \bar{x} , der Zentralwert *med* (für Median), die Streuungsmaße Spannweite R und empirische Standardabweichung s sowie das 25%- bzw. das 75%-Perzentil diejenigen Kriterien, die für die Bewertung des stationären MPL-Netzes Anwendung finden werden. Abb. 3.4 veranschaulicht mit Box Plots am Beispiel der 100%-Propellerkurve, welche Spannweiten, Mittelwerte (grüne Sterne), Mediane (rote Linien) und Perzentile bei den Messungen an diversen Lastpunkten ermittelt werden konnten. Die Boxen bezeichnen den Bereich zwischen dem 25%- und dem 75%-Perzentil. Mit 50%-iger Wahrscheinlichkeit liegen die Messwerte im Bereich dieser Box. Eine Simulation mit den Testdaten sollte möglichst in den entsprechenden Bereichen der 85%-Propellerkurve liegen: Eine Abweichung im Bereich der Spannweite wird von der Verfasserin als akzeptabel definiert, weil bei mehrfach gemessenen Betriebspunkten auch die gesamte Spannweite der Messungen für das Training verwertet wird.

Außerdem bietet sich bei diesem nur 3-dimensionalen Problem eine visuelle Kontrolle der Ergebnisse an, um ggf. mit neuen Startwerten ein qualitativ besseres Ergebnis zu erzielen. Die visuelle Kontrolle soll insbesondere berücksichtigen, dass unrealistisch hohe, niedrige oder gar negative Simulationswerte in dem Bereich des Kennfeldes zwischen Propellerkurven und Generatorkurve auftreten. Im Bereich oberhalb der 100%-Propellerkurve sollte darauf geachtet

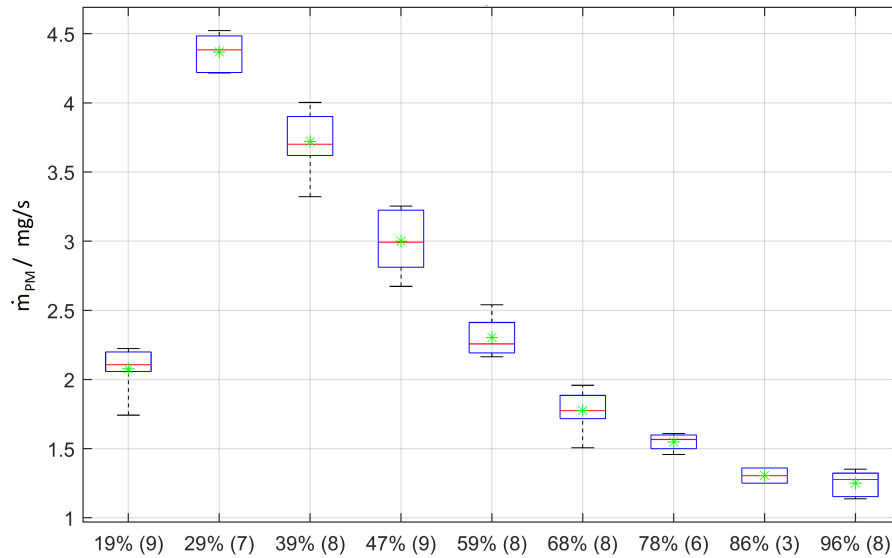


Abbildung 3.4: Box Plot mehrerer Lastpunkte auf der 100%-Propellerkurve: Prozentangaben auf der Abszisse beziehen sich auf die Motorleistung, die Werte in Klammern geben die Anzahl Messproben an. Grün: arithmetische Mittelwerte, rot: Median, Box: bezeichnet den Bereich zwischen dem 25. und 75. Perzentil.

werden, dass ein sehr abrupter Abfall oder Anstieg vermieden wird. Mangels Messdaten in den genannten Lastbereichen ist lediglich eine subjektive, auf Erfahrungen basierende, aber dennoch realistische Abschätzung möglich.

3.4.2 Kriterien für Modellansätze zur Beschreibung von dynamischen Prozessen

Für den transienten Betrieb werden andere Kriterien berücksichtigt, die ebenfalls vorrangig quantitativer, objektiver Natur sind. Naheliegend ist ein Vergleich der Flächen unter den Kurven nach Gleichung (3.6):

$$\Delta w_{Simulation}[\%] = \frac{100}{\sum_{t=0}^{Ende} \dot{m}_{PM,Messung}} \cdot \sum_{t=0}^{Ende} \dot{m}_{PM,Simulation} - 100 \quad (3.6)$$

mit

$\Delta w_{Simulation}$	prozentuale Abweichung zw. integriertem, simulierten Partikelmassenstrom und der Integration der entsprechenden Messung bzw. den entsprechenden synthetisch erzeugten Daten anhand von Modell M0.
$\dot{m}_{PM,Simulation}$	Simulation des Partikelmassenstroms
$\dot{m}_{PM,Messung}$	gemessener, bzw. synthetisch erzeugter Partikelmassenstrom

Auf den ersten Blick nicht weniger wichtig sind die Emissionsspitzen, die sich bei den Lasterhöhungen ergeben. Während sich der Partikelmassenstrom vom MAN-Motor 6L23/30 im stationären Betrieb zwischen 1 mg/s und 4,5 mg/s bewegt, werden im transienten Betrieb

Spitzenwerte von bis zu 140 mg/s erreicht. Es stellt sich jedoch die Frage nach der Aussagekraft dieser Messergebnisse. Um eine Aussage über die Auswirkung der Partikel bspw. auf die menschliche Gesundheit treffen zu können, ist eine Information zu der darin enthaltenen Partikelgrößenverteilung nötig. Eine Emissionsspitze, deren Massenstrom mehrheitlich größere Partikel beinhaltet, ist für den menschlichen Organismus weniger schädlich als eine Beladung mit ultrafeinen Partikeln. Auch wenn diese Aussagekraft bei den vorliegenden Untersuchungen nicht gewährleistet werden kann, findet dieses Kriterium dennoch in den vergleichenden Betrachtungen quantitativ Erwähnung, da es eine Aussage zur Weiterverwendung der Methode, z.B. für soeben genannten Aspekt der Größenverteilung (vgl. Ausblick in 7.2.2), zulässt. Die prozentuale Abweichung wird analog zur obigen Gleichung (3.6) berechnet. Ob Beträge dieser Abweichungen verglichen werden oder die Summen, wird bei der jeweiligen Anwendung gesondert definiert.

Während die stationären Betriebspunkte bei den synthetisch erzeugten Daten mit den im vorangehenden Unterabschnitt aufgeführten Kriterien für statische Modelle (3.4.1) überprüft werden können, bedarf es für die zu untersuchenden, dynamischen Modelle ebenfalls einer entsprechenden Überprüfung stationärer Betriebspunkte. Mit Gleichung (3.6) wird deshalb auch bewertet, inwiefern solche dynamischen Modelle den Stationärbetrieb nachzubilden vermögen. Ein geringer Fehler könnte bei längerer stationärer Fahrt zu einer erheblichen Fehleinschätzung der entstandenen Emissionen führen.

Ein weiteres quantitatives Kriterium ist die notwendige Trainingszeit für das Modell und die benötigte Simulationszeit bspw. für den Testdatensatz.

Ein Aspekt, der lediglich für das Modell M0 zur synthetischen Datenerzeugung Beachtung findet, ist die Nachbildung einzelner, mehrfach gemessener Lastwechsel. Ein Beispiel dafür, wie stark sich die Partikelaufzeichnungen von fünf identisch angeregten Lastwechseln unterscheiden, ist in Abb. 3.5 zu sehen. Diese Abweichungen, genauso wie das Messrauschen, fließen ungefiltert in die Modellbildung mit ein. Das Simulationsergebnis von Modell M0 sollte sich im Rahmen der jeweiligen Messungen bewegen.

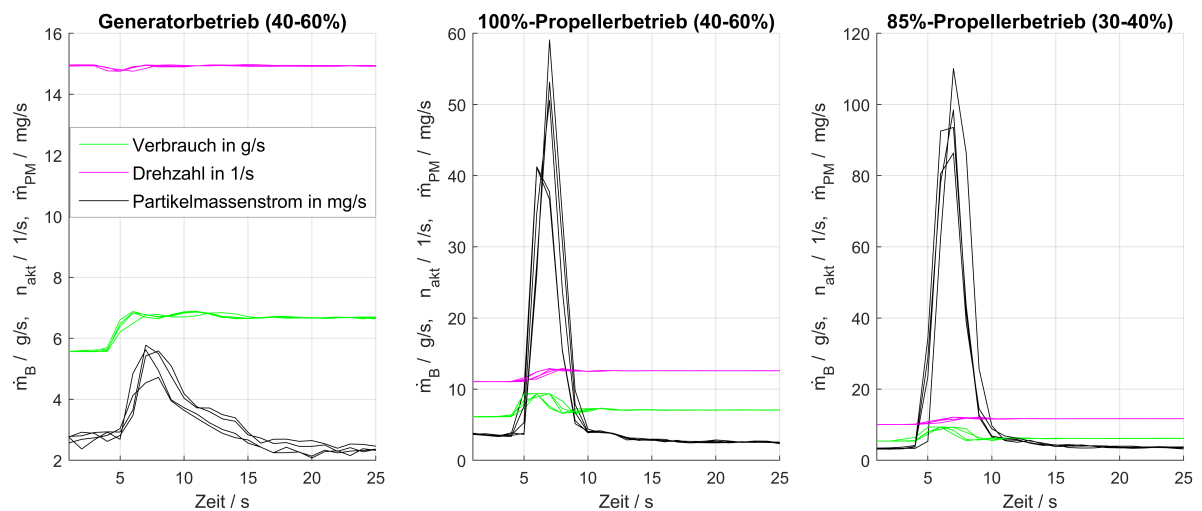


Abbildung 3.5: Mehrfach wiederholte Lastwechsel von 40 % auf 60 % in Generator- und 100%-Propellerbetrieb, sowie von 30 % auf 40 % im 85%-Propellerbetrieb: die Spitzenwerte des Partikelmassenstroms variieren in Größenordnungen von rund 20%.

Des Weiteren ist ein Augenmerk darauf zu legen, wie die Simulation mit kombinierten, sich überlagernden Lastwechseln umgeht. Es ist in der Praxis durchaus üblich, Leistungs- und Drehzahlvorgaben zu ändern, bevor ein neuer stationärer Betriebszustand erreicht ist. Ist ein Lastwechsel noch nicht zu Ende gefahren, wenn bereits ein neues Kommando gegeben wird, ergibt sich ein Verlauf, der sowohl von einer reinen Addition oder gar einer Aneinanderreihung der Messdaten abweichen kann. Die zum Training, zur Validierung und zur Testung genutzten Daten bestehen ausschließlich aus einzelnen, abgegrenzten Lastwechseln „von stationär nach stationär“ (Abb. 3.6, links und Mitte). Die Reaktion der einzelnen Modelle auf kombinierte Lastwechsel, wie bspw. in Abb. 3.6 (rechts) zu sehen, soll diskutiert werden.

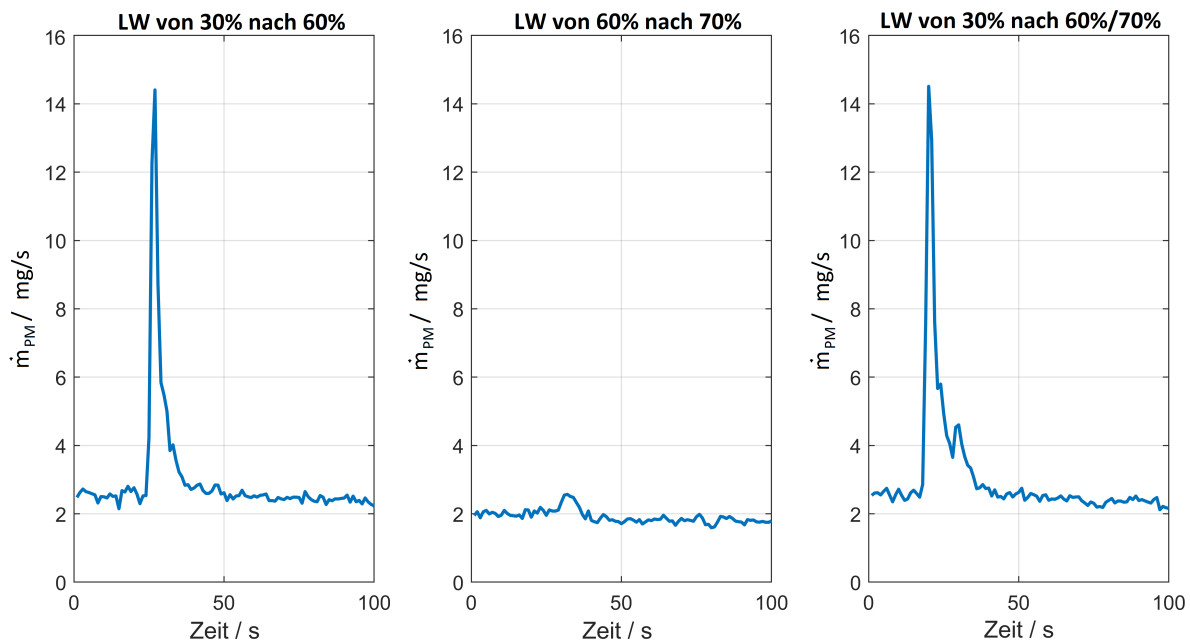


Abbildung 3.6: Ergebnis von Lasterhöhungen auf der 100%-Propellerkurve: von 30 % auf 60 % (links), von 60 % auf 70 % (Mitte); Ergebnis eines kombinierten Lastwechsels mit erstem Kommando von 30 % auf 60 %, direkt gefolgt von einer Erhöhung auf 70 % (rechts).

3.5 Zusammenfassung und Fazit

Ein datenbasiertes Modell benötigt Eingangsgrößen, um die Ausgangsgröße „Partikelmassenstrom“ zu präzisieren. Als mögliche Eingangsgrößen werden in erster Linie die aktuelle Motordrehzahl, Verbrauch, aber auch Änderungen der geordneten Drehzahl- bzw. Leistungsvorgabe in Betracht gezogen. Die Datengrundlage für die vorliegenden Untersuchungen basiert auf Aufzeichnungen vom MAN B&W-Schiffsdieselmotor 6L23/30. Ein zweiter Motor der Firma MaK Caterpillar (6M20) lieferte ebenfalls Daten, welche der Bewertung bzgl. Verallgemeinerung der Modelle dienen soll. Beide Motoren sind mit umfangreicher Messtechnik ausgestattet, die eine Vielzahl von Daten aufzeichnet, was eine gute Basis für weiterführende Untersuchungen ist. Während die Eingangsgrößen von unterschiedlichen Sensortypen aufgenommen werden, dient ein mobiles Partikelmessgerät (Pegasor Mi3) der Partikelmessung an beiden Prüfständen.

Eine umfangreiche Versuchsmatrix wurde innerhalb einer Woche abgearbeitet. Sie beinhaltete Lastwechsel auf der Generatorkurve, sowie auf den 100%- und 85%-Propellerkurven. Die Rohdaten mussten nach den Aufzeichnungen aufbereitet werden. Zur Datenaufbereitung gehörte das Extrahieren stationärer Lastpunkte, das Umrechnen in die zur weiteren Verarbeitung festgelegten Einheiten sowie zeitliche Anpassungen.

Ein wesentlicher Schritt ist am Ende die Entscheidung, wie die Daten in Trainings-, Validierungs- und Testdatensätze aufgeteilt werden. Unter Trainingsdaten werden jene Daten verstanden, die der Suche nach geeigneten (Hyper-)Parametern dienen. Mit den Validierungsdaten werden die erreichten Ergebnisse überprüft. Diese beiden Schritte werden iterativ wiederholt, bis ein festgelegtes Kriterium erreicht wird. Mithilfe der Testdaten wird die Prognosegüte des neu erstellten Modells mit unabhängigen Daten überprüft.

Bewertungskriterien werden sowohl für stationäre Modelle bzw. Untermodelle bestimmt als auch für Modelle, die der Simulation dynamischer Prozesse dienen sollen. Zu den stationären Bewertungskriterien zählen statistische Kennwerte, wie bspw. die Spannweite. Zu den Kriterien der transienten Prozesssimulation gehören u. a. die prozentuale Abweichung zwischen gemessenen und simulierten Daten und eine ebenfalls prozentuale Bewertung der erreichten Emissionsspitzenwerte. Neben den quantitativen Kriterien gibt es auch qualitative Kriterien, die anhand visueller Merkmale diskutiert werden.

4 Synthetische Datenerzeugung (Modell M0)

Die begrenzt vorhandenen, durch diverse Einflüsse nicht identisch wiederholbaren Messreihen entsprechend vorigem Kapitel bilden eine wichtige Datengrundlage. Ein großer Nachteil ist jedoch, dass diese relativ geringe Anzahl an Messungen keine verlässliche Grundlage für eine objektive Auslegung und Bewertung der in Kapitel 5 zu untersuchenden Modelle bzw. deren Architekturen, Hyperparameter und Dynamik bildet. Aus diesem Grund wurde nach einer Möglichkeit gesucht, die Abbildung des Partikelmassenstroms über ein nachfolgend beschriebenes, halbempirisches Modell zu erreichen, welches im Anschluss als Datenlieferant dienen kann, als wären dies die eigentlichen Messwerte. Ein zweistufiges, teilweise physikalisch begründetes Modell bietet sich dazu an. Dieses wird im Folgenden auch als Modell M0 bezeichnet.

In einem ersten Schritt (4.1) wird auf die Berechnung der Modelleingangsgrößen eingegangen. Abschnitt 4.2 erläutert die Berechnung des Stationäranteils des Partikelmassenstroms. Die zweite Stufe, die Berechnung des transienten Anteils wird in Abschnitt 4.3 behandelt und abschließend in 4.4 mit dem Stationäranteil zur Erzeugung synthetischer Datensätze kombiniert. Abb. 4.1 zeigt diese Trennung in stationäre und transiente Anteile anhand von Messdaten: Der darin rot eingefärbte Stationäranteil wird anhand des stationären Modells (vgl. 4.2) ermittelt und ist rein hypothetisch. Der blau eingefärbte, transiente Anteil stellt die Differenz zu den tatsächlichen Aufzeichnungen dar.

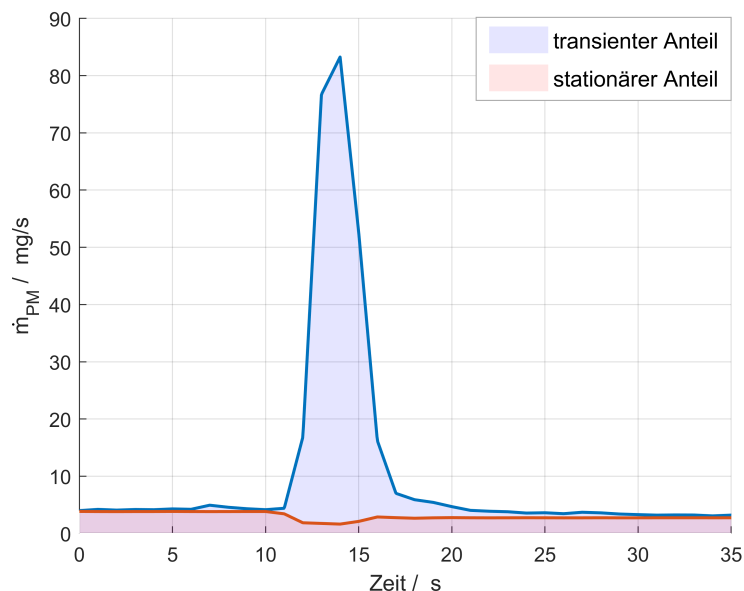


Abbildung 4.1: Aufteilung des Partikelmassenstroms in stationären (rot eingefärbt, über stationäres Modell berechnet) und transienten (blau eingefärbt) Anteil am Beispiel eines Lastsprungs von 30% auf 50% im 100%-Propellerbetrieb.

Die Herangehensweise der synthetischen Datengenerierung ist keineswegs unüblich, wie in [79] zu lesen ist: „Ein anderer aktueller Trend ist die Erzeugung von synthetischen Daten und die Verwendung von Simulationen im Training“.

4.1 Simulation der Modell-Eingangsgrößen mit Regelalgorithmus

Für eine Simulation von Partikelemissionen ohne Hinzunahme von Messdaten wird an erster Stelle ein Modell zur Berechnung der Modelleingangsgrößen benötigt. Aus einer Kommandovorgabe sollen die aktuelle Motordrehzahl n_{akt} und der Momentanverbrauch \dot{m}_B ermittelt werden. Gleichung (3.5) besagt zwar, dass auch die kommandierten Werte n_{ord} und P_{ord} für das stationäre Modell geeignet seien. Das Wissen um den aktuellen Verbrauch und die aktuelle Drehzahl und deren zeitliche Verläufe ist allerdings hinsichtlich der zu untersuchenden Methoden in Kapitel 5 unabdingbar, weshalb diese hier für die Berechnung des Stationäranteils Verwendung finden. Das im Folgenden beschriebene, vereinfachte Motormodell¹ liefert also nicht nur die Daten für stationäre Lastpunkte, sondern darüber hinaus auch die wesentlichen Eingangsgrößen für die Berechnung des Partikelmassenstroms im transienten Motorbetrieb.

n_{akt} und \dot{m}_B sind von den Vorgaben und Änderungen an der Systemgrenze abhängig, wie Gleichung (4.1) und Abb. 4.2 zu entnehmen ist:

$$[n_{akt}, \dot{m}_B] = f(n_{ord,1}, n_{ord,2}, P_{ord,1}, P_{ord,2}) \quad (4.1)$$

mit

$n_{ord,1}, n_{ord,2}$	Drehzahlvorgabe vor (Index 1) bzw. nach einer Änderung (Index 2)
$P_{ord,1}, P_{ord,2}$	Leistungsvorgabe vor (Index 1) bzw. nach einer Änderung (Index 2)

Eine Änderung der Leistungsanforderung von $P_{ord,1}$ nach $P_{ord,2}$, bspw. über eine Erhöhung des Anstiegs der Propellerflügel p bei gleichbleibender Drehzahl n_{ord} bewirkt, dass erst einmal ein Einbruch der aktuell anliegenden Motordrehzahl zu verzeichnen ist, welche mittels eines Reglers mit Proportional-, Integral- und Differentialanteilen durch erhöhte Brennstoffzufuhr dem geordneten Drehzahlwert wieder angeglichen werden muss.

Die wesentlichen Funktionen, die hinter Gleichung (4.1) stehen, sind ein PID-Regelalgorithmus (4.2) und eine Differentialgleichung (4.3). Die Differenz e zwischen Drehzahl-Sollwert n_{ord} und Drehzahl-Istwert n_{akt} bildet die Eingangsgröße für diesen PID-Regleralgorithmus. Dieser lautet:

$$u(t) = K_P e(t) + K_I \int_0^t e(\tau) d\tau + K_D \dot{e}(t) \quad (4.2)$$

mit

$u(t)$	zeitlich abhängiger Wert der Regelgröße, Steuergröße
K_P	Proportional-Anteil
K_I	Integral-Anteil
K_D	Differential-Anteil

¹ „vereinfacht“ bedeutet, dass die Energieumsetzung überschlagsmäßig anhand einer Näherungsformel vorgenommen wird. Auf eine °KW-aufgelöste Berechnung des Einzonenmodells (vgl. 2.1.1) wird verzichtet.

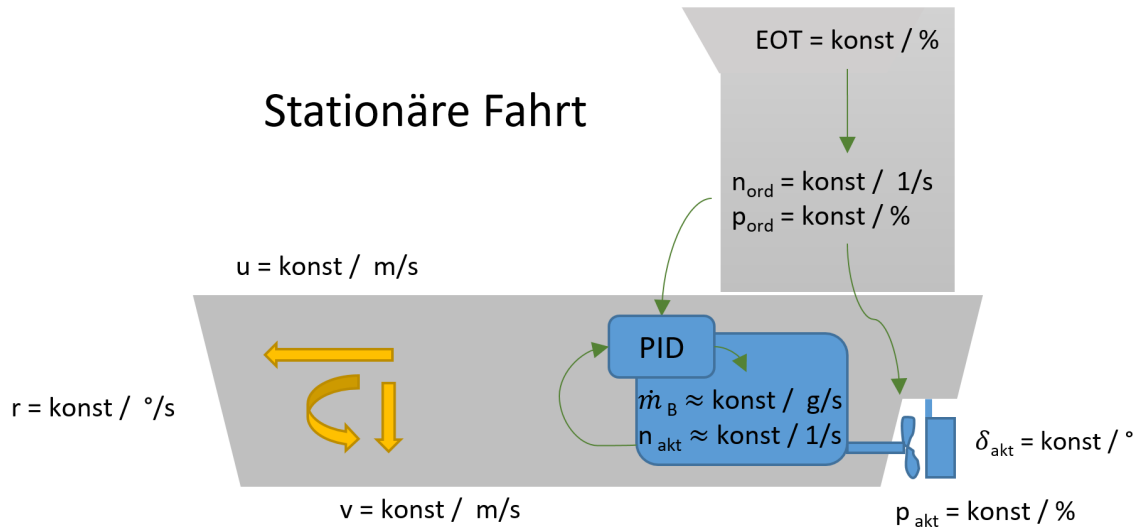


Abbildung 4.2: Schematische Darstellung eines Schiffes in stationärer Fahrt: Über den Maschinentelegraphen (EOT) wird ein Kommando an die Maschine gegeben. Anhand von Hoch-/Runterfahrkurven wird dieses Kommando in Sollwerte für Drehzahl n_{ord} und (im Falle eines Verstellpropeller-Antriebs) Propellersteigung p_{ord} transformiert. Während sich p_{ord} mittels einer geordneten Leistung P_{ord} direkt auf das Gegenmoment des Motors auswirkt, werden Soll- und Ist-Drehzahl verglichen. Der PID-Regler berechnet damit die nötige Brennstoffzufuhr \dot{m}_B .

Das Ergebnis des Regelalgorithmus' ist die einzuspritzende Brennstoffmenge. Somit gilt $u \equiv \dot{m}_B$. Über einen drehzahl- und leistungsabhängigen Wirkungsgrad und unter Einbeziehung des Brennstoffheizwertes wird die zur Verfügung stehende Antriebsleistung berechnet. Das Motormoment ergibt sich bei Division der Antriebsleistung durch die Kreisfrequenz des Motors. Zwischen Propellermoment $M_{P,akt}$, welches dem Gegenmoment des Motors entspricht, und dem Motormoment $M_{M,akt}$ wird die Differenz gebildet und anschließend auf das Trägheitsmoment des Antriebsstrangs I bezogen. Die in der Differenzialgleichung (4.3) errechnete Drehzahlbeschleunigung wird zur aktuellen Drehzahl hinzuaddiert.

$$n_{akt,t+1} = n_{akt,t} + \frac{M_{M,akt} - M_{P,akt}}{1000 \cdot I} \cdot \Delta t \cdot \frac{1}{2\pi} \quad (4.3)$$

mit

n_{akt}	Motordrehzahl in s^{-1}
$M_{P,akt}$	Propellermoment, Gegenmoment des Motors in kNm
$M_{M,akt}$	Motormoment in kNm
I	Trägheitsmoment des Antriebsstrangs in kgm^2

Die Parameter von Regler und dem vereinfachten Motormodell lassen sich durch Parametervariation ermitteln, sofern keine Herstellerangaben vorliegen [104]. Unter Nutzung weiterer Kennwerte und detaillierteren Algorithmen des Motors und dessen angrenzenden Systemen

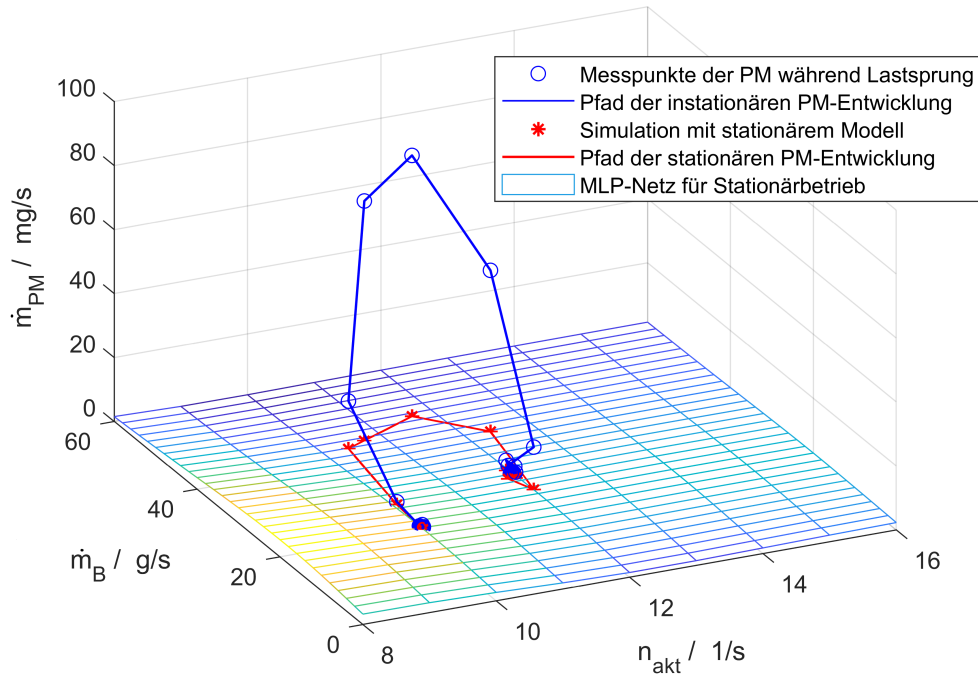


Abbildung 4.3: Beispiel eines Lastsprungs von 30 % auf 50 % im 100%-Propellerbetrieb; rot: simulierter Verlauf der Partikelemissionen mithilfe des stationären MLP-Netzes, blau: gemessener Verlauf.

könnte die Berechnung des Gesamtmotorbetriebs inklusive der Innenprozessrechnung mit anschließender Leistungsabgabe, aufgelöst nach $^{\circ}KW$, und Emissionsberechnung erfolgen, wie im theoretischen Teil der Literaturrecherche, speziell in 2.1.6 bereits angedeutet wurde. Das hier zu untersuchende empirische Partikelemissionsmodell soll sich jedoch der Ergebnisse des vereinfachten Antriebsmodells bedienen. Dadurch wird zwar die Anzahl der möglichen Modell-Eingangsgrößen erheblich einschränkt, vorteilhaft ist diese Herangehensweise jedoch bezüglich der reduzierten Rechenzeit.

4.2 Stationärer Anteil: mit statischem MLP-Netz

In Abhängigkeit der in 3.1 argumentierten Eingangsgrößen, n_{akt} und \dot{m}_B , ist eine Abbildung des im stationären Motorbetrieb erzeugten Partikelmassenstroms \dot{m}_{PM} in einem 3-dimensionalen Kennfeld möglich. Ein entsprechendes Kennfeld kann durch eines der in 2.2.1 genannten klassischen Verfahren erstellt werden. Im Hinblick auf den Fokus der Untersuchungen, die Künstlichen Neuronen Netze (KNN), wird hier das Verfahren „Multi-Layer-Perzeptron-Netz“ gewählt. Es mag widersprüchlich klingen, für die synthetische Datengenerierung einen Ansatz zu wählen, den es im Nachgang zu untersuchen gilt. Hier geschieht es aus zweierlei Gründen:

- 1) Die theoretischen Erläuterungen zu einem stationären KNN sind in Unterabschnitt 2.4.1 dargelegt worden. Deren praktische Umsetzung bildet einen idealen Einstieg für ein besseres Verständnis der Verfahren in Kapitel 5.

- 2) Aufgrund der 3-Dimensionalität und den in 3.4.1 definierten Bewertungskriterien ist es möglich, ein statisches MLP-Netz zu bestimmen, welches nachweislich und sichtbar eine plausible Grundlage für die Simulation des Stationäranteils bildet. Andere Ansätze könnten diesen Anspruch nach Einschätzung der Verfasserin sicherlich ebenso gut erfüllen.

Für die Anwendbarkeit eines statischen MLP-Netzes wird vorausgesetzt, dass die statische Nichtlinearität der Problemstellung eine eindeutige Zuordnung von Input zu Output zulässt. Durch Gleichung (3.2) auf Seite 49 ist diese Voraussetzung für den vorliegenden Fall erfüllt.

4.2.1 Training und Validierung

Bei einem MLP-Netz mit zwei Eingängen $u_1 \equiv n_{akt}$ und $u_2 \equiv \dot{m}_B$ und einem Ausgabewert $\hat{y} \equiv \dot{m}_{PM}$ erhöht sich die Zahl der zusätzlich zu schätzenden Parameter für jedes weitere versteckte Neuron um den Wert vier. Literatur wie [102] oder [105] sowie auch das Sammeln von Erfahrungen während der programmtechnischen Umsetzung haben zu einer Festlegung von Minimum- bzw. Maximumwerten für das Hyperparameter Tuning geführt, um diesem bei der mehrdimensionalen k-fachen Kreuzvalidierung einen plausiblen Rahmen zu geben. Der Ausdruck „k-fach“ meint hier, dass die 120 Messpunkte von Generatorkurve und 100%-Propellerkurve in $k = 4$ Gruppen unterteilt werden, wobei jeweils 3/4 für das Training und 1/4 zur Validierung genutzt werden.

Die oben genannten Hyperparameter und - wo als sinnvoll erachtet auch ihre Intervallgrenzen und Schrittweiten - wurden wie folgt festgelegt:

Anzahl der versteckten Neuronen n :	[4, 10], mit Schrittweite 1
Aktivierungsfunktion $\varphi(z_i)$:	Tangens hyperbolicus
Anzahl versteckter Schichten N :	eine Zwischenschicht N
Lernrate α :	[0.002, 0.02], ohne Zwischenschritte
Größe eines Batches:	[1, 8], ohne Zwischenschritte
Anzahl Epochen:	[3000, 6000], ohne Zwischenschritte

Dem Verzerrung-Varianz-Dilemma soll mithilfe der k-fachen Kreuzvalidierung so gut wie möglich begegnet werden, um auf eine geeignete Anzahl versteckter Neuronen zu schließen. Abb. 4.4 zeigt das Ergebnis einer 4-fachen Kreuzvalidierung mit 3000 Trainingsepochen, einer Lernrate von 0,002 und einem 8er-Mini-Batch. Variabel ist die Modellkomplexität, beschrieben durch die Anzahl versteckter Neuronen. Das Intervall für die Anzahl versteckter Neuronen wurde hier exemplarisch auf 1 bis 45 Neuronen ausgeweitet, um das Verzerrungs-Varianz-Dilemma anhand eines praktischen Beispiels aufzeigen zu können. Der Hyperparameter „Anzahl versteckter Schichten“ wurde gleich eins gesetzt, um die Modellkomplexität nur noch von der Anzahl versteckter Neuronen in der einen Zwischenschicht abhängig zu machen. Während für das vorliegende Problem eine einzige Zwischenschicht als ausreichend erachtet wird, bedürfen komplexere Probleme ggf. mehrerer versteckter Schichten.²

Training und Validierung im Rahmen der mehrdimensionalen k-fachen Kreuzvalidierung haben mittels einer rein numerischen Bewertung auf Grundlage der statistischen Bewertungskriterien zu einer Eingrenzung geführt, in deren Rahmen mit großer Wahrscheinlichkeit die

² Wird im Zusammenhang mit KI von „Deep Learning“ gesprochen, so sind KNN gemeint, die sowohl mehrere Zwischenschichten als auch rückwirkende Verbindungen zwischen diesen Schichten aufweisen können.

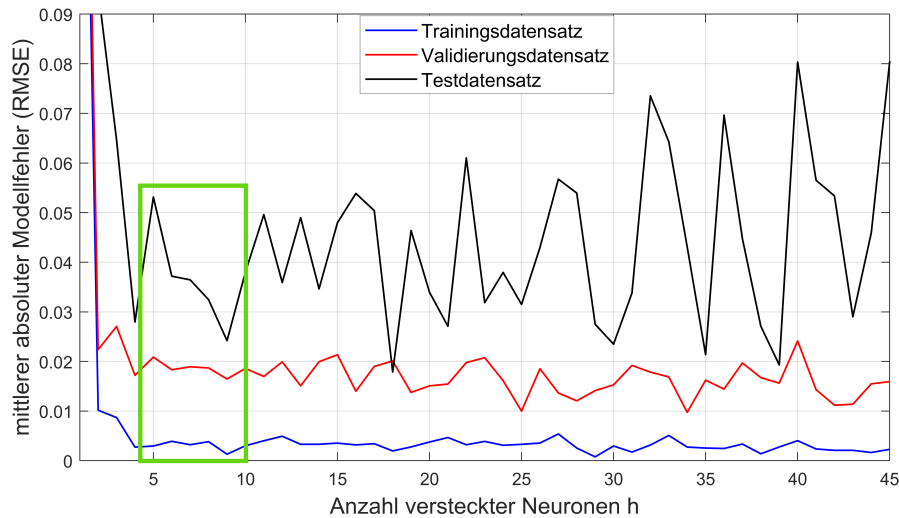


Abbildung 4.4: Ergebnis 4-facher Kreuzvalidierung mit 3000 Trainingsepochen, einer Lernrate von 0,002 und 8er-Mini-Batch: Der anfängliche Rückgang des Vorhersagefehlers aufgrund sinkender Verzerrung wird gefolgt von einem Anstieg des Vorhersagefehlers insbesondere beim Testdatensatz infolge erhöhter Varianz. (blau: Simulation mit Trainingsdaten; rot: Simulation mit Validierungsdaten; schwarz: Simulation mit Testdaten; grün umrandet: für die Untersuchungen interessanter Bereich)

am besten geeigneten Hyperparameter zu finden sind:

- 5 oder 6 versteckte Neuronen mit 3000 Epochen, Lernrate von 0,02 und Single Sample
- 5 oder 6 versteckte Neuronen mit 6000 Epochen, Lernrate von 0,02 und Single Sample
- 6 oder 7 versteckte Neuronen mit 3000 Epochen, Lernrate von 0,002 und 8er-Mini-Batch

Eine wiederholte, weiter eingeschränkte Kreuzvalidierung auf Basis dieser Erkenntnisse führte im Ergebnis zu zwei MLP-Netzen, welche die quantitativen Bewertungskriterien aus 3.4.1 mit Abstand am besten erfüllen:

- (a) 6 versteckte Neuronen, 3000 Epochen, $\alpha = 0,02$ und Single Sample Batch führten zu einem durchschnittlichen Trainings-/Validierungs-Fehler von $0,0034 \text{ mg s}^{-1}$ ($\hat{=} < 1\%$)
- (b) 7 versteckte Neuronen, 3000 Epochen, $\alpha = 0,002$ und ein 8er-Mini-Batch führten zu einem durchschnittlichen Trainings-/Validierungs-Fehler von $0,0062 \text{ mg s}^{-1}$ ($\hat{=} < 1\%$)

Abb. 4.5, sowie die Darstellungen in Anhang C.1 zeigen die beiden MLP-Netze (Netz (a) jeweils auf der linken, Netz (b) auf der rechten Seite) und die konkreten Ergebnisse der Simulation. In diesen Abbildungen werden Trainings- und Validierungsdatensätze (Messpunkte und deren Simulation) zusammengefasst dargestellt.

Vorteile von Netz (a) gegenüber Netz (b) sind:

- Vorhersagen im niedrigsten, nicht vermessenen Lastbereich bleiben noch länger im positiven Bereich

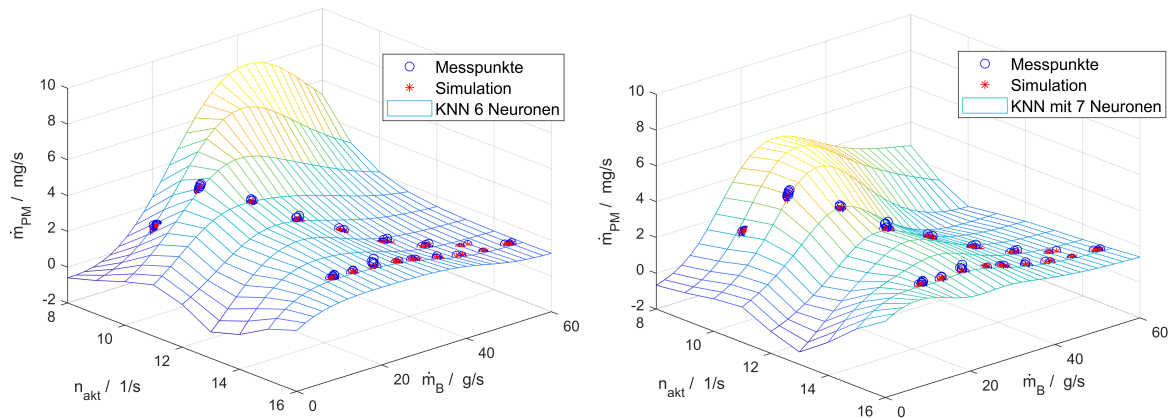


Abbildung 4.5: Darstellung von Trainings- und Validierungsdaten; links: MLP-Netz (a) mit 6 Neuronen, rechts: MLP-Netz (b) mit 7 Neuronen; blau: Messpunkte, rot: Simulation

- qualitativ wird der Verlauf im Kennfeldbereich zwischen Generatorkurve und 100%-Propellerkurve als realistischer eingeschätzt.
- Weniger versteckte Neuronen bedeutet eine geringer Modellkomplexität (25 statt 29 Gewichte)

Vorteile von Netz (b) gegenüber Netz (a) sind:

- Vorhersagen im nicht gemessenen Lastbereich über der 100%-Propellerkurve steigen nicht so stark an und werden daher als realistischer eingeschätzt
- die weniger starken Gradienten führen dazu, dass die Simulation nicht so sehr streut und sich näher am Mittelwert befindet (vgl. Abb. C.1).

4.2.2 Testung

Mit den stationären Messpunkten der 85%-Propellerkurve wurden die beiden MLP-Netze abschließend getestet. Abb. 4.6 und 4.7 zeigen die Ergebnisse dargestellt einerseits im statischen MLP-Netz als auch in den Box Plots. Bezogen auf den Testdatensatz kann beobachtet werden:

- dass der durchschnittliche Testfehler bei MLP-Netz (b) bei 0,0087 mg/s bzw. unter 1 % liegt (bei Netz (a) beträgt dieser 0,0224 mg/s bzw. unter 2,3 %).
- Die Vorhersagen in Netz (b) bewegen sich jeweils in den Spannweiten der Box Plots, wenn auch teils sehr grenzwertig, während sich in Netz (a) die Vorhersage insbesondere bei 16% Last außerhalb/unterhalb des angestrebten Bereichs befindet.

Aufgrund dieser Abwägungen wurde MLP-Netz (b) zur weiteren Verwendung ausgewählt. Auf Basis des hier entstandenen statischen Modells für den stationären Betrieb, kann versucht werden, Messungen von Laständerungen nachzubilden. Wie zu erwarten und Abb. 4.3 auf Seite 66 zu entnehmen ist, wird damit lediglich der stationäre Anteil simuliert. Eine Möglichkeit, den transienten Anteil synthetisch zu erzeugen, soll im folgenden Unterabschnitt erläutert werden.

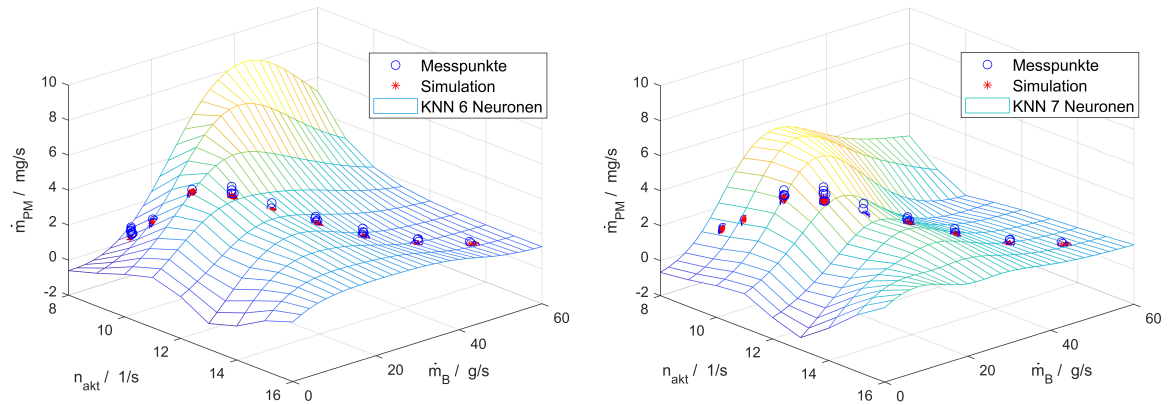


Abbildung 4.6: Darstellung von Testdatensatz 85%-Propellerkurve; links: MLP-Netz (a) mit 6 Neuronen, rechts: MLP-Netz (b) mit 7 Neuronen; blau: Messpunkte, rot: Simulation

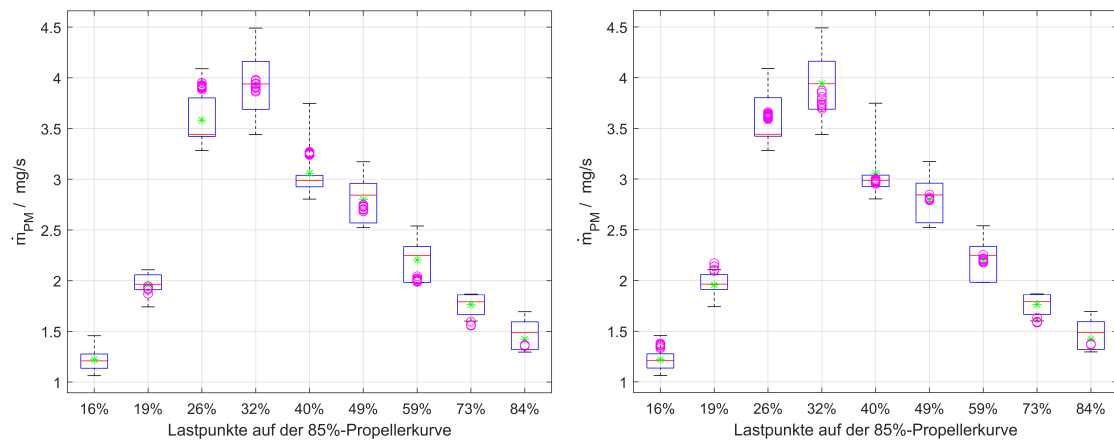


Abbildung 4.7: Box Plots von 85%-Propellerkurve (links MLP-Netz (a), rechts MLP-Netz (b)), grün: gemessene Mittelwerte, magenta: Simulation

4.2.3 Übertragbarkeit der Methode

Dieselbe Herangehensweise wurde für die Messdaten des Stationärbetriebs vom Prüfstandmotor 6M20 angewandt. Dabei hat sich gezeigt, dass die Methode übertragbar ist, Rastersuche und Kreuzvalidierung jedoch auf andere Hyperparameter schließen lassen. Im vorliegenden Fall sind dies: 6 versteckte Neuronen trainiert über 6000 Epochen mit einer Lernrate von 0,02 und im Single Sample Modus. Das Ergebnis wurde in Abb. 4.10 auf Seite 74 zur Berechnung des transienten Anteils des Partikelmassenstroms verwendet.

4.3 Transienter Anteil: mit doppelter Exponentialfunktion nach Vibe

Wird der Stationäranteil des Partikelmassenstroms für jeden Messzeitpunkt von den tatsächlich aufgezeichneten Partikeln subtrahiert, bleibt der instationäre Anteil übrig. Für Lastwechsel, die eine Lasterhöhung bewirken, lässt sich beobachten, dass

- in einem begrenzten Zeitraum, während der Instationarität, „Mehr-Emissionen“ auftreten,
- die „Mehr-Emissionen“ sich zu $m_{PM,trans,tot}$ integrieren lassen, und dass
- der Maximalwert der „Mehr-Emissionen“ aufgrund von Instationarität eine für den jeweiligen Lastwechsel bestimmte Lage annimmt, was der Kurve einen charakteristischen Verlauf gibt.

Die genannten Beobachtungen (begrenzter Zeitraum, $m_{PM,trans,tot}$ und der charakteristische Verlauf) entsprechen in ihrem Wesen den drei Parametern, die bei Vibe in [106] Verwendung finden, um mithilfe des sogenannten Ersatzbrennverlaufs aus Gleichung (4.4) den gemessenen Brennverlauf, wie bspw. in Abb. 4.8 dargestellt, mathematisch zu beschreiben: Verbrennungsdauer t_z , gesamte bis Verbrennungsende freigesetzte Wärme $Q_{x,max}$ ³ und Formfaktor m . Es handelt sich dabei um die Beschreibung der Wärmefreisetzung während der Hochdruckphase bei der motorischen Verbrennung.

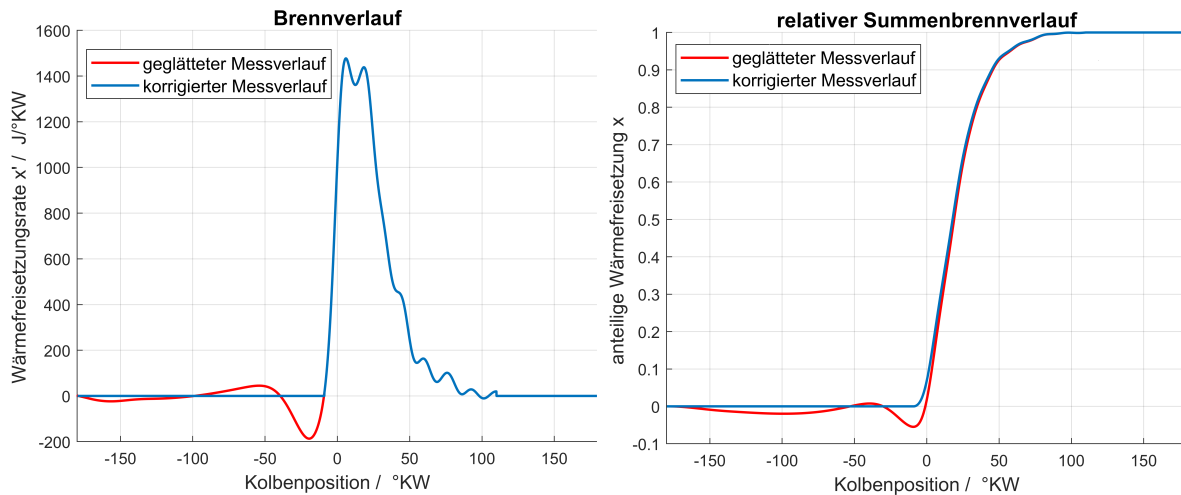


Abbildung 4.8: Brennverlauf (links) bzw. relativer Summenbrennverlauf (rechts) aus Messdaten bei 100% Leistung auf der Generatorkurve ermittelt; rot: geglättete Verläufe, blau: korrigierte Verläufe ohne negative Werte, um die Anwendbarkeit des Vibe-Ansatzes zu gewährleisten. Der obere Totpunkt (OT) befindet sich bei 0 °KW.

³ In Abschnitt 2.1 wurde an dieser Stelle von Reaktionsenthalpie H_R gesprochen. Hier wird die ebenfalls gängige Nomenklatur des Referenzautors Vibe übernommen.

$$\frac{\delta Q_x}{dt} = \frac{Q_{x, \max}}{t_z} C(m+1) \left(\frac{t}{t_z}\right)^m e^{-C \left(\frac{t}{t_z}\right)^{m+1}} \quad (4.4)$$

mit

$\frac{\delta Q_x}{dt}$	die durch Verbrennung freigesetzte Wärme in $kJ s^{-1}$
$Q_{x, \max}$	insgesamt in einer Hochdruckphase in einem Zylinder freigesetzte Wärme in kJ
t_z	Verbrennungsdauer in s
C	errechnet sich mit $C = -\ln(1 - x_z)$, meist mit -6,908 definiert
x_z	Kraftstoffanteil, der bis t_z verbrennt wird, meist zu 0,999 definiert
m	Formfaktor, beschreibt Steilheit des Anstiegs bzw. charakteristischen Verlauf

4.3.1 Theorie zur doppelten Exponentialfunktion nach Vibe

Eine ausführliche Herleitung von (4.4) findet sich in [106]. Entsprechend dazu wird im Folgenden die Übertragbarkeit des Vibe-Ansatzes auf das vorliegende Problem dargestellt und begründet. Der Ursprung des Vibe-Ansatzes liegt in der Beschreibung von Kettenreaktionen und deren Geschwindigkeitsgleichungen.

$$x = 1 - e^{-\int_0^t n \rho dt} \quad (4.5)$$

mit

x	Anteil der Edukte, die bis zum Zeitpunkt t zur Partikelbildung beigetragen haben
n	Konstante
ρ	relative Dichte: Verhältnis der aktiven Anteile des Ausgangsstoffs zu Gesamtmenge

Nach Vibe zeichnet sich Gleichung (4.5) dadurch aus, „daß bei ihrer Herleitung keinerlei Annahmen bezüglich der speziellen Eigenschaften des reagierenden Systems [...] mit Ausnahme dessen gemacht wurden, daß die Reaktion nach einem Kettenmechanismus verläuft. Auf Grund ihrer Allgemeingültigkeit kann Gleichung (4.5) für die Herleitung der Gleichung der Verbrennungsgeschwindigkeit in Motoren herangezogen werden. Selbstverständlich muß man, um diese konkrete Aufgabe lösen zu können, zusätzlich das Integral in [(4.5), Anmerk. d. Verf.] bestimmen, d.h. die Funktion, die die spezifischen Eigenschaften des Systems wiedergibt“ [106, S. 49f].

Die Bedingung, es mit einem Kettenmechanismus zu tun haben zu müssen, kann hinsichtlich der Emissionsentstehung damit begründet werden, dass ein Kommandowechsel, sei es durch eine neue Drehzahlvorgabe oder eine neues Gegenmoment, ein Ungleichgewicht im Verbrennungsprozess bewirkt, welches zu einem neuen stationären Betriebszustand strebt. Während dieses Zeitraums des transienten Betriebs findet ein Prozess statt, der einem Kettenmechanismus gleichkommt: Das Verbrennungsluftverhältnis λ verändert sich bedingt durch die Trägheit des Gesamtsystems und führt unweigerlich zu einer „Mehremission“ von Partikeln während der Lastzunahme. Es stellt sich die Frage, welche Funktion $f(t)$ die spezifischen Eigenschaften des Systems in (4.6) am geeignetsten abbildet.

$$\Phi[f(t)] = x = 1 - e^{-f(t)} \quad (4.6)$$

Vibe stellt insgesamt acht Bedingungen auf, die durch $f(t)$ erfüllt sein müssen [106, S.52]:

1. Es gilt $f(0) = 0$.
2. $f(t)$ muss kontinuierlich sein.
3. $f(t)$ ist monoton anwachsend für $t = 0$ bis $t = +\infty$.
4. $\lim_{x \rightarrow 1} f(t) = +\infty$ bei $t \rightarrow \infty$
5. Anfangsgeschwindigkeit x'_0 muss ≥ 0 sein: $x'_0 = n\rho \geq 0$ (vgl.(4.5)).
6. Für $t \rightarrow \infty$ muss $x' \rightarrow 0$ gelten.
7. $\int_0^\infty \Phi'[f(t)]dt = 1$
8. x' muss ein Maximum besitzen.

Bezogen auf die gemessenen PM-Verläufe und deren gesondert betrachteten transienten Anteile kann beobachtet werden, dass zum Zeitpunkt t_0 $x = 0$ ist, was die 1. Bedingung erfüllt. Abb. 4.9 zeigt beispielhaft, dass für diesen Lastsprung $t_0 = 9$ gilt.

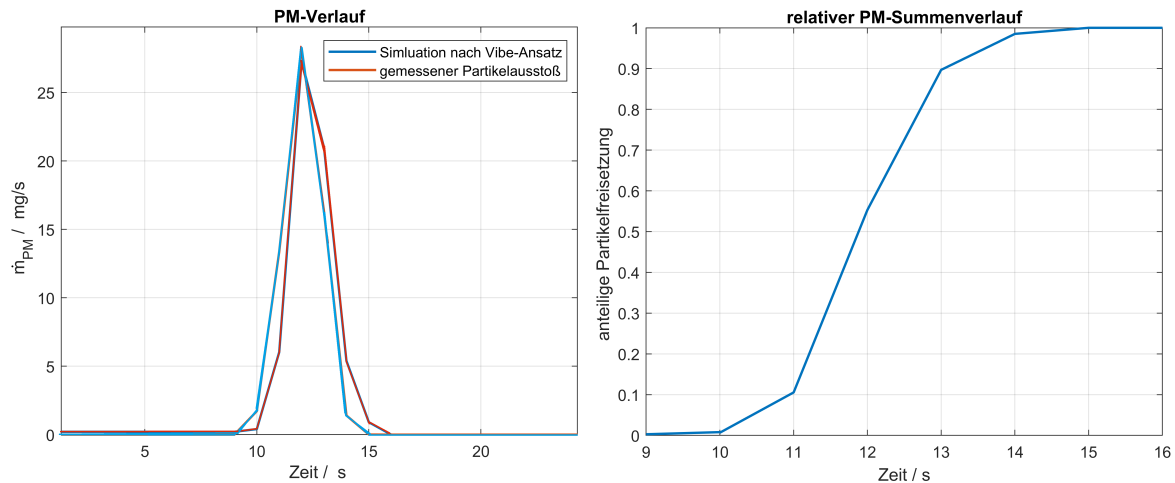


Abbildung 4.9: PM-Verlauf (links) bzw. relativer Summenbrennverlauf (rechts) aus Messdaten eines Lastsprungs vom 6L23/30er-Motor von 50 % auf 70 % auf der 100%-Propellerkurve; rot: gemessener Partikelmassenstrom in mg/s , blau: Simulation mithilfe der in Anlehnung an den Vibe-Ansatz ermittelten Parameter

Zu diesem Zeitpunkt beginnt der Anstieg des transienten Anteils. Die anteilige Partikelfreisetzung beginnt mit $x = 0$ und endet nach 5 Sekunden mit $x = 1$. Der Verlauf von x nähert sich kontinuierlich und asymptotisch dem Ordinatenwert 1, was die Anforderungen der Bedingungen 2, 3, 4 und 7 berücksichtigt. Zu Beginn des Lastwechsels ist die Partikelentstehungsrate für den transienten Anteil 0 (Bedingung 5). Bedingung 8 erfordert ein Maximum im Verlauf der Entstehungsrate und Bedingung 6 verlangt ein Abklingen derselben zum Prozessende hin, was beides aus Abb. 4.9 (links) hervorgeht. Vibe spricht von einer halbempirischen Gleichung, womit gemeint ist, dass der Verlauf des in (4.5) ursprünglich als „relative Dichte“ benannten Terms $\rho(t)$ aus empirischen Versuchen hervorgeht und mit der Potenzfunktion (4.7) abgebildet werden kann.

$$\rho = kt^m \quad (4.7)$$

mit

- k Proportionalitätsfaktor
- m Kennziffer, Formfaktor, charakteristisch für die zeitliche Änderung von x

Das Versuchsmaterial für die vorliegende Arbeit stammt von zwei Prüfständen. Vergleichende Untersuchungen haben ergeben, dass eine Anwendung der Exponentialfunktion den tatsächlichen Verlauf des transienten Anteils der Partikelemissionen zufriedenstellend widerspiegelt (Abb. 4.10) und deshalb angenommen werden darf, dass (4.7) für die Übertragung auf das Problem der Partikelentstehung berechtigterweise angesetzt wird (vgl. [106, S. 51]).

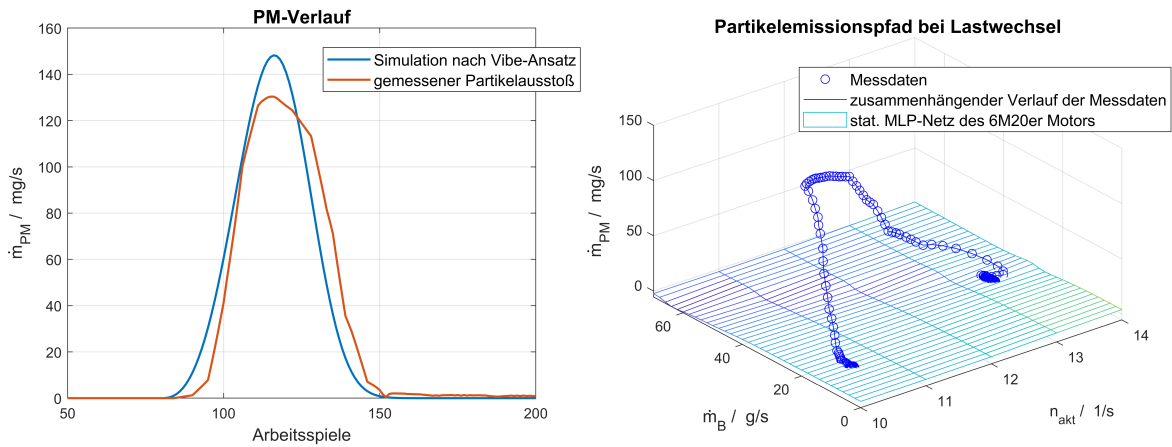


Abbildung 4.10: PM-Verlauf beim 6M20er-Motor während eines Lastsprungs von 25 % auf 50 % auf der 100%-Propellerkurve. links: aus Messdaten berechneter, transienter Anteil des Partikelmassenstroms (rot) bzw. über den Vibe-Ansatz nachgebildeter Verlauf (blau) über den Arbeitsspielen; rechts: Zusammenwirken von Drehzahl und Verbrauch während desselben Lastwechsels und deren Auswirkung auf den PM-Verlauf.

Sowohl n als auch k sind Konstanten, so dass sie im Folgenden zusammengefasst mit K bezeichnet werden. $f(t)$ lautet dann gemäß Gleichung (4.8) und kann in (4.6) eingesetzt werden, was zu Gleichung (4.9) führt.

$$f(t) = K \int_0^t t^m dt = \frac{K}{m+1} t^{m+1} \quad (4.8)$$

$$x = 1 - e^{-\frac{K}{m+1} t^{m+1}} \quad (4.9)$$

Rein rechnerisch wird aufgrund von Bedingung 3 nie ein Ende der Partikelbildung erreicht werden, was jedoch durch Bedingung 6 relativiert wird. Zu welchem Zeitpunkt der transiente Anteil den Wert 0 annimmt, muss im vorliegenden Fall entsprechend der Begründung von Vibe [106, S. 54] gehandhabt und davon ausgegangen werden, dass „man einen Prozeß praktisch als abgeschlossen betrachten kann, wenn fast die gesamte Stoffmenge in die Reaktion einbezogen ist.“ Er selbst definiert den Zeitraum von $t = 0$ bis zur Freisetzung von 99,9 % der Wärme als

Verbrennungsdauer und bezeichnet diese mit t_z . Diese Definition wird analog übernommen, so dass bei Erreichen von $x_z = 99,9\%$ der umzusetzenden Edukte nach der Dauer t_z der transiente Zustand als beendet angenommen wird. Nach dieser Definition kann eine Relativierung der Bildungsdauer t_z vorgenommen werden, indem Gleichung (4.9) logarithmiert und durch Gleichung (4.10) dividiert wird, welche den Endzustand z des Prozesses widerspiegelt.

$$-\frac{K}{m+1}t_z^{m+1} = \ln(1-x_z) \quad (4.10)$$

mit

x_z Anteil der Edukte, die bis t_z zur Partikelbildung beigetragen haben,
 t_z Dauer, nach welcher der transiente Zustand als beendet angenommen wird.

Das Ergebnis dieser Division ergibt nach Umformen:

$$x = 1 - e^{-\ln(1-x_z)\left(\frac{t}{t_z}\right)^{m+1}} \quad (4.11)$$

Der logarithmierte Ausdruck im Exponenten von Gleichung (4.11) kann, da x_z bereits definiert wurde, berechnet und im Folgenden als Konstante C Verwendung finden.

$$C = \ln(1-x_z) \quad (4.12)$$

mit

$C = 6,908$, da x_z mit $99,9\%$ definiert wurde

Der zu berechnende Ausdruck x in (4.11) repräsentiert den Anteil an Edukten, die im Laufe der Zeit zur Partikelbildung beigetragen haben. Experimentell kann das Ergebnis aus (4.11) mit Gleichung (4.13) verifiziert werden.

$$x = \frac{m_{\text{PM,trans}}}{m_{\text{PM,trans,tot}}} \quad (4.13)$$

mit

$m_{\text{PM,trans}}$ Partikel (trans.), die bis zum aktuellen Zeitpunkt gemessen wurden in mg
 $m_{\text{PM,trans,tot}}$ Partikel (trans.), die bis zum Ende des Lastwechsels entstehen in mg

Nachstehend wird aufgezeigt, wie auf Basis der experimentell ermittelten Daten die Dauer der Instationarität t_z und der Formfaktor m bestimmt werden können. Eine ausführliche Herleitung der Gleichungen ist in [106, S. 59ff] zu finden.

Gleichung (4.11) lässt sich durch Umstellen und anschließender Multiplikation mit -1 sowie durch zweifaches Logarithmieren und weiteres Umstellen in eine Geradengleichung umschreiben. Nach Überführen der natürlichen Logarithmen in deren dekadische Form lautet die Geradengleichung:

$$\lg(t) = \frac{1}{m+1} \left\{ \lg \left[-2,303 \cdot \lg(1-x) \right] - \lg(-C) \right\} + \lg(t_z) \quad (4.14)$$

mit

$$\frac{1}{m+1} \quad \text{Steigung der Geraden}$$

$$lg(t_z) \quad \text{Ordinatenabschnitt, wobei } t_z \text{ die Verbrennungsdauer bezeichnet.}$$

Der Einfachheit halber werden zusammenfassende Bezeichner gewählt, so dass aus (4.14) Gleichung (4.15) wird.

$$Y = \frac{1}{m+1} X + A \quad (4.15)$$

mit

$$\begin{aligned} Y &= lg(t) \\ X &= lg\left[-2,303 \cdot lg(1-x)\right] - lg(-C) \\ A &= lg(t_z) \end{aligned}$$

Über die Methode der kleinsten Fehlerquadrate können m und $t_z = 10^A$ bestimmt werden.

$$m = \frac{n \sum_{\theta=1}^S X^2 - \left(\sum_{\theta=1}^S X\right)^2}{S \sum_{\theta=1}^S (XY) - \left(\sum_{\theta=1}^S X\right) \left(\sum_{\theta=1}^S Y\right)} - 1 \quad (4.16)$$

mit

$$\begin{aligned} S &\quad \text{Anzahl Messpunkte, Samples} \\ \theta &\quad \text{Zählvariable} \end{aligned}$$

$$t_z = 10^{\frac{\sum_{\theta=1}^S Y - \frac{1}{m+1} \sum_{\theta=1}^S X}{S}} \quad (4.17)$$

An dieser Stelle soll darauf hingewiesen werden, dass die dieselmotorische Verbrennung zwar Voraussetzung sowohl für die Umwandlung chemisch gebundener Energie aus dem Brennstoff als auch für die Partikelentstehung ist, die Verläufe dennoch zeitlich nicht korrelieren. Während sich der Brennverlauf beim 4-Takt-Motor alle 720 °KW ermitteln bzw. berechnen lässt, handelt es sich bei den Partikelmessungen eines Lastwechsels um einen Verlauf im Zeitbereich in der Größenordnung von mehreren Sekunden und somit über zahlreiche Arbeitsspiele. Die Methode, die für die Berechnung des Ersatzbrennverlaufes Verwendung findet, sollte hier lediglich als wissenschaftlich bestätigte Vorlage dienen, um anhand der wesensgleichen Eingangsparameter einen entsprechenden Verlauf zu simulieren.

4.3.2 Praktische Umsetzung zur Simulation des transienten Anteils an Partikelemissionen

Die vorgestellte Methode wurde auf alle gemessenen Lastwechsel angewandt und so die drei Kennwerte ermittelt, die eingangs dieses Abschnittes lediglich als Beobachtung im Raum standen. Jede Laständerung und deren Auswirkung wird über die bis zum nächsten stationären Zustand zusätzlich emittierten Partikel $m_{PM,trans,tot}$, die Dauer der Instationarität t_z sowie über den Formfaktor m charakterisiert. Die Praxis zeigt, dass auch nach der Subtraktion des simulierten Stationäranteils die asymptotische Annäherung an die Abszisse (Bedingung 6) nicht immer gewährleistet ist, und diese Abweichung durch das Messrauschen oftmals noch unterstützt wird. Bei Lasterhöhung wurde deshalb das Erreichen des Wertes Null zum Ende des Lastsprungs in Anlehnung an die gängige Praxis beim Vibe-Ansatz künstlich abgekürzt (vgl. Abb. 4.8). Die berechneten Kennwerte bilden die meisten Lastsprünge im Rahmen der angestrebten Genauigkeit ab (vgl. 3.4.2). Da, wo dies nicht der Fall ist, werden die berechneten Kennwerte als Startwerte für den Nelder-Mead Simplex-Algorithmus [107], ein Gradientenabstiegsverfahren zur Optimierung nichtlinearer Funktionen mit mehreren Parametern, genutzt. Die Ergebnisse bedurften teilweise noch kleineren manuellen Anpassungen, um eine Streuung der resultierenden Kennwerte zu verringern und damit eine nachvollziehbare Kennfelddarstellung zu erlauben.

Für Lasterhöhungen konnte eine einheitliche Herangehensweise identifiziert werden. Für Lastreduktionen war diese nur bei sehr wenigen Lastwechseln sinnvoll durchführbar: Dem stationären MLP-Netz ist zu entnehmen, dass niedrige Lastpunkte im Stationärbetrieb oft einen höheren Partikelaustritt bedeuten, als dies bspw. bei Nennlast der Fall ist. Bei einer Lastreduktion kann somit einerseits eine Partikelzunahme beobachtet werden (Stationäranteil), andererseits entstehen aufgrund erhöhten Verbrennungsluftverhältnisses weniger Partikel (transienter Anteil). Diese gegenläufige und oft über mehrere Dutzend Sekunden andauernde Entwicklung, die meist in der Größenordnung des Messrauschens stattfindet, wird bei der Erzeugung der synthetischen Daten vereinfacht nachgebildet werden: Für alle Lastreduktionen werden die drei Parameter einheitlich und lediglich in Abhängigkeit von der geordneten Drehzahl berechnet. Diese Berechnung wurde experimentell mit dem Fokus auf eine relativ gute Annäherung für alle Betriebsmodi ausgeführt.

Abb. 4.11 illustriert die vorangehenden Erläuterungen anhand eines Beispiels. Es ist offensichtlich, dass die Verläufe bei Lastreduktion keine großen Sprünge zulassen⁴, weshalb ein Modellfehler relativ gering bleibt. Vielmehr geht es darum, einen plausiblen und qualitativ ähnlichen Verlauf zu erzeugen, um die weiteren Verfahren damit zu untersuchen. Abb. C.3 unterstützt diese Entscheidung und unterstreicht, wie relativ gering der Unterschied zwischen einer stationären Simulation und den tatsächlich während einer Lastreduktion gemessenen Daten ist.

Für die Simulation nicht gemessener Lastwechsel sind die drei Kennwerte in Abhängigkeit der Drehzahl- und Leistungsvorgaben und deren Änderungen zu ermitteln (Zusammenhänge (4.18) bis (4.20)). Auf der Grundlage der aus den Messungen vorhandenen jeweils drei Parametern pro Lastwechsel wurde entschieden, mit diesen stationäre MPL-Netze gemäß 4.2 zu trainieren, zu validieren (Kennwerte aus Generator- und 100%-Propellerbetrieb) und im Anschluss zu testen (Kennwerte vom 85%-Propellerbetrieb). Als Ergebnis stehen drei stationäre MLP-Netze mit jeweils 4-dimensionalen Eingangsräumen zur Verfügung:

⁴ Ein negativer Partikelmassenstrom existiert (leider!) nicht.

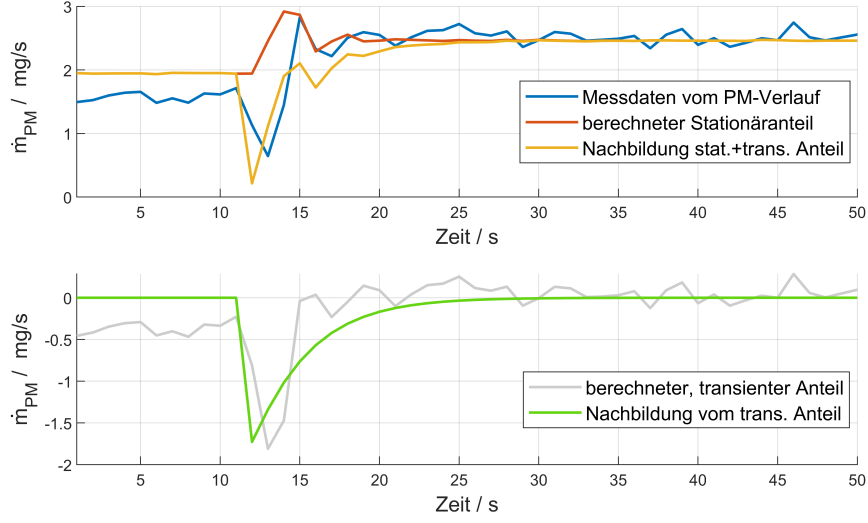


Abbildung 4.11: oben: Messung von einer Lastreduktion von 80 % auf 60 % auf der Propellerkurve (blau), Simulation mit stationärem MLP-Netz (rot), Simulation mit stat. und trans. Anteilen (gelb); unten: Differenz zwischen Messung und stationärer Simulation entspricht dem transienten Anteil (grau), Nachbildung mit doppelter Exponentialfunktion nach Vibe (grün)

$$m = f(n_{\text{ord},1}, n_{\text{ord},2}, P_{\text{ord},1}, P_{\text{ord},2}) \quad (4.18)$$

$$t_z = f(n_{\text{ord},1}, n_{\text{ord},2}, P_{\text{ord},1}, P_{\text{ord},2}) \quad (4.19)$$

$$m_{\text{PM,trans,tot}} = f(n_{\text{ord},1}, n_{\text{ord},2}, P_{\text{ord},1}, P_{\text{ord},2}) \quad (4.20)$$

Eine Nachbildung des transienten Anteils der Partikelemission über der Zeit mithilfe der doppelten Exponentialfunktion (4.21) ist nun möglich.

$$\frac{dm_{\text{PM,trans}}}{dt} = \frac{m_{\text{PM,trans,tot}}}{t_z} C(m+1) \left(\frac{t}{t_z}\right)^m e^{-C\left(\frac{t}{t_z}\right)^{m+1}} \quad (4.21)$$

mit

$\frac{dm_{\text{PM,trans}}}{dt}$	im Zeitpunkt t durch Instationarität freigesetzte Partikelemissionen
t	aktuelle Zeit ab Beginn des Lastwechsel
$m_{\text{PM,trans,tot}}$	Wert aus stat. MLP-Netz, $m_{\text{PM,trans,tot}} = f(n_{\text{ord},1}, n_{\text{ord},2}, P_{\text{ord},1}, P_{\text{ord},2})$
t_z	Wert aus stat. MLP-Netz, $t_z = f(n_{\text{ord},1}, n_{\text{ord},2}, P_{\text{ord},1}, P_{\text{ord},2})$
m	Wert aus stat. MLP-Netz, $m = f(n_{\text{ord},1}, n_{\text{ord},2}, P_{\text{ord},1}, P_{\text{ord},2})$
C	$= 6,908$, da x_z mit 99,9 % definiert wurde

Ist der Betriebsmodus, in dem ein Motor die Lastwechsel vollzieht, eindeutig (z.B. nur auf der Generatorkurve), dann wäre ein 2-dimensionaler Eingangsraum mit $P_{ord,1}$ und $P_{ord,2}$ eindeutig und daher ausreichend. Erst der Anspruch, mehrere Betriebskurven zu nutzen⁵, führt zu der Notwendigkeit eines 4-dimensionalen Eingangsraums.

Ein abschließender Vergleich zwischen Messung und Simulation der transienten Partikel-massenströme gemäß eines Bewertungskriteriums für den transienten Betrieb bietet sich an: Zwei mehrfach gemessene Lastwechsel aus den Trainings- und Validierungsdaten, sowie einer aus den Testdaten werden für diesen Vergleich herangezogen (vgl. Abb. 3.5 auf Seite 60). Tabelle 4.1 zeigt die Ergebnisse: Von den 4 bzw. 5 wiederholten Lastsprüngen wurden von deren transienten Anteil bzgl. Gesamtpartikelemission und Spitzenwerten Minimum, Maximum und Mittelwert ermittelt. Das Simulationsergebnis für denselben Zeitraum wird diesen Werten gegenübergestellt. Bei der Nachbildung der Lastwechsel auf Generatorkurve und 100%-Propellerkurven bewegen sich die Ergebnisse innerhalb der Grenzen der Messungen. Lediglich beim Lastsprung aus dem Testdatensatz wird eine, nach Einschätzung der Verfasserin, relativ geringe Abweichung bei den Gesamtemissionen verzeichnet. Eine Bewertung des Gesamtmodells erfolgt im nächsten Abschnitt.

Tabelle 4.1: Vergleich des gemessenen transienten Anteils mit dessen Simulation

Datengrundlage: Betriebsmodus/Kriterium:	m_{PM,trans} (total) gemessen / mg	m_{PM,trans} (total) simuliert / mg	ṁ_{PM,trans} (max.) gemessen / mg/s	ṁ_{PM,trans} (max.) simuliert / mg/s
Generatorkurve (40-60 %) Minimalwert Maximalwert Mittelwert	12,4 18,9 16,4	14,6	2,4 3,4 3,1	2,4
100%-Propellerkurve (40-60 %) Minimalwert Maximalwert Mittelwert	105,1 131,3 117,6	110,0	39,6 56,8 47,1	45,0
85%-Propellerkurve (30-40 %) Minimalwert Maximalwert Mittelwert	260,0 304,3 279,4	257,6	84,7 108,4 95,2	91,8

⁵ In der Schifffahrt wird dieser Betrieb als Kombinatorbetrieb bezeichnet.

4.4 Erzeugung synthetischer Daten mit Modell M0

Die Erzeugung synthetischer Daten benötigt als äußere Anregung Leistungs- und Drehzahlvorgaben (P_{ord} bzw. n_{ord}), die zeitlichen Veränderungen ausgesetzt werden. Jedwede Änderung bewirkt direkt oder indirekt eine Reaktion des PID-Regelalgorithmus' und somit eine Anpassung des Brennstoffmassenstroms (\dot{m}_B), um eine Angleichung der aktuellen Drehzahl (n_{akt}) an die geordnete Drehzahl (n_{ord}) zu erreichen. Abb. 4.12 veranschaulicht diesen Vorgang.

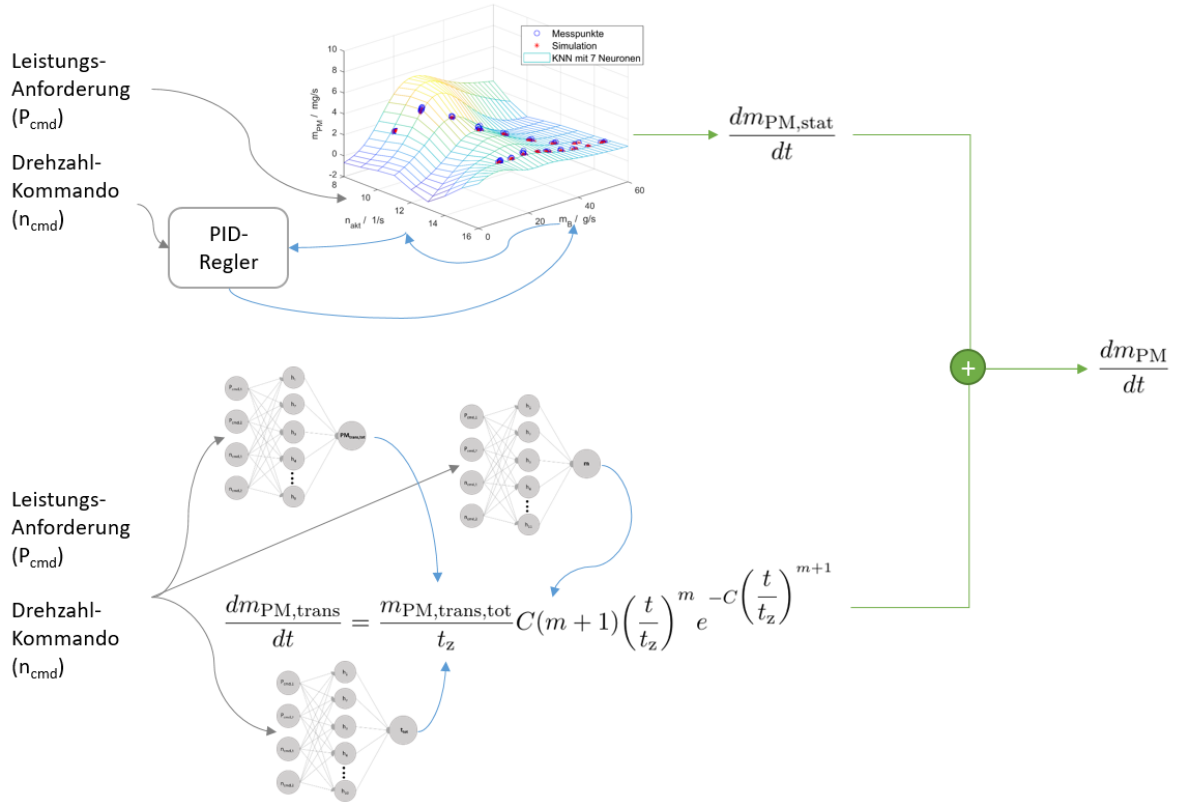


Abbildung 4.12: Vorgehen zur synthetischen Datenerzeugung: Der Stationäranteil wird über ein stationäres MLP-Netz erzeugt, der transiente Anteil über eine doppelte Exponentialfunktion. Ihre drei Parameter sind ebenfalls in stationären MLP-Netzen abgespeichert. Die Eingangsdaten für das Gesamtmodell sind die Verläufe von Drehzahl- und Leistungsvorgabe.

Die berechneten Verbrauchs- und Drehzahlwerte dienen als Eingangsgrößen für das stationäre MLP-Netz zur Berechnung des dazugehörigen Stationäranteils des Partikelmassenstroms. Des Weiteren dienen die Leistungs- und Drehzahlvorgaben der Ermittlung der drei Kennwerte für die doppelte Exponentialfunktion, sofern sich eine Änderung bei einem der Werte ergibt. Bis zum Zeitpunkt t_z wird ein transienter Anteil berechnet und zum Stationäranteils des Partikelmassenstroms hinzuaddiert. Tritt innerhalb dieses Zeitraums noch eine weitere Änderung der geordneten Werte auf, beginnt parallel eine zusätzliche Berechnung des transienten Anteils, welche additiv der Ersten hinzugefügt wird.

Sämtliche diesem Modell zu Grunde liegenden Messdaten weisen ein Rauschen auf. Die ermittelten Standardabweichungen während des Stationärbetriebs lauten:

$$s_{\dot{m}_{PM}} = 0,1157 \text{ mg/s}$$

$$s_{n_{akt}} = 0,007 \text{ 1/s}$$

$$s_{\dot{m}_B} = 0,1507 \text{ g/s}$$

Entsprechendes Rauschen wurde den synthetisch generierten Daten künstlich aufgeprägt. Das Ergebnis des Gesamtmodells wurde gegen die Messdaten geprüft (Tabelle 4.2). Trainings- und Validierungsdaten können in diesem Fall nicht mehr auseinander gehalten werden, da diese zur Bestimmung der (Hyper-)Parameter der insgesamt vier MLP-Netze in unterschiedlichen Kombinationen Verwendung gefunden haben. Unabhängig davon sind die Testdaten von der 85%-Propellerkurve. Die Vergleichskriterien folgen vom Prinzip her Gleichung (3.6) und bedeuten jeweils den Mittelwert der prozentualen, betragsmäßigen Abweichungen zwischen...

ΔPM_{tot} : ...dem Integral des gemessenen und simulierten \dot{m}_{PM} -Verlaufs während der Lastsprünge.

Δ Spitzenwerte: ...gemessenen und simulierten \dot{m}_{PM} -Spitzenwerten.

Δ Stationärbetrieb: ...gemessenem und simuliertem stationären \dot{m}_{PM} vor Beginn eines jeden Lastwechsels.

Tabelle 4.2: Vergleich von Messung mit Simulation des Gesamtmodells

Vergleichskriterium: Datengrundlage:	ΔPM_{tot} / %	Δ Spitzenwerte / %	Δ Stationärbetrieb / %
Trainings- und Validierungsdaten von Generatorkurve und 100%-Propellerkurve (arithm. Mittelwert)	11,9 mit $\sigma = 10,9$ min = 0,0 max = 55,6	28,7 mit $\sigma = 36,4$ min = 0,3 max = 201,2	3,4 mit $\sigma = 6,5$ min = 0,2 max = 29,1
Testdaten von 85%-Propellerkurve (arithm. Mittelwert)	19,6 mit $\sigma = 21,1$ min = 0,2 max = 97,0	44,0 mit $\sigma = 65,4$ min = 0,0 max = 253,3	6,1 mit $\sigma = 16,2$ min = 0,2 max = 94,4

Ein weiteres Bewertungskriterium ist das Ergebnis aus sich überlagernden Lastwechseln. Abb. 4.13 stellt dar, wie die gemessenen Lastwechsel aus Abb. 3.6 auf Seite 61 sich in der Simulation darstellen, wenn a) nur ein einzelner Lastsprung von 30 % auf 60 % ausgeführt wird,

bzw. b) die Lastwechselfolge von 30 % auf 60 %, dann 70 % ohne Überlagerung der transienten Anteile berechnet würde und c) dieselbe Lastwechselfolge mit Überlagerung (Addition) der transienten Anteile durchgeführt wird. Variante c) ist jene, die im Modell Verwendung findet.

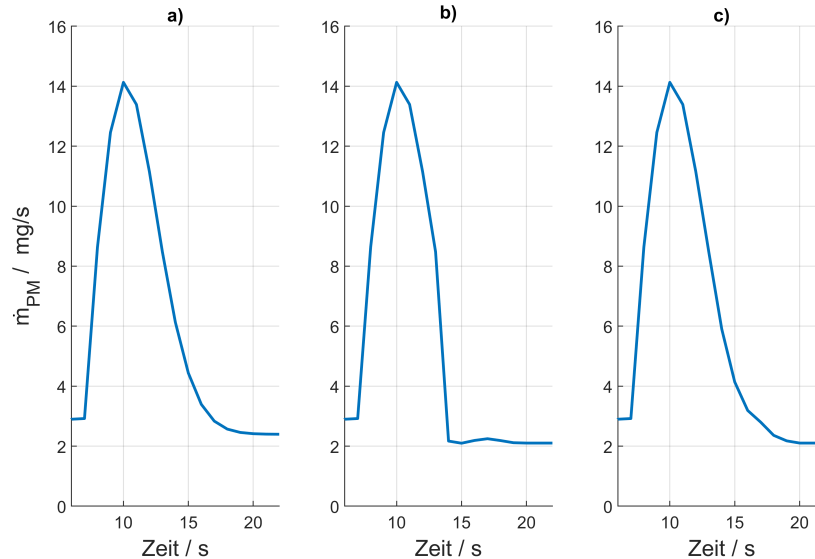


Abbildung 4.13: Simulierte Lastwechsel auf der Generatorcurve: a) einzelner Lastsprung von 30 % auf 60 %, b) Lastwechselfolge von 30 % auf 60 %, dann 70 % ohne Überlagerung der transienten Anteile, c) Lastwechselfolge von 30 % auf 60 %, dann 70 % mit Überlagerung (Addition) der transienten Anteile.

Die Simulationszeit, welche Tabelle 4.3 zu entnehmen ist, hängt stark von der zur Verfügung stehenden Rechenleistung, der Programmsoftware (hier: *MATLAB*[®]), sowie von der Effizienz der Programmierung ab. Eine Partikelemissionsvorhersage von 24 Minuten (vgl. 1.1) wird im vorliegenden Fall innerhalb von rund 66 ms gerechnet. Wie sehr sich Messdaten und Gesamtmodellrechnung auch qualitativ ähnlich sind, zeigen Abbildungen C.3 bis C.5. Über das gesamte Testszenario mit 92 Lastwechseln auf der 85%-Propellerkurve, werden rund 21 % mehr Partikelemissionen simuliert, als die Messdaten erwarten lassen.

Abschließend sollen mit diesem Modell vier Datensätze von unterschiedlicher Länge erzeugt werden, deren Laständerungen in einem Abstand von 25 s vorgenommen werden und die als Grundlage für die Untersuchungen in Kapitel 5 dienen sollen. Die Erzeugung dieser Datensätze ist systematisch nach folgenden Bedingungen erfolgt:

- Alle Lastpunkte zwischen 20 % und 100 %, bzw. 20 % und 85 % beim Testdatensatz, finden in definierten Intervallen Berücksichtigung.
- Alle Lastwechsel (Erhöhung und Reduzierung) werden in der Größenordnung von einer vordefinierten minimalen bis hin zu einer maximalen Laständerung durchgeführt.
- Jeder Lastwechsel kommt nur einmal vor.

Die Beschreibung der Datensätze und deren Merkmale sind in Tabelle 4.3 zusammengefasst. Abbildungen dazu befinden sich in Anhang C.3. Als Testdatensatz dienen 181 Lastwechsel auf der 85%-Propellerkurve. Die Größe der Laständerungen beträgt minimal 5 %, maximal 65 %.

Tabelle 4.3: Mit Modell M0 synthetisch generierte Datensätze für Training und Validierung der zu untersuchenden Methoden in Kapitel 5 und ihre Merkmale

Datensätze/ Anz.Lastwechsel: Merkmale:	1. Datensatz: 1 LW	2. Datensatz: 144 LW	3. Datensatz: 544 LW	4. Datensatz: 12960 LW
Dauer in Echtzeit	50 s	3.625 s \approx 1 h	13.625 s \approx 4 h	317.275 s \approx 90 h
Simulationszeit mit Gesamtmodell ⁶	18 ms (12 ms)	248 ms (58 ms)	864 ms (153 ms)	20.554 ms (3.442 ms)
unabhängige Samples ⁷	25	1.591	5.355	84.910
min. Schrittweite der Laständerungen	40 %	10 %	5 %	1 %
max. Schrittweite der Laständerungen	40 %	80 %	80 %	80 %

4.5 Zusammenfassung und Fazit

Es wurde festgestellt, dass sich die vorhandenen Messdaten aufgrund ihrer relativ geringen Anzahl nur bedingt zur Durchführung der Aufgabenstellung eignen. Deshalb wurde eine halbempirische Gleichung in Anlehnung an die doppelte Exponentialfunktion nach Vibe [106] aufgestellt, um die transienten Anteile der Partikelentstehung für beliebig viele Lastwechsel simulieren zu können. Die Kennwerte für die doppelte Exponentialfunktion wurden in stationären Kennfeldern des Typs MLP-Netz eingepflegt. Gleichermaßen werden die Werte für die Stationäranteile des Partikelmassenstroms über ein separates MLP-Netz verfügbar gemacht. Als Modell M0 wird hier dieser hybride Modellansatz bezeichnet, der anschließend an die Bewertung gemäß definierter Kriterien vier unterschiedlich lange Trainings- und Validierungsdatensätze sowie einen Testdatensatz generiert. Diese Datensätze sollen im folgenden Kapitel anstelle von Messdaten Verwendung finden.

⁶ Die Angaben in Klammern beziehen sich auf die Berechnungszeit für Partikelemissionen ohne Berechnung der Eingangswerte n_{akt} und m_B .

⁷ Hier bezogen auf jeden einzelnen Zeitpunkt. Werden auch Vergangenheitswerte r im jeweiligen Sample berücksichtigt, erhöht sich die Anzahl der unabhängigen Samples bei $r = 18$ auf nahezu 100 % (vgl. K. 5).

5 Modellbildung unter Nutzung von KNN

Drei Verfahren, die sich in unterschiedlicher Weise mit der Methode der Künstlichen Neuronalen Netze (KNN) beschäftigen, werden im Folgenden anhand der vier mithilfe von Modell M0 synthetisch generierten Trainings- und Validierungsdatensätze (vgl. Anhang C.3) auf geeignete Hyperparameterkombinationen untersucht. Ein weiterer, unabhängiger Datensatz (vgl. Anhang C.4) wird zum Testen herangezogen. Die theoretischen Grundlagen für die ersten beiden Modellansätze, M1 und M2, finden sich in Abschnitt 2.4. Die theoretische Herleitung für Modell M3, eine Kombination der bereits genannten Ansätze, wird in diesem Kapitel kurz erläutert. Die praktischen Umsetzungen zielen jeweils auf folgende Punkte ab:

- Ermittlung plausibler Belegungen für die Hyperparameter,
- Darstellung und Bewertung der Ergebnisse,
- Beschreibung beobachteter Einflüsse der Hyperparameter auf die Ergebnisse.

Methodisch findet die in 3.3.3 vorgestellte dreifach wiederholte, mehrdimensionale Raster-suche (engl. „Grid Search“) z.T. mit k-facher Kreuzvalidierung Anwendung. Sie wird auf jedes Verfahren und auf alle vier Datensätze angewendet. Quantitative Bewertungskriterien sind:

ΔPM_{tot} :	Prozentuale Abweichung zwischen dem Integral des gemessenen und simulierten \dot{m}_{PM} -Verlaufs während der Lastsprünge.
Δ Spitzenwerte:	Mittelwert aller prozentualen, betragsmäßigen Abweichungen zwischen gemessenen und simulierten \dot{m}_{PM} -Spitzenwerten.
Δ Stationärbetrieb:	Mittelwert aller prozentualen, betragsmäßigen Abweichungen zwischen gemessenem und simuliertem stationärem \dot{m}_{PM} vor Beginn eines jeden Lastwechsels.

Negative Simulationenwerte werden vor Verwendung dieser Kriterien auf Null gesetzt und treten in den Abbildungen auch als Datenpunkte mit dem Wert Null auf.

Die Priorität bei der Auswahl einer geeigneten Hyperparameterkombination liegt auf dem Vergleich des Kriteriums ΔPM_{tot} mit Fokus auf die Validierungsergebnisse. Mehr Informationen werden durch den Vergleich von Δ Stationärbetrieb und Δ Spitzenwerte erlangt. In einem zweiten Schritt werden alle erfolgversprechenden (parametrierten) Modellarchitekturen zur Simulation des Testdatensatzes verwendet und die Bewertungskriterien ermittelt. Validierung und Testung sollten möglichst ähnliche Abweichungen aufweisen. Wenn nach diesen Vergleichen mehrere unterschiedliche Modellarchitekturen ähnlich gute Ergebnisse liefern, findet eine visuelle Überprüfung und eine qualitativ begründete Entscheidung statt.

Bei nichtlinearen Optimierungsproblemen wird meist nur ein lokales Optimum erreicht. Somit stellt auch jedes der hier vorgestellten Ergebnisse nicht notwendigerweise das optimale Ergebnis dar. Die gewählte Belegung der Hyperparameter besagt, dass die Wahrscheinlichkeit relativ hoch ist, mit diesen Hyperparametern entsprechende Ergebnisse zu erzielen, wie sie in den Auswertungstabellen dargelegt werden. Die zufällig gewählten Startwerte sind jedoch ausschlaggebend für deren tatsächliches Eintreten.

Wortlaut und Formatierung sind bei den Auswertungen jeweils bewusst gleichlautend bzw. ähnlich gestaltet, einerseits um das vergleichende Lesen zu vereinfachen, andererseits um Unterschiede besser hervorzuheben.

5.1 Modell M1: KNN mit externer Dynamik

Die Besonderheit bei den MLP-Netzen mit externer Dynamik ist die Bestimmung der Anzahl benötigter Vergangenheitswerte r . Alle vier Datensätze - jeweils ohne aufgeprägtes Rauschen - wurden dahingehend untersucht, wie groß r sein müsste, damit eine Eindeutigkeit bei der Abbildung des Eingangsraums auf den Netzausgang erreicht würde. Bei sämtlichen Datensätzen wurde ein Zeitfenster von $r \hat{=} 18$ s ermittelt, was einen 36-dimensionalen Eingangsraum bedingen würde. Ein großer Eingangsraum verlangt nach einer großen Anzahl an Trainingsdaten (vgl. „Fluch der Dimensionalität“) [108]. Diese Anforderung bedingt hypothetisch auch eine komplexere Modellarchitektur mit einer höheren Anzahl von Parametern. Deshalb wurde der ermittelte Wert von $r = 18$ s als Obergrenze für die mehrdimensionale Rastersuche zugelassen, die Untergrenze mit $r = 6$ s festgelegt.

Die wichtigsten Hyperparameter, deren Grenzen und Intervalle für die Rastersuche sind:

Anzahl versteckter Neuronen n :	[10, 15, 20, 25, 30]
Aktivierungsfunktion:	Tangens hyperbolicus (festgelegt)
Anzahl Zwischenschichten N :	auf 1 festgelegt
Lernrate α :	[0, 02, 0, 002]
Größe eines Batches:	[Single Sample, 8er-Mini-Batch]
Anzahl Trainingsepochen:	[50, 100, 1000, 3000]
Anzahl Vergangenheitswerte r :	[6, 10, 14, 18]
Abstand zwischen Kommandowechseln:	auf 25 s festgelegt

Je nach Kombination müssen zwischen 141 und 1021 Synapsen- bzw. Schwellenwertgewichte bestimmt werden. Tabelle 5.1 zeigt für jeden Datensatz, welche Hyperparameterkombination nach 3-facher Wiederholung der mehrdimensionalen Rastersuche die Bewertungskriterien am zufriedenstellendsten erfüllt.¹

Die Bezeichner (M1_xxLW) beziehen sich jeweils auf ein parametrisiertes Modell M1 aus der Parameterschätzung unter Anwendung der in Tabelle 5.1 genannten Hyperparameterkombinationen. Abb. 5.1 zeigt beispielhaft, wie mit Modell M1_1LW der 1. Datensatz nachgebildet wird. Weitere entsprechende Bilder zu den Ergebnissen aller vier Datensätze befinden sich in Anhang D (Abb. D.1, D.10, D.19, D.28). Sie dienen dem Vergleich mit den beiden noch

¹ Für den 4. Datensatz erfolgte aus Zeitgründen lediglich eine 2-fache Wiederholung.

folgenden Verfahren.

Tabelle 5.1: Aufstellung der Hyperparameterkombinationen für Modell M1, die mit hoher Wahrscheinlichkeit den Bewertungskriterien am ehesten nachkommen.

Datensätze/LW: Hyperparameter:	1. Datensatz: 1 LW	2. Datensatz: 144 LW	3. Datensatz: 544 LW	4. Datensatz: 12960 LW
N° Neuronen (h)	15	25	30	25
Lernrate	0,02	0,002	0,002	0,002
Batchgröße	1	1	1	1
N° Epochen	3000	3000	1000	1000
N° Vergangenheits- werte	10	10	10	14
N° Parameter	331	551	661	751
Trainingszeit	0h 0m 9s	0h 12m 30s	0h 15m 19s	5h 17m 18s
Simulationszeit (Testdatensatz)	87 ms	99 ms	117 ms	108 ms
Simulationszeit (24-min. Vorhersage)	28 ms	31 ms	37 ms	34 ms
Bezeichner	M1_1LW	M1_144LW	M1_544LW	M1_12960LW

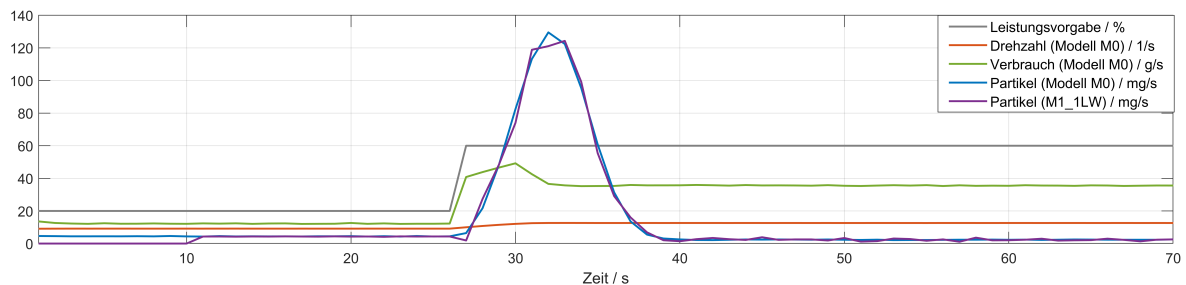


Abbildung 5.1: Simulationsergebnis von Modell M1_1LW mit Trainingsdatensatz von Modell M0: $m_{PM,tot}$ von Modell M0: 927 mg; $m_{PM,tot}$ von Modell M1_1LW: 918 mg

Tabelle 5.2 nennt die quantitativen Ergebnisse zu den vier ausgewählten Modellen. Exemplarisch und zur besseren Interpretierbarkeit werden in Anhang D, Abb. D.7, D.16, D.25 und D.34, Histogramme zu den Ergebnissen bzgl. der Spitzenwerte dargestellt.

Tabelle 5.2: Darstellung ausgewählter Ergebnisse aus Training, Validierung und Testung unter Nutzung von Modell M1.

Bezeichner: Kriterium/Bezug:	M1_1LW	M1_144LW	M1_544LW	M1_12960LW
$\Delta m_{PM,tot}$ Trainingsdaten	-1,1 %	5,0 %	-6,1 %	-2,3 %
Δ Spitzenwerte Trainingsdaten	4,0 %	58,8 %	81,4 %	56,7 %
Δ Stationärbetrieb Trainingsdaten	0,7 %	32,5 %	14,1 %	29,5 %
ΔPM_{tot} Validierungsdaten	4,9 %	7,7 %	-17,3 %	-2,3 %
Δ Spitzenwerte Validierungsdaten	N/A	67,6 %	70,0 %	56,8 %
Δ Stationärbetrieb Validierungsdaten	1,7 %	43,8 %	13,1 %	34,5 %
$\Delta m_{PM,tot}$ Testdaten	266,2 %	7,5 %	-17,5 %	-3,0 %
Δ Spitzenwerte Testdaten	151,1 %	41,4 %	59,1 %	57,6 %
Δ Stationärbetrieb Testdaten	614,9 %	52,8 %	26,0 %	35,6 %

Abb. 5.2 stellt die Ergebnisse dar, welche anhand der vier ausgewählten Modellarchitekturen und ihrer Parameter zur Nachbildung des als Beispiel dienenden überlagerten Lastwechsels (30 % -> 60 % / 70 %) erreicht werden. Im Vergleich mit der Vorlage von Modell M0 aus Abb. 4.13 (rechts) simuliert M1_544LW diesen überlagerten Lastwechsel am naheliegendsten hinsichtlich der definierten Bewertungskriterien.

Die Beobachtungen, Erkenntnisse und Auffälligkeiten aus den zahlreichen Iterationen bei

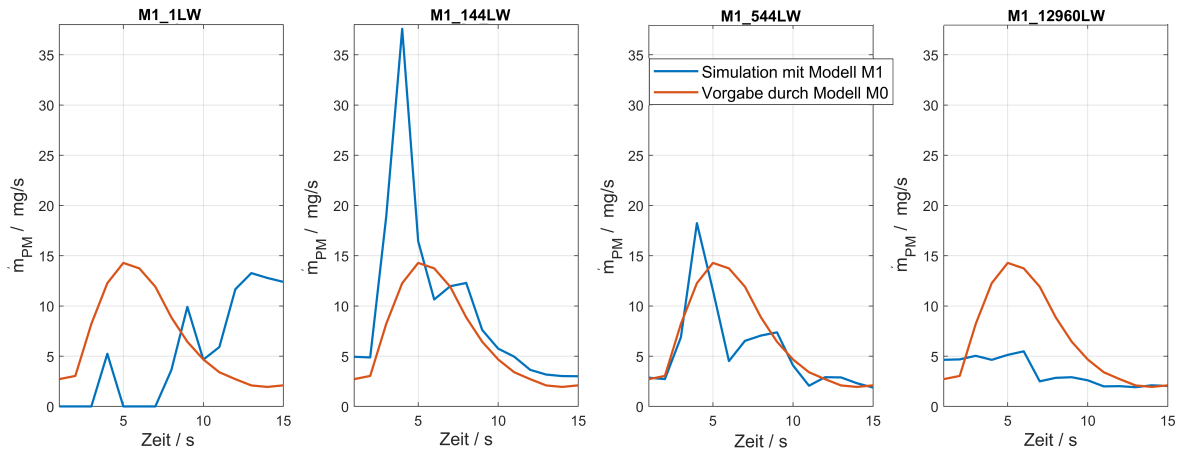


Abbildung 5.2: Überlagerte Lastwechsel von 30 % nach 60 %/ 70 % nachgebildet mit KNN mit externer Dynamik gemäß der in Tabelle 5.2 verwendeten Modelle; v.l.n.r.: M1_1LW, M1_144LW, M1_544LW, M1_12960LW

der mehrdimensionalen Rastersuche, welche in Form einer Tabelle nur unzureichend wiedergegeben werden können, werden nachstehend diskutiert.

Anzahl und Diversität der gemessenen, bzw. synthetisch generierten Lastwechsel

Anhand von mehreren hundert Lastwechseln trainiert und parametrisiert, können die Modelle M1_144LW und M1_544LW durchaus schon ein relativ gutes Interpolationsverhalten erzielen, was anhand des Testdatensatzes ersichtlich ist. Die Erwartungen an die Ergebnisse aus dem 4. Datensatz mit 12960 Lastwechseln waren sehr hoch angesetzt. Dass diese Erwartungen nicht entsprechend erfüllt wurden, mag einerseits daran liegen, dass relativ gesehen nur wenige Lastwechsel zu einer signifikanten Erhöhung des Partikelausstoßes geführt haben, die Mehrheit jedoch einen Bereich mit weniger Emissionen abdeckte. Bei der systematischen Verteilung der Lastwechsel, wie sie in Abschnitt 4.4 erläutert wird, wurde relativ gesehen viel Wert auf die kleineren Lastwechsel (von 1 bis 4 %) gelegt, statt jenen mit signifikantem Partikelaustritt mehr Gewicht beizumessen. Nichtsdestotrotz hat die Auswertung der Ergebnisse aus den zahlreichen, iterativen Berechnungen zum 4. Datensatz gezeigt, dass über alle Ergebnisse gesehen, die Abweichungen bei den Bewertungskriterien mehrheitlich bei deutlich unter 100 % lagen, was bei den kleineren Datensätzen nicht in dieser Weise beobachtet werden konnte. Dies lässt die Schlussfolgerung zu, dass eine sehr große Anzahl von Messdaten die Wahrscheinlichkeit eines brauchbaren Ergebnisses erhöht.

Abstand zwischen Kommandowechseln

Die obige Erkenntnis geht mit den Beobachtungen aus einer Voruntersuchung mit einher: Je länger der Stationärbetrieb zwischen zwei Lastwechseln andauert, desto weniger werden die Instationaritäten bei der Parameteridentifizierung berücksichtigt. Es bietet sich daher an, einen Kompromiss zwischen dem theoretisch korrekten Abwarten des umfassenden Stationärbetriebs (d.h. konstante ATL-Drehzahl), und einem näherungsweise stationären Betrieb zu finden. Der Abstand muss demnach lediglich einige Zeitschritte größer als die theoretisch ermit-

telte dynamische Ordnung r gewählt werden. Wird der Abstand zu klein gewählt, dann wird der Stationärbetrieb nicht erreicht und kann somit nicht gelernt werden. Diese Beobachtung führte zu der Entscheidung, den Hyperparameter „Abstand zwischen Kommandowechseln“ auf 25 s festzulegen.

Anzahl versteckter Neuronen

Mehrheitlich hat sich die Annahme bestätigt, dass ein höherdimensionaler Eingangsraum eine höhere Anzahl versteckter Neuronen bedingt. Nur im Falle des 3. Datensatzes führte die maximal angesetzte Anzahl versteckter Neuronen zu den besten Ergebnissen. Die Erfahrung zeigt auch, dass sich die Modellgüte durch zu hohe Modellkomplexität tendenziell nicht erhöht.

Lernrate

Sehr klein gewählte Lernraten können zu guten Ergebnissen führen. Die Wahrscheinlichkeit ist jedoch relativ groß, dass ein ungeeignetes lokales Optimum nahe der Startparameter gefunden wird. Zu groß gewählte Lernraten verändern die Parameter oft über ihre plausiblen Grenzen hinaus, so dass die Argumente für die Aktivierungsfunktionen in Bereiche eingehen, wo diese sich asymptotisch verhält. Die Ausgangswerte variieren infolgedessen immer weniger.

Bei keinem anderen Hyperparameter fällt die Abhängigkeit von gut gewählten Startwerten stärker ins Gewicht als bei der Lernrate. Dies ist ein Grund für die Entwicklung diverser Strategien [50], die Startwerte im Pre-Processing sinnvoll einzugrenzen oder die Lernrate adaptiv zu gestalten.

Anzahl Epochen

Die Emissionsspitzen und deren Beträge sind ein wichtiges Bewertungskriterium. Dem widerspricht der ausgleichende, verallgemeinernde Charakter, der einem MLP-Netz zugeschrieben wird. Spitzenwerte, wenn auch als wichtig erachtet, sind relativ selten bezogen auf die Gesamtheit aller Messpunkte. Deshalb kann beim Training mit Erhöhung der Epochen ein (ungewollter) Glättungseffekt auftreten. Unterstrichen wird diese Tendenz mit den Beobachtungen beim 3. und 4. Datensatz: 3000 Trainingsepochen führen dazu, dass die Abweichung bei den Emissionsspitzen über 100 % betragen. Eine zu geringe Anzahl Epochen hat den Nachteil, dass die Anpassung des Modells womöglich noch nicht weit genug fortgeschritten ist. Abhilfe kann ein im Voraus festgelegtes Abbruchkriterium schaffen.

Größe eines Batches

Im Gegensatz zum Single Sample, agiert das Batch wie ein Filter und führt zu einer Glättung der Emissionsspitzen.

Anzahl Vergangenheitswerte

Zu wenige Vergangenheitswerte bedeutet, dass keine Eindeutigkeit für den Ausgabewert besteht, was teilweise zu sehr großen Abweichungen vom tatsächlichen Ausgabewert führen kann. Werden die Eingangsvektoren zu groß gewählt ($\geq r$), dann kommt jedes der Datentupel (i.S.v. „Ein- und Ausgabepaaren“) im Trainingsdatensatz nur einmal vor.

Anzahl versteckter Schichten

Die Anzahl versteckter Schichten wurde mit einer einzigen Zwischenschicht N festgelegt. Grund dafür ist, dass die verwendeten Algorithmen selbstständig programmiert wurden und keinerlei fertige KNN-Bibliotheken Verwendung fanden. Die Komplexität sollte niedrig gehalten werden und die entstandenen Programmcodes nachvollziehbar bleiben, um ggf. eine Übertragung in die erwähnte Assistenz-Software leichter zu ermöglichen.

Aktivierungsfunktion

Als Aktivierungsfunktion wurde der Tangens hyperbolicus, eine standardmäßig verwendete Aktivierungsfunktion, programmtechnisch umgesetzt.

Bei Anwendung dieses Modellansatzes wird der größte Aufwand bei der Datenaufbereitung gesehen. Auch die Rastersuche nimmt sehr viel Zeit in Anspruch. Bei der Programmierung bedarf es lediglich einer Erweiterung des stationären MLP-Netzes. Die in Tabelle 5.1 genannten Trainings- bzw. Simulationszeiten sind relativ zu betrachten, da sie u. a. auch von vorhandener Rechenleistung, Software und Programmiererfahrung abhängig sind.

Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass sich vorwärtsgerichtete MLP-Netze für statische Kennfelder sehr gut eignen können (vgl. 4.2), insbesondere wenn ein mehrdimensionaler Eingangsraum und ausreichend qualitativ hochwertige Trainingsdaten zur Verfügung stehen. Handelt es sich bei dynamischen Prozessen um solche, deren transienter Betrieb sich wie im vorliegenden Fall erheblich von den Charakteristika des Stationärbetriebs abhebt, muss ein Pareto-Optimum zwischen den Zielkriterien gefunden werden. Das Erreichen der Spitzenwerte und die Neubildung der Partikelemissionen im Stationärbetrieb stehen im Widerspruch. Dass bspw. mehrere Zwischenschichten diesem vermeintlichen Widerspruch begegnen können, wird nicht ausgeschlossen. MLP-Netze werden als Universalapproximatoren bezeichnet, was soviel bedeutet, dass jeder beliebige funktionale Zusammenhang mit ihnen dargestellt werden kann. Bedingung dafür ist nicht nur eine adäquate Netzarchitektur, sondern auch ausgeglichen verteilte Trainingsdaten.

5.2 Modell M2: KNN mit interner Dynamik

Die Hyperparameter eines KNN mit interner Dynamik unterscheiden sich nur geringfügig von jenen eines KNN mit externer Dynamik. Die programmtechnische Umsetzung und die Initiierung aller Startwerte gestalten sich jedoch um einiges aufwendiger und fehleranfälliger als beim vorangehenden Verfahren. Bei der Initialisierung müssen zusätzlich die Filterein- und -ausgangswerte zu den Zeitpunkten $k - 1$ und $k - 2$ bestimmt werden. Es hat sich als vorteilhaft erwiesen, die Startwerte der Filterkoeffizienten und der Gewichte im Voraus mit $b_0 = 1, b_1 = -0,1, b_2 = -0,1, a_1 = 0, a_2 = 0$ bzw. $w_{ij} = \pm 0,001, c_{ij} = \pm 0,001, w_{jk} = \pm 0,001, c_{jk} = \pm 0,001$ festzulegen.

Die wichtigsten Hyperparameter, deren Grenzen und Intervalle für die Rastersuche sind:

Anzahl versteckter Neuronen n :	[2, 3, 4, 5, 6, 7]
Aktivierungsfunktion:	Tangens hyperbolicus (festgelegt)
Anzahl Zwischenschichten N :	auf 1 festgelegt
Lernrate α :	[0,0002, 0,0005, 0,002]
Größe eines Batches:	[Single Sample, 8er-Mini-Batch ²]
Anzahl Trainingsepochen:	[3, 20, 50, 60, 65, 90, 200, 1.000, 10.000]
Abstand zwischen Kommandowechseln:	auf 25 s festgelegt

Je nach Kombination müssen zwischen 24 und 60 Filterkoeffizienten, Synapsen- und Schwellenwertgewichte bestimmt werden. Tabelle 5.3 zeigt für jeden Datensatz, welche Hyperparameterkombination nach 3-facher Wiederholung der mehrdimensionalen Rastersuche die Bewertungskriterien am zufriedenstellendsten erfüllt.³

Die Bezeichner (M2_xxLW) beziehen sich jeweils auf ein parametrisiertes Modell M2 aus der Parameterschätzung unter Anwendung der in Tabelle 5.3 genannten Hyperparameterkombinationen. Abb. 5.3 zeigt beispielhaft, wie mit Modell M2_1LW der 1. Datensatz nachgebildet wird. Weitere entsprechende Bilder zu den Ergebnissen aller vier Datensätze befinden sich in Anhang D (Abb. D.2, D.11, D.20, D.29). Sie dienen dem Vergleich mit den beiden anderen Verfahren.

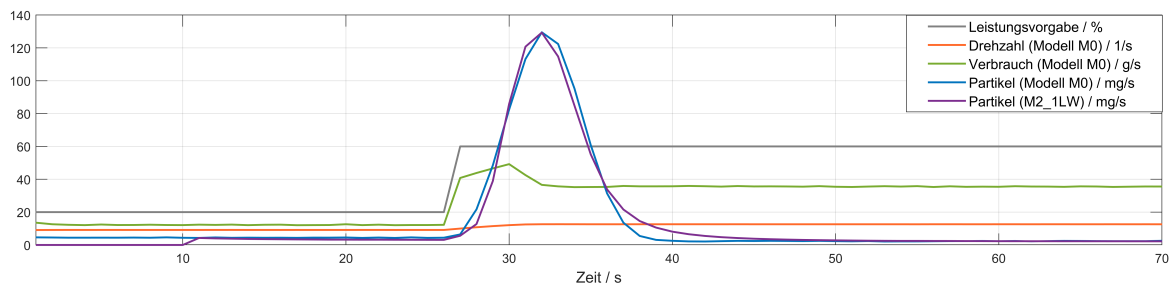


Abbildung 5.3: Simulationsergebnis von Modell M2_1LW mit Trainingsdatensatz von Modell M0: $m_{PM,tot}$ von Modell M0: 927 mg; $m_{PM,tot}$ M2_1LW: 934 mg

Tabelle 5.4 nennt die quantitativen Ergebnisse zu den vier ausgewählten Modellen. Exemplarisch und zur besseren Interpretierbarkeit werden in Anhang D, Abb. D.8, D.17, D.26 und D.35, Histogramme zu den Ergebnissen bzgl. der Spitzenwerte dargestellt.

Abb. 5.4 stellt die Ergebnisse dar, welche anhand der vier ausgewählten Modellarchitekturen und ihrer Parameter zur Nachbildung des als Beispiel dienenden überlagerten Lastwechsels (30 % -> 60 % / 70 %) erreicht werden. Im Vergleich mit der Vorlage aus den synthetisch generierten Daten aus Abb. 4.13 (rechts) simulieren M2_144LW und M2_544LW diesen überlagerten Lastwechsel qualitativ am naheliegendsten hinsichtlich der definierten Bewertungskriterien.

² Die Erfahrung hat gezeigt, dass es sich vorteilhaft auf das Ergebnis auswirkt, wenn bei der Wahl eines 8er-Mini-Batches dieses lediglich zwischendurch für bspw. 5 Trainingsepochen angewendet wird.

³ Für den 4. Datensatz erfolgte aus Zeitgründen lediglich eine 2-fache Wiederholung.

Tabelle 5.3: Aufstellung der Hyperparameterkombinationen für Modell M2, die mit hoher Wahrscheinlichkeit den Bewertungskriterien am ehesten nachkommen.

Datensätze/LW: Hyperparameter:	1. Datensatz: 1 LW	2. Datensatz: 144 LW	3. Datensatz: 544 LW	4. Datensatz: 12960 LW
N° Neuronen (h)	5	7	4	3
Lernrate	0,002/0,0002	0,002/0,0002	0,002	0,0005
Batchgröße	1 / 8 / 1	1 / 8 / 1	1	1 / 8 / 1
N° Epochen	10.000	60	200	3
N° Parameter	51	60	42	33
Trainingszeit	1h 6m 30s	0h 0m 38s	0h 3m 12s	18h 45m 5s
Simulationszeit (Testdatensatz)	79 ms	85 ms	74 ms	73 ms
Simulationszeit (24-min. Vorhersage)	25 ms	27 ms	23 ms	23 ms
Bezeichner	M2_1LW	M2_144LW	M2_544LW	M2_12960LW

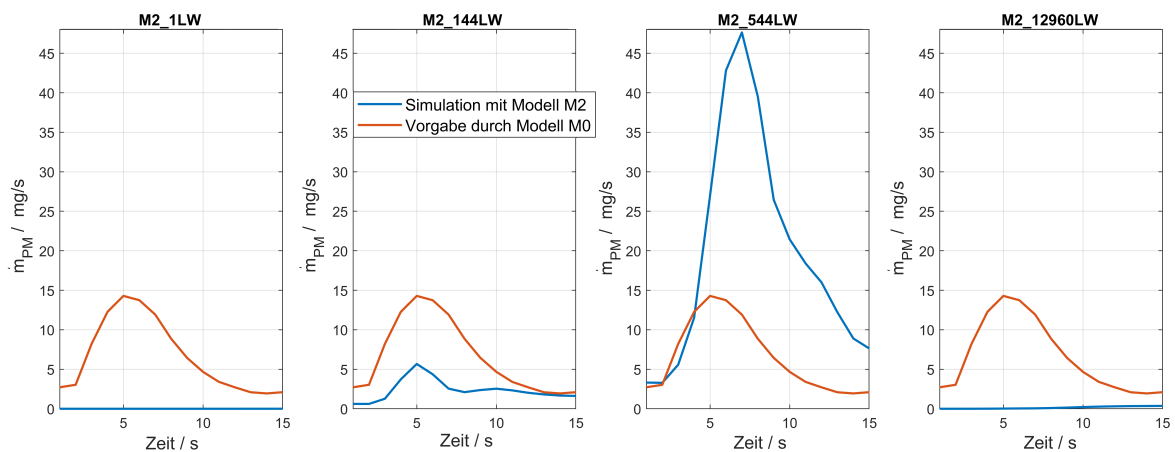


Abbildung 5.4: Überlagerte Lastwechsel von 30 % nach 60 %/ 70 % nachgebildet mit KNN mit interner Dynamik gemäß der in Tabelle 5.4 verwendeten Modelle; v.l.n.r.: M2_1LW, M2_144LW, M2_544LW, M2_12960LW

Tabelle 5.4: Darstellung ausgewählter Ergebnisse aus Training, Validierung und Testung unter Nutzung von Modell M2.

Bezeichner: Kriterium/Bezug:	M2_1LW	M2_144LW	M2_544LWin	M2_12960LW
ΔPM_{tot} Trainingsdaten	-1,7 %	-41,6 %	2,7 %	25,2 %
Δ Spitzenwerte Trainingsdaten	1,4 %	62,9 %	41,4 %	90,5 %
Δ Stationärbetrieb Trainingsdaten	30,5 %	50,0 %	48,2 %	125,1 %
$\Delta m_{PM,tot}$ Validierungsdaten	11,1 %	-55,4 %	-8,5 %	-44,0 %
Δ Spitzenwerte Validierungsdaten	N/A	51,4 %	35,0 %	90,3 %
Δ Stationärbetrieb Validierungsdaten	40,5 %	50,2 %	43,6 %	124,9 %
$\Delta m_{PM,tot}$ Testdaten	2.273,0 %	85,7 %	-55,4 %	509,5 %
Δ Spitzenwerte Testdaten	794,1 %	145,9 %	69,6 %	248,8 %
Δ Stationärbetrieb Testdaten	5.588,9 %	199,0 %	36,6 %	1.193,4 %

Die Beobachtungen, Erkenntnisse und Auffälligkeiten aus den zahlreichen Iterationen bei der mehrdimensionalen Rastersuche, welche in Form einer Tabelle nur unzureichend wiedergegeben werden können, werden nachstehend diskutiert.

Anzahl und Diversität der gemessenen, bzw. synthetisch generierten Lastwechsel

Anhand von mehreren hundert Lastwechseln trainiert und parametrisiert, kann das Modell M2_544LW durchaus schon ein relativ gutes Interpolationsverhalten erzielen, was anhand des Testdatensatzes ersichtlich ist. Die Erwartungen an die Ergebnisse aus dem 4. Datensatz mit 12960 Lastwechseln waren sehr hoch angesetzt. Mit den festgelegten Startwerten ist jedoch

nur eine begrenzte Anzahl Trainingsepochen möglich, um nicht undefinierte Werte (*NaN*) zu erhalten. Mit einer anderen Trainingsstrategie bzw. Startwertwahl würden ggf. bessere Ergebnisse erreicht werden können.

Abstand zwischen Kommandowechseln

Eine Verdoppelung des Abstands zwischen zwei Kommandos auf 50 s hat insbesondere beim 2. Datensatz in mehreren Versuchen mit entsprechender Hyperparameterkombination aus Tabelle 5.3 zu deutlich besseren Ergebnissen geführt als dies mit M2_144LW der Fall ist. Auch der überlagerte Lastwechsel konnte mit den neu trainierten Parametern viel plausibler nachgebildet werden, wie Abb. 5.5 entnommen werden kann. Von einer erneuten allumfassenden Untersuchung wurde aus Zeitgründen abgesehen.

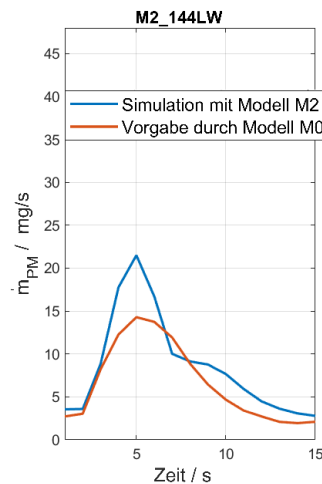


Abbildung 5.5: Berechnung des überlagerten Lastwechsels mit einem Modell entsprechend M2_144LW, trainiert jedoch mit einem Abstand von 50 s zwischen zwei Kommandowechseln.

Anzahl versteckter Neuronen

Nicht nur jedes versteckte Neuron enthält ein IIR-Filter, sondern auch das Ausgangsneuron. Diese Überlagerung trägt dazu bei, dass Dynamik sehr gut wiedergegeben werden kann. Eine zu große Anzahl versteckter Neuronen kann jedoch ein deutliches Überschwingen zur Folge haben, zu wenige Neuronen können die Partikelverläufe in ihrer Vielfalt nicht nachbilden.

Lernrate

Zu groß gewählte Lernraten können zum Divergieren der Berechnungen führen. Die relativ kleinen Lernraten haben i.A. zu den besseren Ergebnissen geführt. Eine Verkleinerung der Lernrate während des Trainings wies auf noch mehr Verbesserungspotenzial hin, weshalb diese Strategie auch umgesetzt wurde: Einige Trainingsepochen werden dabei anfänglich mit $\alpha = 0,002$ durchgeführt und später mit $\alpha = 0,0002$ fortgesetzt, was die Notation 0,002 / 0,0002 in Tabelle 5.3 begründet.

Anzahl Epochen

Eine hohe Anzahl Epochen erscheint nur dann sinnvoll, wenn die Länge des Datensatzes nicht sehr groß ist. Der zeitlich Gewinn während des Trainings ist der eine Aspekt einer geringen Anzahl Trainingsepochen, der andere Aspekt ist die Beobachtung, dass sich nach einer gewissen Anzahl Iterationen⁴ Ergebnisse in Form von *NaN* ergeben.

Größe eines Batches

Ähnlich wie bei der Anpassung der Lernrate wurde festgestellt, dass eine Veränderung der Batch-Größe das Ergebnis positiv beeinflussen kann. In der praktischen Umsetzung wurde nach einigen Trainingsepochen vom Single Sample-Modus in den 8er-Batch-Modus gewechselt. Nach weiteren 5 Epochen wurde wieder zum Single Sample-Modus zurückgekehrt, was die Notation 1 / 8 / 1 in Tabelle 5.3 begründet.

Anzahl versteckter Schichten

Die Anzahl versteckter Schichten wurde mit einer einzigen Zwischenschicht N festgelegt. Grund dafür ist, dass die verwendeten Algorithmen selbstständig programmiert wurden und keinerlei fertige KNN-Bibliotheken Verwendung fanden. Die Komplexität sollte niedrig gehalten werden und die entstandenen Programmcodes nachvollziehbar bleiben, um ggf. eine Übertragung in die erwähnte Assistenz-Software leichter zu ermöglichen.

Aktivierungsfunktion

Als Aktivierungsfunktion wurde der Tangens hyperbolicus, eine standardmäßig verwendete Aktivierungsfunktion, programmtechnisch umgesetzt.

Auslegung der Bewertungskriterien

Die Abwägung zwischen den Bewertungskriterien erfolgte bei der Auswahl der Hyperparameterkombinationen viel intensiver als bei den anderen beiden Verfahren. Insbesondere beim 2. Datensatz ergaben sich zwei eindeutige Trends: Mit 3 versteckten Neuronen können i.A. die Test- und Validierungsdaten vergleichbar gute Ergebnisse bewirken wie unter M2_1LW in Tabelle 5.4, während bei den Testdaten kaum Ähnlichkeit zwischen Simulation und Originaldaten erkennbar ist. Andererseits konnte beobachtet werden, dass zahlreiche Hyperparameterkombinationen mit jeweils 7 versteckten Neuronen ein ausgeglicheneres Ergebnis zwischen Training, Validierung und Testung lieferten. M2_144LW wurde auf dieser Grundlage ausgewählt.

Bei der Anwendung dieses Modellansatzes wird der größte Aufwand bei der Programmierung und insbesondere bei der Initialisierung der Startwerte gesehen. Die Startwerte sind wesentlich für ein bewertbares Ergebnis ($\neq NaN$). Die in Tabelle 5.3 genannten Trainings- bzw. Simulationszeiten sind relativ zu betrachten, da sie u. a. auch von vorhandener Rechenleistung, Software und Programmiererfahrung abhängig sind.

⁴ Iteration meint hier den Backpropagation-Vorgang, der für jedes Datenpaar stattfindet. Anzahl Datenpaare pro Datensatz multipliziert mit der Anzahl Epochen ergibt die Anzahl Iterationen im Trainingsprozess.

Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass das hier vorgestellte KNN mit interner Dynamik zwar noch Verbesserungspotential insbesondere bei der Abbildung des stationären Partikelmassenstroms besitzt, jedoch auch einen großen Vorteil aufweist: Die dynamischen Verläufe können sehr gut nachgebildet werden, ohne dass die oft zufällig scheinenden Abweichungen, wie sie beim KNN mit externer Dynamik beobachtet werden, auftreten können.

5.3 Modell M3: Hybrider Ansatz mit statischem MLP-Netz und ARMA-Modell

Beide oben vorgestellten und aus der Literatur bekannten Ansätze stehen vor der Herausforderung, sowohl die Emissionsspitzen als auch den Stationärbetrieb im Rahmen der Bewertungskriterien nachzubilden. Außerdem mag es verwundern, weshalb nicht gleich Modell M0 als Antwort auf die Problemstellung (vgl. 1.2) herangezogen wird, wo dieses auf einem validierten und getesteten Stationärmodell beruht und außerdem die Emissionsspitzen gemäß der Ergebnisse aus Tabellen 4.1 und 4.2 im Vergleich zu den oben angesprochenen Verfahren relativ gut nachzubilden vermag. In Kapitel 6 wird diese Option diskutiert, doch vorweg muss eingeräumt werden, dass dieses Modell womöglich einen erheblichen Nachteil aufweist: Wird ein Kommando gewechselt während der Partikelmassenstrom noch nicht sein stationäres Gleichgewicht erreicht hat, wird eine neue doppelte Exponentialfunktion initiiert, deren Ausgabe zu dem bereits vorhandenen transienten Anteil hinzuaddiert wird, was eher einer Behelfslösung nahe kommt, als einem physikalisch begründeten Vorgehen. Aufgrund dessen wurde entschieden, einen weiteren hybriden Ansatz umzusetzen, welcher ebenfalls eine Trennung zwischen stationärem Modell und Berechnung des transienten Anteils vornimmt. In Anlehnung an das IIR-Filter und dessen Anwendung beim KNN mit interner Dynamik, wurde ein solches Filter als eigenständiges Modell für die Berechnung des transienten Anteils untersucht. Zwecks einer begrifflichen Trennung und aufgrund der Tatsache, dass es sich um ein eigenständiges (Teil-)Modell handelt, wird im Folgenden die Nomenklatur aus der Zeitreihenanalyse übernommen, bei der dieser Modelltyp als ARMA-Modell bezeichnet wird (vgl. 2.3) [109]. Durch seine Eigenschaft der Informationsrückführung wird die Hypothese aufgestellt, dass dieses Modell dem physikalischen Prozess näher steht, als ein Modell auf Basis einer doppelten Exponentialfunktion.

Das Ermitteln der Koeffizienten für das ARMA-Modell geschieht für jeden einzelnen Lastwechsel (nach Subtraktion des Stationäranteils von den Messdaten) über die Lösung des linearen Gleichungssystems unter Anwendung von Gleichung (5.1).

$$\begin{aligned} \frac{dm_{PM,trans,Lw}}{dt}(k) = & b_{Lw,0}P_{ord}(k) + b_{Lw,1}P_{ord}(k-1) + b_{Lw,2}P_{ord}(k-2) \\ & - a_{Lw,1}\frac{dm_{PM,trans,Lw}}{dt}(k-1) - a_{Lw,2}\frac{dm_{PM,trans,Lw}}{dt}(k-2) \end{aligned} \quad (5.1)$$

mit

$b_{Lw,0}, b_{Lw,1}, b_{Lw,2}, a_{Lw,1}, a_{Lw,2}$	ARMA-Koeffizienten für Lw-ten Lastwechsel
k	aktueller Zeitpunkt

Das Gleichungssystem muss jeweils für die Dauer einer Instationarität gelöst werden. Anhand von Erfahrungswerten wurde diese Zeitspanne in Abhängigkeit des negativen Gradienten im Anschluss an jede Emissionsspitze mit 1/10 dieses Wertes definiert. Diese Definition entspricht zwar nicht der tatsächlichen Dauer der Instationarität, erscheint aber für den gewählten Ansatz als mathematisch sinnvoll.

Die schematische Darstellung in Abb. 5.6 ist angelehnt an Abb. 4.12 auf Seite 80: Die fünf ARMA-Modell-Koeffizienten bedürfen fünf statischer MLP-Netze, die als Speicher für die fünf LW-abhängigen Koeffizienten dienen. Zur Berechnung des Stationäranteils wird ein weiteres statisches MLP-Netz modelliert. Die Anzahl zu bestimmender Parameter setzt sich aus den Gewichten, die für alle insgesamt sechs statischen MLP-Netze notwendig sind, zusammen.

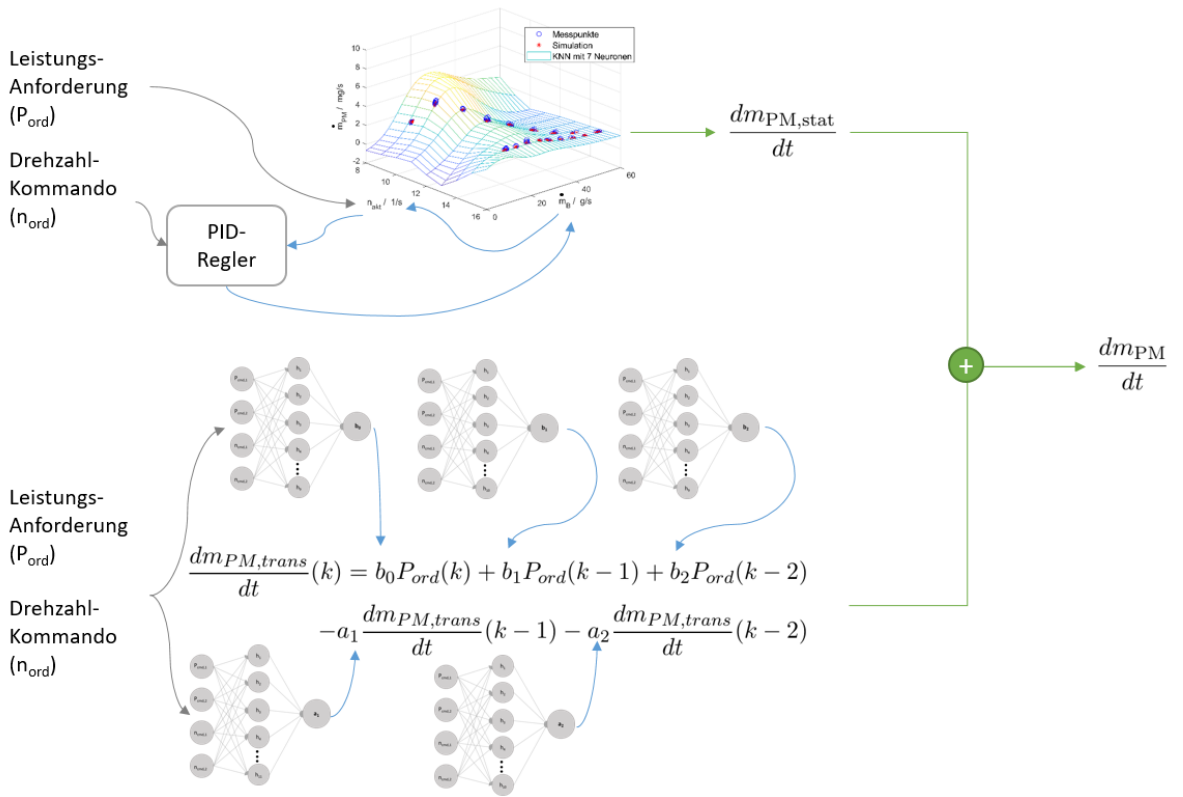


Abbildung 5.6: Schematische Darstellung des hybriden Ansatzes: Der Stationäranteil wird über ein stationäres MLP-Netz erzeugt, während der transiente Anteil über ein ARMA-Modell berechnet wird, dessen fünf Parameter ebenfalls über stationäre MLP-Netze abgerufen werden können. Beide Anteile werden addiert. Die Eingangsdaten für das Gesamtmodell sind die Verläufe von Drehzahl- und Leistungsvorgabe.

Das Training beginnt mit der Extraktion stationärer Betriebspunkte aus den Messungen (hier: synthetisch erzeugte Datensätze), um ein erstes MLP-Netz für die Stationäranteile erzeugen zu können. Entsprechend der Vorgehensweise, die in Kapitel 4 vorgestellt wurde, werden im Anschluss daran von den Messdaten die rechnerisch ermittelten Stationäranteile subtrahiert. Die Koeffizienten für das ARMA-Modell zur Beschreibung der transien-

ten Anteile werden über ein lineares Gleichungssystem unter Nutzung von Gleichung (5.1) bestimmt. Dieser Vorgang führt zu einem nahezu identischen Verlauf des Partikelmassenstroms wie Abb. D.37 (gelber Verlauf) im Anhang zeigt. Für Lastreduktionen werden, ähnlich dem Ansatz mit der doppelten Exponentialfunktion, die Koeffizienten konstant gehalten mit $b_0 = 0, b_1 = 0,01, b_2 = -0,013, a_1 = -1,5, a_2 = 0,8$.

Der Zusammenhang zwischen den Drehzahl-/Leistungsvorgaben und deren Änderungen als Modelleingangswerte und dem jeweiligen Koeffizienten als Ausgabewert wird jeweils in einem statischen MLP-Netz abgespeichert. Die Hyperparameter sind aus den Untersuchungen zum statischen MLP-Netz (vgl. 2.4.1) bekannt und müssen für jeden Koeffizienten bestimmt werden.

Die wichtigsten Hyperparameter, deren Grenzen und Intervalle für die Rastersuche sind:

Anzahl der versteckten Neuronen n :	[4, 16], mit Schrittweite 1
Aktivierungsfunktion $f(z_j)$:	Tangens hyperbolicus
Anzahl versteckter Schichten N :	auf 1 festgelegt
Lernrate α :	[0,002, 0,02], ohne Zwischenschritte
Größe eines Batches:	[1, 8], ohne Zwischenschritte
Anzahl Epochen:	[3000, 6000], ohne Zwischenschritte

Je nach Kombination müssen insgesamt zwischen 125 und 485 Synapsen- und Schwellenwertgewichte zur Beschreibung der fünf statischen MLP-Netze für die Koeffizienten bestimmt werden. Die Parameteranzahl für das MLP-Netz, das den Stationäranteil beschreibt, liegt zwischen minimal 17 und maximal 41 Parametern. Tabelle 5.5 zeigt für jeden Datensatz, welche Hyperparameterkombination nach 3-facher Wiederholung der mehrdimensionalen k-fachen Kreuzvalidierungen die Bewertungskriterien am zufriedenstellendsten erreicht hat.⁵

Die Bezeichner (M3_xxLW) beziehen sich jeweils auf ein parametrisiertes Modell M3 aus der Parameterschätzung unter Anwendung der in Tabelle 5.5 genannten Hyperparameterkombinationen. Abb. 5.7 zeigt beispielhaft, wie mit Modell M3_1LW der 1. Datensatz nachgebildet wird. Weitere entsprechende Bilder zu den Ergebnissen aller vier Datensätze befinden sich in Anhang D (Abb. D.3, D.12, D.21, D.30). Sie dienen dem Vergleich mit den beiden anderen Verfahren.

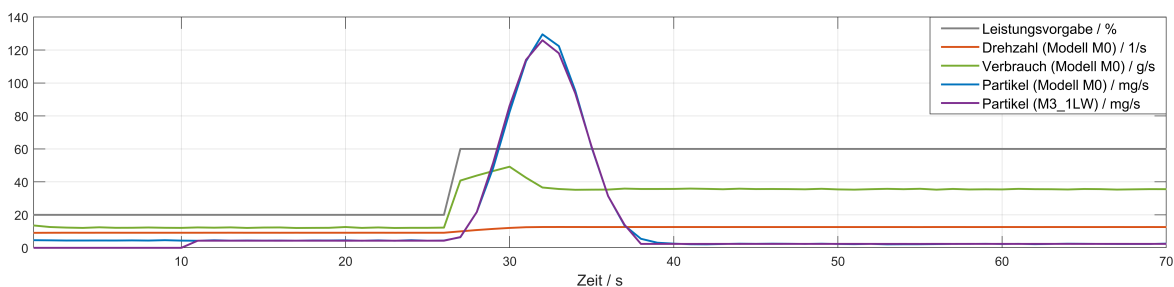


Abbildung 5.7: Simulationsergebnis von Modell M3_1LW mit Trainingsdatensatz von Modell M0: $m_{PM,tot}$ von Modell M0: 927 mg; $m_{PM,tot}$ von Modell M1_1LW: 918 mg

⁵ Für den 4. Datensatz erfolgte aus Zeitgründen lediglich ein einmaliger Durchgang

Tabelle 5.5: Aufstellung der Hyperparameterkombinationen für Modell M3, die mit hoher Wahrscheinlichkeit den Bewertungskriterien am ehesten nachkommen. Reihenfolge der Angaben: MLP-Netze für Stationärbetrieb, sowie für die Koeffizienten b_0, b_1, b_2, a_1, a_2

Datensätze/LW: Hyperparameter:	1. Datensatz: 1 LW	2. Datensatz: 144 LW	3. Datensatz: 544 LW	4. Datensatz: 12960 LW
N° Neuronen (h)	6/9/1/9/ 9/9	6/11/15/13/ 15/15	6/11/15/14/ 15/15	6/15/13/11/ 16/15
Lernrate	0,002 (alle)	0,002/0,02/0,02/ 0,02/0,02/0,02	0,002/0,02/0,02/ 0,02/0,02/0,02	0,002/0,002/0,02/ 0,02/0,002/0,02
Batchgröße	1 (alle)	1 (alle)	1 (alle)	1 (alle)
N° Epochen	3000 (alle)	6000 (alle)	6000/6000/6000/ 3000/6000/6000	3000/6000/6000/ 3000/6000/6000
N° Parameter	37/55/7/55/ 55/55(Σ 264)	25/67/91/79/ 91/91 (Σ 444)	25/67/91/85/ 91/91 (Σ 450)	25/91/79/55/ 98/91 (Σ 439)
Trainingszeit	0.6 s	28.5 s	1 m 37 s	53 m 30 s
Simulationszeit (Testdatensatz)	91 ms	102 ms	108 ms	106 ms
Simulationszeit (24-min. Vorhersage)	29 ms	32 ms	34 ms	33 ms
Bezeichner	M3_1LW	M3_144LW	M3_544LW	M3_12960LW

Tabelle 5.6 nennt die quantitativen Ergebnisse zu den vier ausgewählten Modellen. Exemplarisch und zur besseren Interpretierbarkeit werden in Anhang D, Abb. D.8, D.17, D.26 und D.35, Histogramme zu den Ergebnissen bzgl. der Spitzenwerte dargestellt.

Abb. 5.8 stellt die Ergebnisse dar, welche anhand der vier ausgewählten Modellarchitekturen und ihrer Parameter zur Nachbildung des als Beispiel dienenden überlagerten Lastwechsels (30 % -> 60 %/ 70 %) erreicht werden. Im Vergleich mit der Vorlage aus den synthetisch generierten Daten aus Abb. 4.13 (rechts) bildet keines der vier Modelle diesen überlagerten Lastwechsel auch nur näherungsweise ab. Beim genauen Überprüfen wird insbesondere bei M3_544LW festgestellt, dass der transiente Anteil Null gesetzt wird. Grund dafür ist, dass die Kombination der aus den MLP-Netzen entnommenen Koeffizienten dem Verlauf eine negative Auslenkung geben würden. Negative Werte werden gleich Null gesetzt.

Tabelle 5.6: Darstellung ausgewählter Ergebnisse aus Training, Validierung und Testung unter Nutzung von Modell M3.

Bezeichner: Kriterium/Bezug:	M3_1LW	M3_144LW	M3_544LW	M3_12960LW
ΔPM_{tot} Trainingsdaten	-0,5 %	-15,5 %	50,8 %	11,8 %
Δ Spitzenwerte Trainingsdaten	2,8 %	47,2 %	78,3 %	106,4 %
Δ Stationärbetrieb Trainingsdaten	2,9 %	3,5 %	3,6 %	3,7 %
$\Delta m_{PM,tot}$ Validierungsdaten	2,7 %	676,1 %	-2,7 %	5,0 %
Δ Spitzenwerte Validierungsdaten	N/A	886,3 %	79,9 %	123,5 %
Δ Stationärbetrieb Validierungsdaten	3,1 %	1,7 %	13,2 %	3,7 %
$\Delta m_{PM,tot}$ Testdaten	134,6 %	-46,4 %	7.385,7 %	105.556,4 %
Δ Spitzenwerte Testdaten	563,6 %	67,2 %	5.836,3 %	117.130,0 %
Δ Stationärbetrieb Testdaten	13,3 %	3,7 %	3,5 %	3,4 %

Um zu untersuchen, ob die oben aufgestellte Hypothese, dass aufgrund der Rückführung prädizierter Werte (Autoregression) eine überlagerte Dynamik dem physikalischen Prozess näher kommen könnte, wurde deshalb ein weiteres Szenario mit Modell M0 synthetisch erzeugt: Ein überlagerter Lastwechsel von 30 % -> 60 % / 100 % auf der Propellerkurve. Abb. 5.9 zeigt in roter Farbe den Verlauf der mit Modell M0 synthetisch erzeugten Daten als Reaktion auf die in gelb dargestellten Lastwechsel. Der blaue Verlauf entstammt der Berechnung mit Modell M3_144LW. Die leichte Abweichung des blauen Verlaufs vom roten rechts der Emissionsspitze deutet auf die Mehremission durch den zweiten Kommandowechsel hin.⁶ Nichtsdestotrotz

⁶ Diese Differenz wurde beim Vergleich auf Basis eines einzelnen Lastwechsels 30 % -> 60 % nicht beobachtet.

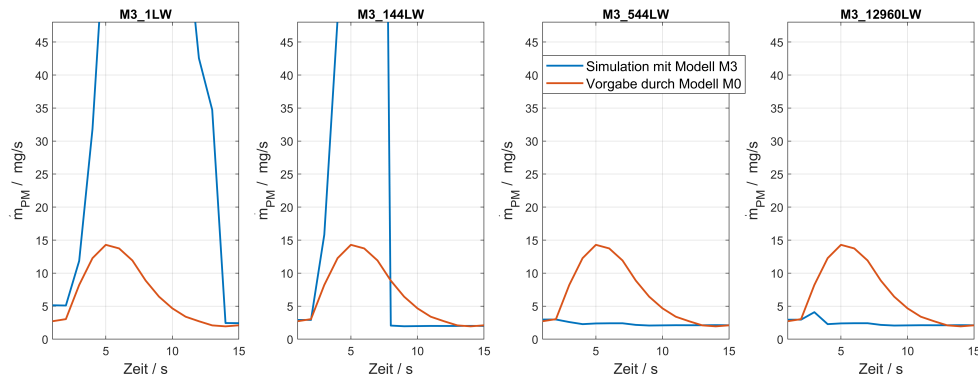


Abbildung 5.8: Überlagerte Lastwechsel von 30 % / 60 % bzw. 70 % nachgebildet mit hybridem ARMA-Modell-Ansatz gemäß der in Tabelle 5.6 verwendeten Modelle; v.l.n.r.: M3_1LW, M3_144LW, M3_544LW, M3_12960LW

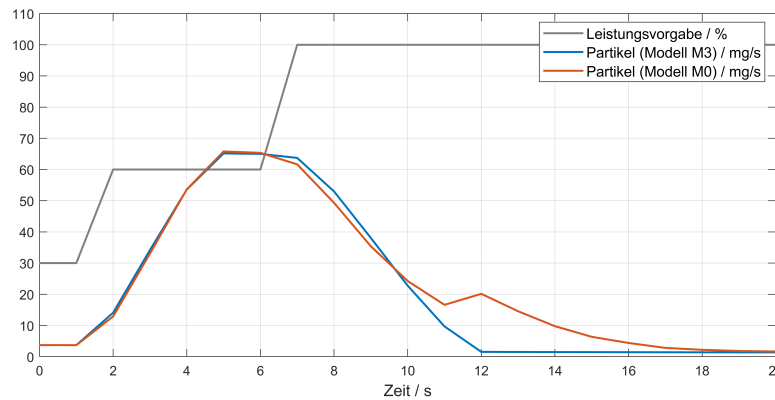


Abbildung 5.9: Überlagerter Lastwechsel von 30 % -> 60 % / 100 % auf der Propellerkurve synthetisch erzeugt (gelb), simuliert mit Modell M3_144LW. (rot)

wird deutlich, wie unterschiedlich die beiden hybriden Ansätze mit überlagerten Dynamiken umgehen. Welche dem realen Prozess tatsächlich näher steht, konnte mangels Anzahl und Zuverlässigkeit entsprechender Prüfstandmessdaten nicht endgültig geklärt werden.

Die Beobachtungen, Erkenntnisse und Auffälligkeiten aus den zahlreichen Iterationen bei der mehrdimensionalen Rastersuche, welche in Form einer Tabelle nur unzureichend wiedergegeben werden können, werden nachstehend diskutiert:

Anzahl und Diversität der gemessenen, bzw. synthetisch generierten Lastwechsel

Hinsichtlich der Ergebnisse aus Tabelle 5.6 scheint es unmöglich, objektiv zu urteilen, welche Vielfältigkeit der Daten für eine erfolgreiche Modellparametrierung geeignet ist. Das Hauptproblem wird bei der Modellstabilität gesehen. Während zahlreiche Verläufe quantitativ gut nachgebildet werden, gibt es wiederum einige Vorhersagen, die unrealistisch hohe Spitzenwerte präzisieren und somit die quantitativen Kriterien entsprechend negativ beeinflussen.

Abstand zwischen Kommandowechseln

Die Distanz zwischen einem und dem nächsten Lastwechsel ist für dieses Verfahren nicht relevant. Jede Laständerung kann gesondert betrachtet werden.

Anzahl versteckter Neuronen

Die Rastersuche mit k -facher Kreuzvalidierung hat insbesondere für die statischen MLP-Netze der ARMA-Koeffizienten eine relativ hohe Zahl versteckter Neuronen gefordert. Eine visuelle Überprüfung zur Sinnhaftigkeit ist bei vier Eingangswerten nicht möglich und muss im Vertrauen auf die Konsistenz des Trainings-Validierungs- und Testungs-Vorgehen hingenommen werden. Für das MLP-Netz zur Vorhersage des Stationäranteils wird erwartungsgemäß eine geringere Anzahl versteckter Neuronen benötigt.

Lernrate

Abhängig von der Startwertewahl wirkt sich die Lernrate stärker als andere Hyperparameter auf die Ergebnisqualität aus. Dies ist ein Grund für die Entwicklung diverser Strategien [50], die Startwerte im Pre-Processing sinnvoll einzugrenzen oder die Lernrate adaptiv zu gestalten.

Anzahl Epochen

Beim Training kann mit Erhöhung der Epochen ein Glättungseffekt auftreten. Eine zu geringe Anzahl Epochen hat den Nachteil, dass die Anpassung des Modells womöglich noch nicht genug weit fortgeschritten ist. Abhilfe kann ein im Voraus festgelegtes Abbruchkriterium schaffen, von dem die Anzahl der Epochen abhängig gemacht wird. Die Beobachtung zeigt, dass offensichtlich 6000 Epochen bei statischen MLP-Netzen einen positiven Effekt haben im Vergleich zur ebenfalls geprüften Alternative mit 3000 Epochen.

Größe eines Batches

Während beim MLP-Netz zur synthetischen Erzeugung des Stationäranteils ein 8er-Mini-Batch beim Training zum besten Ergebnis geführt hat, wurde dieser Hyperparameter im Rahmen der Rastersuche durchgängig mit 1 (Single Sample) angegeben.

Anzahl versteckter Schichten

Die Anzahl versteckter Schichten wurde mit einer einzigen Zwischenschicht N festgelegt. Grund dafür ist, dass die verwendeten Algorithmen selbstständig programmiert wurden und keinerlei fertige KNN-Bibliotheken Verwendung fanden. Die Komplexität sollte niedrig gehalten und die entstandenen Programmcodes nachvollziehbar bleiben, um ggf. eine Übertragung in die erwähnte Assistenz-Software leicht zu ermöglichen.

Aktivierungsfunktion

Als Aktivierungsfunktion wurde der Tangens hyperbolicus, eine standardmäßig verwendete Aktivierungsfunktion, programmtechnisch umgesetzt.

Bei der Anwendung dieses Modellansatzes wird, ähnlich wie beim Modell zur synthetischen Datenerzeugung, der größte Aufwand bei der Organisation der Programmteile sowohl für das Training als auch für die Simulation gesehen. Die in Tabelle 5.5 genannten Trainings- bzw. Simulationszeiten sind relativ zu betrachten, da sie u. a. auch von vorhandener Rechenleistung, Software und Programmiererfahrung abhängig sind.

Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass die ursprüngliche Hypothese, welche zum Modellansatz M3 geführt hat, sich theoretisch bestätigt: Die Trennung von stationär und transient führt zu zuverlässigeren Ergebnissen bzgl. Stationäranteil. Die Nachbildung der Instationaritäten ist aus theoretischer Sicht ebenfalls in sehr guter Annäherung möglich, was Abb. D.37 im Anhang belegt: Werden die ARMA-Koeffizienten über das lineare Gleichungssystem ermittelt, so können damit die Verläufe von Modell M0 beinahe deckungsgleich nachgebildet werden. Das Problem liegt bei der Sensitivität des ARMA-Modells auf bereits geringe Abweichungen bei den Koeffizienten, was bei der Interpolation sehr deutlich zum Ausdruck kommt, die spätestens beim Testdatensatz notwendig wird. Abb. D.38 im Anhang verdeutlicht anhand von Streudiagrammen und dem jeweiligen Korrelationskoeffizienten R die erreichte Qualität der fünf statischen MLP-Netze durch das Training: Trotz fast 100%iger Übereinstimmung zwischen berechneten und simulierten Koeffizienten entstehen im Gesamtmodell sichtbare Abweichungen bei der Simulation wie ebenfalls Abb. D.37 zu entnehmen ist.

5.4 Zusammenfassung und Fazit

Drei unterschiedliche Anwendungen von Künstlichen Neuronalen Netzen wurden in den Abschnitten 5.1 bis 5.3 auf Basis von synthetisch generierten Datensätzen unterschiedlicher Länge untersucht und diskutiert. Keines der drei Verfahren überzeugte auf Anhieb. Bei jedem konnten Vor- und Nachteile festgestellt werden. Die wichtigsten im Überblick:

KNN mit externer Dynamik (Modell M1):	Überzeugt durch seine Einfachheit in der Anwendung und Umsetzung, birgt aber die Gefahr, Vorhersagen weit entfernt von physikalischen Zusammenhängen zu treffen.
KNN mit interner Dynamik (Modell M2):	Überzeugt durch die geringe Anzahl notwendiger Modellparameter, ist jedoch bei der Suche passender Startwerte und Hyperparameter vergleichsweise anspruchsvoll.
Hybrider Ansatz mit ARMA-Modell (Modell M3):	Überzeugt durch die Trennung von Stationäranteil und transientem Teilmodell, reagiert allerdings sehr sensibel auf geringe Abweichungen bei den ARMA-Koeffizienten.

Im folgenden Kapitel werden die drei Ansätze einander gegenübergestellt und, unter Hinzunahme des Modells M0 zur synthetischen Datenerzeugung, verglichen.

6 Ergebnisauswertung

6.1 Ergebnisübersicht zu den Modellen M0 bis M3

Die Ergebnisse dieser Arbeit beschränken sich nicht nur auf die Untersuchungen zu den drei Verfahren aus Kapitel 5. Auch das Modell M0 zur synthetischen Datenerzeugung ist im Rahmen dieser Arbeit entstanden. Dessen Eignung zur Lösung der eingangs dargelegten Problemstellung soll nun parallel zu den drei anderen Verfahren und deren jeweils favorisierten Modellarchitektur bzw. Hyperparameterkombination beurteilt werden. Die Auswahl der hier als Beispiele verwendeten, parametrisierten Modelle (Bezeichner: M1_12960LW, M2_544LW, M3_544LW) verlangte eine Abwägung der Bewertungskriterien untereinander, wobei die Priorität beim Kriterium ΔPM_{tot} lag, gefolgt von Δ Stationärbetrieb und Δ Spitzenwerte, jeweils bezogen auf den Testdatensatz. Das abschließende Urteil bildete eine optische Sichtung mit Vergleich der Soll- und Ist-Verläufe.

Beim Lesen von Tabelle 6.1 muss beachtet werden, dass Modell M0 auf Grundlage der echten Messdaten und nicht auf synthetisch erzeugten Daten bewertet wird. Mit fett gedruckter Schrift ist jeweils das Verfahren hervorgehoben, welches das Vergleichskriterium aus der linken Spalte am zufriedenstellendsten erfüllt.

Die Bewertung in Tabelle 6.1 hebt hervor, dass Kriterien wie Robustheit und Modellgüte eher für das hybride Verfahren mit doppelter Exponentialfunktion, also für Modell M0 sprechen. Was die Kriterien der programmtechnischen Umsetzung betrifft, schneidet das KNN mit externer Dynamik, also Modell M1 am besten ab. Im Vergleich mit dem KNN mit interner Dynamik (Modell M2) und dem hybriden Ansatz mit ARMA-Modell (Modell M3) konnte mit dem Modellen M0 und M1 i. A. auch eine bessere Vorhersagegüte beobachtet werden.

6.2 Diskussion der Ergebnisse

Die Arbeit hat gezeigt, dass aufgrund der Abhängigkeit von zufällig gewählten Startwerten (bei nichtlinearen Optimierungsproblemen eine durchaus übliche Vorgehensweise) nur vergleichende, keine absoluten Aussagen zu den Modellen getroffen werden können. Durch mehrfache Wiederholung von Algorithmen konnten aus Beobachtungen Tendenzen abgeleitet werden.

Insbesondere bei Modell M2 zeigte sich die Wichtigkeit einer guten Wahl der Startparameter. Insbesondere bei Modellen mit Rückführung sei Stabilität von herausragender Bedeutung, schreibt Patan in [110]. Er hat hierzu etliche Untersuchungen durchgeführt mit dem Ergebnis, dass eine Ableitung der ersten Lyapunov-Methode¹ für den von ihm untersuchten Fall eines kaskadierenden Netzwerks mit lokalen Rückführungen zu signifikanten Verbesserungen punkto Modellstabilität geführt hat: „If the predictor is unstable for certain choices of neural model parameters, serious numerical problems can occur during training.“²

¹ Die Stabilitätsanalyse eines Gleichgewichtspunktes x_0 erfolgt durch die Untersuchung der Stabilität des entsprechenden linearisierten Systems in der Umgebung des Gleichgewichtspunktes.

² z.Dt. Wenn der Prädiktor für bestimmte Wahlmöglichkeiten der Parameter des neuronalen Modells instabil

Tabelle 6.1: Vergleich aller untersuchter Verfahren inkl. des Modells zu synthetischen Datenerzeugung mit Augenmerk auf Anwendbarkeit. Die Vergleichskriterien in den Zeilen 2 bis 7 beziehen sich auf die favorisierte Modellarchitektur, genannt in Zeile 1.

Verfahren: Vergleichskriterien:	Modell M0	Modell M1	Modell M2	Modell M3
favorisierte Modellarchitektur	basierend auf Messdaten	M1_12960LW	M2_544LW	M3_544LW
Messdatenaufwand	Zeiten zw. LW könnten verkürzt werden; ca. 10 h	möglichst geringer Abstand zw. LW; ca. 100 h	größerer Abstand zw. LW möglich; ca. 14 h	LW können einzeln vorliegen; ca. 14 h
Programmieraufwand (Training&Simulation)	erheblich durch Komplexität	relativ gering	erheblich	erheblich durch Komplexität
Anzahl Parameter	25/67/73/49 (Σ 218)	381	42	25/67/91/85/91/91 (Σ 450)
Trainingsaufwand	erheblich, da manuelle Anpassung nötig.	hohe Rechenzeit, keine zusätzl. Arbeit	Zeitintensiv wegen Startwertesuche	kurze Rechenzeit , wenig zusätzl. Arbeit
Simulationszeit (24-min. Vorhersage)	16 ms	34 ms	23 ms	34 ms
Vorhersagegüte (bzgl. Testdatensatz)	+++	++	+	–
praktische Umsetzbarkeit z.B. in SAMMON	sehr aufwendig	leicht realisierbar	relativ gut umsetzbar	eher aufwendig
Robustheit Zuverlässigkeit	sehr stabil	eher gering	möglicherweise instabil	teilweise instabil
Verbesserungspotential	formelbasierte Ermittlung der drei Parameter der doppelten Expo.-Funktion	verbesserte Trainingsstrategie, Erhöhung der Komplexität	verbesserte Wahl der Startwerte	Identifizierung, bzw. Behebung von Ausreißern in Vorhersage

In der Literatur gibt es diverse Trainingsalgorithmen, die gegenüber des hier verwendeten BP-Algorithmus' Vorteile bei der Suche nach dem Optimum aufweisen sollen. Gemäß Kourentzes et al. [111] würden aber auch diese in lokalen Optima stecken bleiben. Er schlägt deshalb wiederholtes Training mit derselben Modellarchitektur vor, jedoch unter Hinzunahme unterschiedlicher Startwerte, oder aber die sogenannten „Neural Network Ensembles“: Diverse Teilmodelle prognostizieren parallel je einen Ausgabewert bzw. -vektor, woraus nach einem bestimmten Verfahren die eigentliche Modellausgabe errechnet wird.

Dem Ensemble-Gedanken widmet sich auch Mattos Neto et al. in dem 2021 veröffentlichten Papier [112] mit dem Unterschied, dass 16 Modelle unterschiedlichster Art, u. a. ARMA/IIR-Modelle und MLP-Netze, parallel rechnen und deren Ausgaben zusammengeführt werden. Eine Idee, die auch mit den hier untersuchten Verfahren vorstellbar wäre, jedoch dem Kriterium der einfachen Überführung in die Praxis entgegensteht. Untersuchungsgegenstand in [112] sind Vorhersagen zu Partikelkonzentrationen auf der Grundlage vergangener Vorhersagewerte (\hat{y}). Thematisch sehr ähnlich zeigen sich die Untersuchungen von Biancofiore et al. in [113]. Hier wird ein KNN mit Rückführungen zwischen den Neuronen vorgestellt, welches auf Basis zahlreicher externer Einflüsse vom aktuellen Zeitpunkt (\mathbf{u}) die Partikelkonzentration der drei darauffolgenden Tage vorhersagen soll. Das Ergebnis zeigt, dass Konzentrationen im niedrigeren Bereich zu beinahe 100 % richtig vorhergesagt werden können, während die Konzentrationsspitzen nur zu knapp 60 % gemäß den Erwartungen prognostiziert werden können. Der Herausforderung, die Abweichung von den Spitzenwerten gering zu halten, standen auch in der vorliegenden Arbeit die Ergebnisse der zahlreichen Trainings- und Validierungsiteration sehr oft gegenüber. Die Nachbildung der Spitzenwerte hatte zwar nicht oberste Priorität, dennoch sollte, gerade im Hinblick auf weiterführende Arbeiten (vgl. 7.2.2) nicht nur Wert auf möglichst viele unterschiedliche Lastwechsel gelegt werden, sondern auch auf eine ausgeglichene Verteilung dieser Lastwechsel hinsichtlich der Intensität der Partikelausstöße.

Diese aktuellen Ergebnisse zeigen, dass die experimentelle Modellbildung zahlreiche Stellschrauben und Bausteine besitzt. Eine große Herausforderung wird in der Abwägung zwischen einer hohen Modellkomplexität zum Erreichen zuverlässiger Vorhersagen und der praktischen Umsetzbarkeit sowie Nachvollziehbarkeit gesehen.

Oft handelt es sich bei Schlussfolgerungen aus der Forschung mit KNN um Heuristik, bei der sich die Frage stellt, ob und wie viel Verbesserungspotential noch gegeben ist. Die hier erläuterten Verfahren und Algorithmen wurden allesamt eigenständig in der kommerziellen Software *MATLAB*[®] programmiert. Das Verständnis und die Möglichkeit, eigenständig Anpassungen vornehmen zu können, waren die Hauptmotivationen, um nicht auf fertige Bibliotheken oder Toolboxen zurückzugreifen. Eine vielseitige Open Source Anwendung ist Keras [114], welche eine „Deep Learning“³ Anwendungsprogrammierschnittstelle (API) basierend auf der Programmiersprache Python bereitstellt. Solche umfangreichen Bibliotheken bieten zahlreiche Möglichkeiten an, mit denen die vorgestellten Verfahren mit großer Wahrscheinlichkeit die Bewertungskriterien besser erfüllen könnten. Eine solche Möglichkeit ist bspw. die dynamische Anpassung der Lernrate α . Außerdem teilen Standardroutinen zum Aufsplitten von Datensätzen in Trainings-, Validierungs- und Testdatensätze diese willkürlich auf, was im vorliegenden Fall vermutlich zu besseren Ergebnissen geführt hätte: In 3.3.3 wird bewusst gegen eine Vermischung der Aufzeichnungen aller Betriebsmodi entschieden, so dass der Testdatensatz auch einen komplett anderen Kennfeldbereich abdeckt. Motivation dafür ist das Bestre-

ist, kann es zu ernsthaften numerischen Problemen während des Trainings kommen.

³ Deep Learning ist eine Methode des Maschinellen Lernen, welche sich meist der KNN bedient.

ben, mit großer Wahrscheinlichkeit keine annähernd gleichen Lastwechsel zu haben wie in den Trainings- und Validierungsdatensätze hinterlegt sind. Den Maßstab relativ hoch anzusetzen war beabsichtigt, weil in der Praxis eine ideale Versuchsmatrix mit ca. 544 Lastwechseln oder mehr aus Zeitgründen in den seltensten Fällen systematisch abgefahren werden kann. Deshalb ist die Interpolationsfähigkeit des Verfahrens ein wichtiges Kriterium und wird anhand eines sich von den Trainings- und Validierungsdaten abhebenden Testdatensatzes überprüft.

Eine offene Frage, die an dieser Stelle abschließend beantwortet werden soll, ist der Vergleich der vier Ansätze bei Anwendung auf die vorhandenen Messdaten vom Prüfstand MAN 6L23/30. Die drei Verfahren aus Kapitel 5 fanden mit der jeweils favorisierten Modellarchitektur⁴ Anwendung beim Training, welches pro Verfahren zehnmal ausgeführt wurde. Die quantitativ besten Testergebnisse finden sich in Tabelle 6.2 wieder und geben eine mögliche Antwort auf die obige Frage. Abbildungen zu den Partikelemissionsverläufen, die auf der Grundlage der Prüfstandmessungen (Leistungs- und Drehzahlvorgabe, bzw. Verbrauch und aktuelle Drehzahl) für die 85%-Propellerkurve prognostiziert werden, sind in Anhang E einzusehen. Darin wird als Zoombild zu optischen Vergleichszwecken der mehrfach gemessene Lastwechsel von 30 % auf 40 % hervorgehoben (vgl. 3.5 auf Seite 60).

Tabelle 6.2: Vergleich aller untersuchter Verfahren inkl. des Modells zu synthetischen Datenerzeugung auf Anwendbarkeit in der Praxis unter Hinzunahme der Messdaten vom Motorprüfstand MAN 6L23/30. Die hier dargestellten Ergebnisse beziehen sich auf den Testdatensatz.

Verfahren: Vergleichskriterien:	Modell M0	Modell M1	Modell M2	Modell M3
ΔPM_{tot} (Testdaten)	21.3 %	4.5 %	22.7 %	NaN
Δ Spitzenwerte (Testdaten)	27.3 %	48.4 %	70.8 %	NaN
Δ Stationärbetrieb (Testdaten)	0.3 %	33.1 %	73.4 %	NaN

Das Ergebnis aus diesem Versuch unterstreicht die Tendenzen, die zuvor auf Basis der synthetisch generierten Daten beobachtet werden konnten. Ferner unterstützt es die Hypothese, dass das hybride Modell mit doppelter Exponentialfunktion (Modell M0) und das KNN mit externer Dynamik (Modell M1) sich für die Praxis am ehesten eignen. Ebenfalls wird nochmals deutlich, dass ein KNN mit externer Dynamik relativ gute Ergebnisse liefern kann, auch bei einer geringeren Anzahl von Trainingsdaten als idealerweise vorgeschlagen. Bei näherem Betrachten der Ergebnisse des KNN mit interner Dynamik (Modell M2) fällt positiv auf, dass die Kurvenverläufe des Partikelmassenstroms glatter verlaufen, als jene vom KNN mit externer Dynamik. Der hybride Ansatz mit ARMA-Modell (Modell M3) konnte den Testdatensatz nur ungenügend nachbilden, während die Simulation der Trainingsdaten - wie aus den vorangehenden Untersuchungen bekannt - vergleichbar gute Ergebnisse lieferte.

⁴ Hyperparameter entsprechend M1_12960LW, M2_544LW und M3_544LW

7 Zusammenfassung und Ausblicke

7.1 Zusammenfassung

Als übergeordnetes Ziel wurde ein Beitrag zu einer softwaretechnischen Assistenz für effizientes Manövrieren von Schiffen angestrebt, um auf Betriebsebene eine Minderung von Partikelemissionen herbeizuführen. Sowohl der Untersuchungsgegenstand (Partikelemissionen), als auch die praktische Anwendung (Manöverassistenz-Software) und die ausgewählte Methode (Künstliche Neuronale Netze) bildeten den Rahmen und gleichzeitig die Motivation für die vorliegende Arbeit.

Die Partikelemissionen wurden nach Herkunft, Entstehung, Ausprägungen und Wirkung anhand der aktuellen wissenschaftlichen Erkenntnisse beschrieben. Die Beschreibung anhand der theoretischen Modellbildung lieferte nicht nur ein besseres Verständnis zur Komplexität bei der Entstehung von Partikeln aus dieselmotorischer Verbrennung, sondern auch die Einsicht, dass der Weg der theoretischen Modellbildung für die angestrebte praktische Umsetzung nicht zielführend sein würde.

Die praktische Anwendung, eine Assistenzsoftware für nautisches Personal an Bord von Seeschiffen, soll künftig nicht nur die Bewegung des Schiffes, sondern u. a. auch den Partikelaustritt für das aktuell durchzuführende Manöver vorhersagen können. Diese Perspektive bedingt ein schnell rechnendes Modell.

Die Anwendung Künstlicher Neuronaler Netze (KNN) lässt dem Programmierer viel Spielraum bei der Kombination bereits existierender mathematischer Ansätze und deren Ausgestaltung mit entsprechenden Modellarchitekturen. Drei Verfahren, die sich in unterschiedlicher Weise der Methode der KNN bedienen, wurden programmtechnisch umgesetzt und genauer untersucht. Das erste Verfahren (Modell M1) bediente sich der Theorie der KNN mit externer Dynamik. Beim zweiten Verfahren (Modell M2) wurde mithilfe interner Speicherelemente die Prozessdynamik nachgebildet. Aus der Erfahrung im Laufe der Bearbeitungszeit erwuchs die Idee zum dritten, einem hybriden Verfahren (Modell M3), welches sich statischer Multi-Layer-Perzeptron-Netze (MLP-Netze) bedient und die Dynamik über ein ARMA-Modell berechnet. Alle drei Modellarchitekturen können bei Vorhandensein ausreichender und in entsprechender Qualität aufbereiteter Daten automatisch trainiert werden.

Um diese rein datenbasierten Verfahren unabhängig von Qualität und Quantität der vorliegenden Prüfstandmessdaten untersuchen zu können, wurde ein weiteres Modell zur Erzeugung synthetischer Datensätze (Modell M0) entwickelt. Dieses Modell zur synthetischen Datenerzeugung ist ebenfalls hybrid, also zweiteilig: Der Stationäranteil des Partikelmassenstroms wird über ein statisches MLP-Netz berechnet, während der instationäre, transiente Anteil in Anlehnung an die doppelte Exponentialfunktion nach Vibe simuliert wird. Für die Parametrierung ist Prozesswissen erforderlich, weshalb es sich um ein halbempirisches Modell handelt. Diesem Modell liegen die vorhandenen Messdaten vom Prüfstandmotor MAN 6L23/30 zugrunde. Im Anschluss an die Modellerstellung, -validierung und -testung wurden Datensätze unterschiedlicher Länge damit generiert. Diese bildeten eine solide Grundlage, um

- einerseits die drei Verfahren M1 bis M3 miteinander vergleichen zu können und
- andererseits für jedes Verfahren eine Aussage treffen zu können, welche Bedeutung der Datensatzlänge bzw. der Anzahl gemessener Lastwechsel zukommt.

Die Ergebnisse aus diesen Untersuchungen sind stochastischer Natur und bilden daher nur einen Trend ab. Unter Verwendung von Rastersuche und Kreuzvalidierungen wurden systematisch Erfahrungen zu den drei Verfahren gesammelt, welche die Ergebnisse mit ihren Tendenzen begründen.

Das Bestreben der Arbeit war es, die drei unterschiedlichen Ansätze aus der experimentellen, datenbasierten Modellbildung auf Anwendbarkeit in der oben genannten Zielstellung zu untersuchen, Grenzen zu erkennen und ihren Nutzen einzuschätzen. Die Auswertung der Ergebnisse - unter Einbezug von Modell M0 - lieferte folgende Erkenntnisse:

- Modell M0 (Hybrider Ansatz mit doppelter Exponentialfunktion, zur synthetischen Datenerzeugung): Ein relativ geringer Messdatenaufwand, sehr schnelle Simulationszeiten und zuverlässiger Trend in den Vorhersagen stehen einem relativ hohen Programmieraufwand, einer großen Anzahl zu bestimmender Parameter und nicht-automatisiertem Modelltraining gegenüber.
- Modell M1 (KNN mit externer Dynamik): Ein relativ geringer Programmieraufwand und ein vergleichsweise geringer Trainingsaufwand stehen einer nicht immer zuverlässigen Vorhersage und einem großen Messdatenaufwand gegenüber.
- Modell M2 (KNN mit interner Dynamik): Eine relativ geringe Anzahl zu bestimmender Parameter stehen einem häufig instabilen Vorhersagemodell gegenüber.
- Modell M3 (Hybrider Ansatz mit ARMA-Modell): Ein geringer Trainingsaufwand steht einer sehr hohen Anzahl zu bestimmender Parameter, einer teilweisen Instabilität der Vorhersagen und einem vergleichsweise großen Programmieraufwand gegenüber.

Schlussfolgernd kann festgehalten werden, dass zwei viel versprechende Ansätze in der halbempirischen und in der rein experimentellen Modellbildung gefunden wurden: Bei Vorhandensein qualitativ hochwertiger, großer Datenmengen, aber nur beschränkter Verfügbarkeit von Personal eignet sich die Anwendung vom KNN mit externer Dynamik (Modell M1, vgl. 5.1) relativ gesehen gut, sofern die Modellausgabe zu Informationszwecken, nicht aber prioritär als Handlungsempfehlung genommen wird. Der Eintritt physikalisch nicht nachvollziehbarer Modellausgaben wird beim KNN mit externer Dynamik nicht ausgeschlossen. Demgegenüber hat sich das hybride Modell mit der doppelten Exponentialfunktion bewährt (Modell M0, vgl. 4.4), welches als sogenanntes „Greybox-Modell“ eine gewisse Interpretierbarkeit zulässt und robustere Vorhersagen liefern kann. Nachteilig ist, dass ein manuelles Parameter-Tuning an gewissen Stellen derzeit unverzichtbar ist.

Die im Laufe dieser Arbeit vorgestellten teilweise bekannten und zum Teil selbst weiterentwickelten Methoden zur Prädiktion von Partikelemissionen sind nach Auffassung der Verfasserin nicht nur auf die hier diskutierte Anwendung beschränkt und könnten in Zukunft auch in anderen Interessensgebieten Verwendung finden, vorausgesetzt die Grenzen und Anforderungen dieser Methoden sind bekannt und finden Beachtung.

7.2 Ausblicke

Aus den durchgeführten Untersuchungen ergaben sich neue Fragestellungen. Auch konnten längst nicht alle interessanten Aspekte im Detail betrachtet werden. Drei Aspekte, die während der Bearbeitungszeit wiederkehrend zur Diskussion standen, werden im Folgenden kurz aufgegriffen und so formuliert, dass sie als Aufgabenstellung für weiterführende wissenschaftliche Arbeiten genutzt werden können.

7.2.1 Datenbasierte Modelle in der Motorenprojektierung

Die im Rahmen dieser Arbeit vorgestellte praktische Anwendung geht davon aus, dass Aufzeichnungen von Messdaten am real existierenden Objekt stattfinden können, nämlich am sich in Fahrt befindlichen Schiff bzw. am in Betrieb genommenen Motor. Wie verhält es sich aber mit der Nutzung der vorgestellten Verfahren während der Projektierung eines Schiffes bzw. dessen Motors? Oder andersrum gefragt: Ist es möglich, ein datenbasiertes Emissionsmodell auf einen noch nicht in Betrieb genommen Motor einer neuen Baureihe zu übertragen? Ein ähnlicher Ansatz wurde bspw. in [115] verfolgt, und zwar bezogen auf der Abschätzung von Manövrier- und Seegangseigenschaften von Schiffen mithilfe von KNN.

Datenbasierte Modelle sind in ihrer Interpretierbarkeit stark eingeschränkt, so dass eine Übertragbarkeit auf einen neuen Motor auf den ersten Blick weder plausibel noch sinnvoll erscheint. Aus den Ergebnissen Rückschlüsse zu geometrischen oder betrieblichen Parametern zu ziehen, ist quasi ausgeschlossen, es sei denn, es liegen sehr große Datenmengen von quasi baugleichen Motoren bzw. Schiffen vor [115]. Denkbar ist jedoch, dass ein sogenanntes „Greybox-Modell“, wie es der hybride Ansatz mit der doppelten Exponentialfunktion (Modell M0) beschreibt, eine Anwendung ermöglichen könnte. Drei Bedingungen sollten hierzu untersucht werden:

- (1) Für den stationären Anteil des Modells muss ein theoretisches Modell vorliegen.
- (2) Für den transienten Anteil muss mindestens ein Simulationsergebnis aus einem theoretischen Modell vorliegen.
- (3) Eine Berechnungsvorschrift zur Ableitung der drei Betriebspunktabhängigen Parameter muss vorliegen.

Der ersten Bedingung kann mithilfe der bestehenden theoretischen Modellansätze begegnet werden (vgl. 2.1), wobei hinsichtlich der Rechengeschwindigkeit im Nachgang ein Kennfeld bzw. ein statisches MLP-Netz daraus abgeleitet werden kann. Sowohl für die erste, insbesondere aber auch für die zweite Bedingung muss geklärt werden, welche Information zum Gesamtsystem (ATL, Automatisierung, Regler, u.v.m.) vorliegen muss, damit eine theoretische Simulation eines oder mehrerer Lastwechsel inkl. Emissionsrechnung Erfolg haben kann. Erst wenn diese Bedingungen erfüllt sind, wird die dritte Bedingung interessant. Es soll der Frage nachgegangen werden, ob eine Berechnung der drei für die doppelte Exponentialfunktion charakterisierenden Parameter in Abhängigkeit von Start- und Ziel-Betriebspunkt möglich ist. Aktuell werden diese drei Parameter in statischen MLP-Netzen gespeichert. Im Fall einer physikalischen Beziehung zu weiteren Betriebsparametern könnte analog zur Herangehensweise von Woschni und Anisits [116] und Merker et al. [37] eine Berechnungsvorschrift erarbeitet werden, die eine Übertragbarkeit auf andere Lastwechsel während der Simulation ermöglicht.

Dieser dritte Aufzählungspunkt kann auch unabhängig von beiden vorangehenden und auf Grundlage der Daten aus der vorliegenden Arbeit untersucht werden. Die Findung eines mathematischen Zusammenhangs zwischen einem definierten Lastwechsel und weiteren größeren bzw. kleineren Laständerungen in diversen Betriebsbereichen würden die Notwendigkeit der drei Kennfelder (vgl. Abb. 4.12 auf S.80) aufheben und die Trainingszeit dadurch erheblich reduzieren.

Stellt sich bei den Untersuchungen heraus, dass alle drei Bedingungen erfüllbar sind und eine zuverlässig rechnende Umsetzung praktisch möglich ist, dann könnten künftig bei Änderungen während der Auslegung neuer Motoren die Auswirkungen auf deren Emissionsverhalten mit geringerem Arbeitsaufwand ermittelt und die Einstellungen am Motor iterativ angepasst werden.

7.2.2 Simulation der Partikelgrößenverteilung

Das an den Prüfständen verwendete Partikelmessgerät, ein Pegasor Mi3, ist in der Lage, Partikel bis runter auf einen Durchmesser von 10 nm zu detektieren. Eine Aussage zur Partikelgrößenverteilung ist mit dieser Messtechnik jedoch nicht möglich, da ein Partikelgrößenspektrometer nicht zur Ausrüstung dieses Messgerätes gehört.

Nur in Verbindung mit Angaben zur Verteilung der Partikelgrößen können wesentliche Schlüsse zur Wirkung der insgesamt emittierten Partikeln gezogen werden [112]. Die politische und mediale Diskussion um Feinstaub unterstreicht die Wichtigkeit dieser Unterscheidung. Ultrafeine Partikel ($PM_{0,1}$) mit einem Durchmesser von weniger als $0,1\ \mu m$ können mitunter in den Blutkreislauf eindringen, während $PM_{2,5}$ und PM_{10} den Weg in die Bronchien bzw. lediglich in die Nasenhöhle schaffen.¹ Folglich wäre eine große Anzahl an $PM_{0,1}$ viel schädlicher für den menschlichen Organismus als dieselbe Menge PM_{10} -Teilchen [8].

Bezugnehmend auf die Problemstellung in Abschnitt 1.2 wird an dieser Stelle eine perspektivische Erweiterung der hierin bearbeiteten Aufgabenstellung vorgenommen mit den Aspekten der Darstellung und der rechnergestützten Nachbildung der Partikelgrößenverteilung. Folgende Kategorien würden dann bspw. von Interesse sein:

- $< 0,1\ \mu m$: Ultrafeine Partikel
- $\leq 2,5\ \mu m$: Lungengängiger Feinstaub
- $\leq 10\ \mu m$: Feinstaub
- $> 10\ \mu m$: Grobstaub

Je nach Autor und genutzter Messtechnik kann die Kategorisierung der Größeneinteilungen variieren [117].

In [99] wird parallel zur Messung mit einem Pegasor Mi3 ein Partikelgrößenspektrometer (TSI Engine Exhaust Particle Sizer 3090) für den Stationärbetrieb am Prüfstandmotor MaK 6M20 verwendet, der eine Veranschaulichung der Größenverteilung ermöglicht, wie Abb. 7.1 beispielhaft zeigt. Ihr kann entnommen werden, dass in höheren Lastbereichen dem Ausstoß kleiner Partikel eine relativ große Bedeutung zukommt. Vergleichsweise niedrig ist der Anteil an kleinen Partikeln bei geringerer Last. Für die transienten Untersuchungen am MAN 6L23/30er-Motor musste mangels Verfügbarkeit eines entsprechenden TSI Messgerätes² von

¹ Die tiefgestellten Zahlen, wie 2,5 und 10, beschreiben jeweils den maximalen Durchmesser in Mikrometern.

² Ein solcher TSI Engine Exhaust Particle Sizer 3090 befindet sich im Besitz der FVTR GmbH zur Nutzung am 6M20er-Motor. Es handelt sich dabei um eine fest eingebaute Messtechnik.

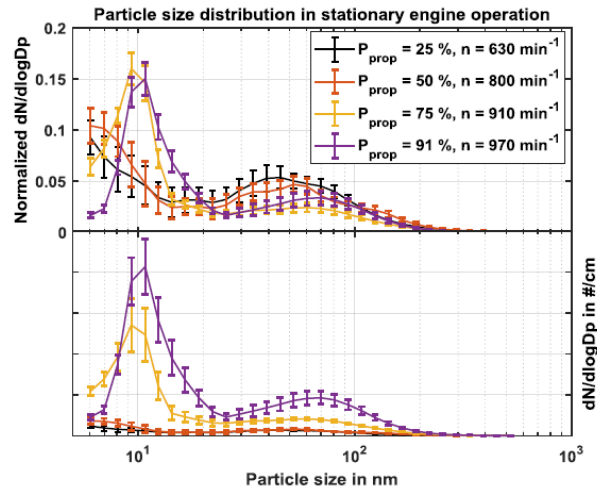


Abbildung 7.1: Partikelgrößenverteilung (oben: normiert, unten: absolut) im stationären Propellerbetrieb für verschiedene Motorlasten [99]

dieser detaillierteren Betrachtung abgesehen werden. Die Aussagekraft der Partikelmodelle wird dadurch geschmälert, nicht aber die Bewertung der Verfahren. Wären Messungen vorhanden, welche die Partikel nach Größe unterteilen, könnten die datenbasierten Modelle auch mit diesen Daten angelernet werden. Für Simulationszwecke müssten dann lediglich mehrere Modelle parallel rechnen. Diese Modellerweiterung hätte zur Folge, dass die Spitzenwerte während des transienten Betriebs erst richtig an Bedeutung und Aussagekraft gewinnen würden. Dem Erreichen der Spitzenwerte wurde daher methodisch bereits bei den dargelegten Untersuchungen Beachtung geschenkt, jedoch nicht die vorderste Priorität eingeräumt.

7.2.3 Datenbasierte Modellbildung mithilfe der Support-Vektor-Regression

Bei der Argumentation um die Modellwahl in Abschnitt 2.3 wurden die KNN der Support-Vektor-Regression (SVR) mit gleichermaßen Chancen zu einer erfolgreichen Umsetzung gegenübergestellt. Von Interesse wäre eine ergänzende Arbeit, welche als Ansatz die SVR verfolgt. Für die dynamische Prozessmodellierung wird davon ausgegangen, dass der transiente Betrieb mithilfe einer externen Dynamik, also über einen vergrößerten Eingangsraum, dem Modell übergeben wird. Aufgrund der beiden Eingangsgrößen Drehzahl n_{akt} und Verbrauch \dot{m}_B mit jeweils ihren Vergangenheitswerten wird der Eingangsraum auf 12 bis 36-dimensional geschätzt (vgl. 5.1). Es liegen sowohl Messdaten von zahlreichen Lastwechseln vor, als auch beliebig viele synthetisch generierte Daten. Diese Datengrundlage - bestenfalls sogar die 4 Datensätze aus Abschnitt 4.4 - soll dazu verwendet werden, um ergänzend zu den hier betrachteten Untersuchungen eine Support-Vektor-Regression durchzuführen. Aufgrund der Nichtlinearität des dynamischen Prozesses muss für die Umsetzung einer SVR eine geeignete Kernfunktion gefunden werden. Ziel ist es herauszufinden, ob sich eine SVR für die Lösung der vorliegenden Problemstellung tatsächlich eignet und welche Bedingungen dafür erfüllt sein müssen. Falls sich die SVR als praktikabel erweist, soll sie anhand der hierin beschriebenen Gütekriterien (3.4) beurteilt werden.

Im Zeitraum der Einreichung dieser Arbeit (11/2021) wurde an der Universität Rostock, am Institut für Mathematik, eine entsprechende Aufgabenstellung in Bearbeitung gegeben.

Literatur

- [1] Paul Scherrer Institut. „Feinstaub wirkt auf Klima und Gesundheit.“ (), Adresse: <http://aerosolforschung.web.psi.ch/index.html> (besucht am 20.10.2021).
- [2] D. T. Silverman, C. M. Samanic, J. H. Lubin u. a., „The Diesel Exhaust in Miners study: a nested case-control study of lung cancer and diesel exhaust,“ eng, *Journal of the National Cancer Institute*, Jg. 104, Nr. 11, S. 855–868, 2012, Journal Article Research Support, N.I.H., Intramural. DOI: 10.1093/jnci/djs034. eprint: 22393209.
- [3] Umweltbundesamt, Hrsg. „Grenzwerte für Schadstoffemissionen von PKW.“ (), Adresse: https://www.umweltbundesamt.de/sites/default/files/medien/376/bilder/dateien/tabelle_grenzwerte_fuer_schadstoffemissionen_von_pkw.pdf (besucht am 25.04.2020).
- [4] EU, *VERORDNUNG (EU) 2016/ 1628 DES EUROPÄISCHEN PARLAMENTS UND DES RATES - vom 14. September 2016 - über die Anforderungen in Bezug auf die Emissionsgrenzwerte für gasförmige Schadstoffe und luftverunreinigende Partikel und die Typgenehmigung für Verbrennungsmotoren für nicht für den Straßenverkehr bestimmte mobile Maschinen und Geräte, zur Änderung der Verordnungen (EU) Nr. 1024/ 2012 und (EU) Nr. 167/ 2013 und zur Änderung und Aufhebung der Richtlinie 97/ 68/ EG*, 2016.
- [5] International Maritime Organization, „Resolution MEPC 176 58, AMENDMENTS TO THE ANNEX OF THE PROTOCOL OF 1997 TO AMEND THE INTERNATIONAL CONVENTION FOR THE PREVENTION OF POLLUTION FROM SHIPS, 1973, AS MODIFIED BY THE PROTOCOL OF 1978 RELATING THERETO,“ Revised MARPOL Annex VI, Jg. 2008,
- [6] IMO. „IMO 2020 – cutting sulphur oxide emissions.“ IMO, Hrsg. (2020), Adresse: <https://www.imo.org/en/MediaCentre/HotTopics/Pages/Sulphur-2020.aspx> (besucht am 16.07.2021).
- [7] M. Schaub, G. Finger, T. Riebe, F. Dahms, E. Hassel und M. Baldauf, „Data-based modelling of ship emissions and fuel oil consumption for transient engine operation,“ in *OCEANS proceedings 2019*.
- [8] Umweltbundesamt, Hrsg. „Seeschiffe - Luftschadstoffe und Energieeffizienz, Partikelemissionen.“ (2021), Adresse: <https://www.umweltbundesamt.de/themen/verkehr-laerm/emissionsstandards/seeschiffe-luftschadstoffe-energieeffizienz#partikelemissionen-> (besucht am 09.06.2021).
- [9] THB - Täglicher Hafenbericht, Hrsg. „150 Carrier werden zu Schrott.“ (2016), Adresse: <https://www.thb.info/rubriken/detail/news/150-carrier-werden-zu-schrott.html> (besucht am 09.06.2021).
- [10] R. Durth, „Sustainable Shipping: Seeschifffahrt und Klimaschutz,“ in *KfW Research – Forschung in Wirtschaft, Umwelt und Gesellschaft*, Bd. Nr. 279, 17. Februar 2020. (besucht am 09.06.2021).

- [11] ISSIMS GmbH, *SAMMON, Simulation Augmented Manoeuvring Design & Monitoring System*, Version 1.4, ISSIMS GmbH, 2019. Adresse: <https://www.issims-gmbh.com/yoomla/products/sammon> (besucht am 21.06.2021).
- [12] K. Benedict, M. Gluch, M. Kirchhoff, S. Fischer, M. Schaub und M. Baldauf, „Application of Fast Time Manoeuvring Simulation for Ship Handling in Simulator Training and On-board,“ in *INSLC 17 -International Navigation Simulator Lecturer Conference*, INSLC, Hrsg., Rostock, 2012.
- [13] K. Benedict, S. Fischer, M. Gluch, M. Kirchhoff, M. Schaub und M. Baldauf, „Innovative Simulation Tools for Learning and Teaching Ships Dynamics & Manoeuvring,“ in *IMLA 2014*, IMLA, Hrsg., Xiamen, China, 2014.
- [14] M. Schaub, K. Benedict, M. Gluch, G. Milbradt, G. Tuschling und M. Kirchhoff, „Modelling of Ships for Simulator Training and Simulation-Augmented Manoeuvring Support on Board and from the Shore,“ in *MARSIM 15*, International Conference on Ship Manoeuvrability and Maritime Simulation, Hrsg., Newcastle, UK, 2015.
- [15] M. Baldauf, J.-U. Schröder-Hinrichs, A. Kataria, K. Benedict und G. Tuschling, „Multidimensional simulation in team training for safety and security in maritime transportation,“ *Journal of Transportation Safety & Security*, Jg. 8, Nr. 3, S. 197–213, 2016, ISSN: 1943-9962. DOI: 10.1080/19439962.2014.996932.
- [16] K. Benedict, S. Fischer, M. Gluch u. a., „Innovative Fast Time Simulation Tools for Briefing / Debriefing in Advanced Ship Handling Simulator Training and Ship Operation,“ *Transactions on Maritime Science*, Jg. 6, Nr. 1, S. 24–38, 2017, ISSN: 1848-3305. DOI: 10.7225/toms.v06.n01.003.
- [17] K. Benedict, M. Gluch, M. Kirchhoff u. a., „Enhanced Fast-Time-Simulation Features to support Ship-Handling Simulator Training,“ in *IAMU 2018, 19th Annual General Assembly (AGA) of the International Association of Maritime Universities (IAMU)*, 17-19 October 2018, Barcelona, Spain, G. Grifoll, F. X. Martinez de Osés, M. Castelles und A. Martin, Hrsg., Barcelona: Barcelona School of Nautical Studies, Universitat Politècnica de Catalunya, 2018, S. 94–112, ISBN: 978-84-947311-7-4. Adresse: http://www.iamu2018.com/frontal/doc/Ebook_IAMU_2018.pdf (besucht am 22.10.2018).
- [18] M. Schaub, „DATA-BASED PREDICTION OF SOOT EMISSIONS FOR TRANSIENT ENGINE OPERATION,“ *Informatyka, Automatyka, Pomiary w Gospodarce i Ochronie Środowiska*, Jg. 9, Nr. 4, S. 10–13, 2019, ISSN: 2083-0157. DOI: 10.35784/IAPGOS.29.
- [19] M. Schaub, G. Finger, G. Milbradt, T. Riebe, M. Baldauf und M. Kirchhoff, „Numerische Modellierung von Emissionen und Brennstoffverbrauch beim Manövrieren von Schiffen,“ *Schiff & Hafen*, Nr. 09/2020, S. 12–17,
- [20] B. Schölkopf und A. J. Smola, *Learning with kernels, Support vector machines, regularization, optimization, and beyond*, Ser. Adaptive computation and machine learning. Cambridge, Mass: MIT Press, 2002, 626 S., ISBN: 0-262-19475-9. Adresse: <http://search.ebscohost.com/login.aspx?direct=true&scope=site&db=nlebk&db=nlabk&AN=78092>.
- [21] W. Ertel, *Grundkurs Künstliche Intelligenz, Eine praxisorientierte Einführung*, 1. Aufl. Wiesbaden: Vieweg+Teubner Verlag / GWV Fachverlage GmbH Wiesbaden, 2008, 336 S. DOI: 10.1007/978-3-8348-9441-0.

-
- [22] S. Pfeiffer, *Künstliche Intelligenz: Wie fit ist die Belegschaft im Maschinen- und Anlagenbau? Vortrag beim gleichnamigen VDMA-Webinar am 24. Juni 2020*, VDMA, Mit-arb., online, 24. Juni 2020. Adresse: <https://www.sabine-pfeiffer.de/vortraege>.
 - [23] R. van Basshuysen und F. Schäfer, *Handbuch Verbrennungsmotor*. Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden, 2015, 1279 S. DOI: 10.1007/978-3-658-04678-1.
 - [24] G. P. Merker, Hrsg., *Grundlagen Verbrennungsmotoren, Funktionsweise, simulation, messtechnik*, 6., ergänzte Auflage, ATZ/MTZ-Fachbuch, Merker, Günter P (editor.), Heidelberg: Springer Vieweg, 2012, 812 S., ISBN: 978-3-8348-1393-0. DOI: 10.1007/978-3-8348-8306-3.
 - [25] International Organization for Standardization, Hrsg., *Reciprocating internal combustion engines - Exhaust emission measurement*, ISO.
 - [26] W. Roedel und T. Wagner, *Physik unserer Umwelt: Die Atmosphäre*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2011, 597 S. DOI: 10.1007/978-3-642-15729-5.
 - [27] FVV, *Instationäre Emissionsmodellierung, Instationäre Emissionsmodellierung am Dieselmotor*, Abschlussbericht, FVV, Hrsg., Frankfurt am Main: FVV, 2015.
 - [28] G. P. Merker, C. Schwarz und R. Teichmann, „Phänomenologische Verbrennungsmodelle,“ in *Grundlagen Verbrennungsmotoren, Funktionsweise, simulation, messtechnik*, Ser. ATZ/MTZ-Fachbuch, G. P. Merker, Hrsg., 6., ergänzte Auflage, Bd. 115, Heidelberg: Springer Vieweg, 2012, S. 453–478, ISBN: 978-3-8348-1393-0. DOI: 10.1007/978-3-8348-8306-3_10.
 - [29] H. Bockhorn, Hrsg., *Soot formation in combustion, Mechanisms and models*, eng, Bd. 59, Springer series in chemical physics, Berlin: Springer, 1994, 596 S., ISBN: 354058398X.
 - [30] H. Bockhorn, Hrsg., *Combustion generated fine carbonaceous particles, Proceedings of an international workshop held in Villa Orlandi, Anacapri, May 13 - 16, 2007*, eng, Bockhorn, Henning (Hrsg.), Karlsruhe: KIT Scientific Publishing, 2009, 720 S., ISBN: 978-3-86644-441-6.
 - [31] C. Bohn und H. Unbehauen, *Identifikation dynamischer Systeme*. Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden, 2016, ISBN: 978-3-8348-1755-6. DOI: 10.1007/978-3-8348-2197-3.
 - [32] O. Nelles, *Nonlinear system identification, From classical approaches to neural networks and fuzzy models*, eng, Ser. Engineering online library. Berlin: Springer, 2001, 785 S., Nelles, Oliver (VerfasserIn), ISBN: 3-540-67369-5. Adresse: <http://www.loc.gov/catdir/enhancements/fy0816/00064122-d.html>.
 - [33] R. Isermann, *Mechatronische Systeme*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2008, 629 S., ISBN: 978-3-540-32336-5. DOI: 10.1007/978-3-540-32512-3.
 - [34] G. P. Merker und R. Teichmann, Hrsg., *Grundlagen Verbrennungsmotoren, Funktionsweise, Simulation, Messtechnik*, ger, 7., vollst. überarb. Aufl., ATZ/MTZ-Fachbuch, Merker, Günter P. (Hrsg.) Teichmann, Rüdiger (Hrsg.), Wiesbaden: Springer Vieweg, 2014, 1132 S., ISBN: 978-3-658-03195-4.
 - [35] C. Jahn, C. Bosse und A. Schwientek. „Seeschifffahrt 2020, Aktuelle Trends und Entwicklungen,“ Fraunhofer-Center für Maritime Logistik und Dienstleistungen. (2011).

- [36] G. Meyer und E. Schiffner, *Technische Thermodynamik*, ger, 4. Aufl. Weinheim: VCH, 1989, 375 S., Meyer, Günter (Mitarb.) Schiffner, Erich (Mitarb.) Meyer, Günter (Mitarb.) Schiffner, Erich (Mitarb.), ISBN: 3527279652.
- [37] Günter P. Merker und Christian Schwarz, *Grundlagen Verbrennungsmotoren*, Ser. ATZ / MTZ-Fachbuch. Dordrecht: Springer, 2012, 812 S., ISBN: 978-3-8348-1987-1. Adresse: <http://gbv.ebib.com/patron/FullRecord.aspx?p=885662>.
- [38] H. Hiroyasu, M. Arai und K. Nakanishi, „Soot Formation and Oxidation in Diesel Engines,“ in *SAE Technical Paper Series*, Ser. SAE Technical Paper Series, Bd. Vol. 89, Section 1, SAE International 400 Commonwealth Drive, Warrendale, PA, United States, 1980, S. 1148–1162. DOI: 10.4271/800252.
- [39] H. Hiroyasu, T. Kadota und M. Arai, „Development and Use of a Spray Combustion Modeling to Predict Diesel Engine Efficiency and Pollutant Emissions, Part 1 Combustion Modeling,“ *Bulletin of the JSME*, Jg. 1983, Nr. Vol. 26, No 214, S. 569–575, 1983.
- [40] P. J. Coelho und M. G. Carvalho, „Modeling of soot formation and oxidation in turbulent diffusion flames,“ *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Jg. 9, Nr. 4, S. 644–652, 1995, ISSN: 0887-8722. DOI: 10.2514/3.719.
- [41] P. Kožuch, *Ein phänomenologisches Modell zur kombinierten Stickoxid- und Rußberechnung bei direkteinspritzenden Dieselmotoren*, 2004. DOI: 10.18419/OPUS-4031.
- [42] F. Tao, R. D. Reitz, D. E. Foster und Y. Liu, „Nine-step phenomenological diesel soot model validated over a wide range of engine conditions,“ *International Journal of Thermal Sciences*, Jg. 48, Nr. 6, S. 1223–1234, 2009, PII: S1290072908001956, ISSN: 12900729. DOI: 10.1016/j.ijthermalsci.2008.08.014.
- [43] F. e. a. Ravet, „Soot modeling with Particle Sectional Model (PSM) in Diesel engine, Results and discussion,“ in *THIESEL Conference 2016*. Adresse: https://www.researchgate.net/publication/318393397_Soot_modeling_with_Particle_Sectional_Model_PSM_in_Diesel_engine_Results_and_discussion.
- [44] M. Schaub, G. Finger, G. Milbradt, T. Riebe, M. Baldauf und M. Kirchhoff, „Numerische Modellierung von Emissionen und Brennstoffverbrauch beim Manövrieren von Schiffen,“ *Schiff & Hafen*, Nr. 09/2020, S. 12–17,
- [45] F. Dahms, „Charakterisierung und Modellierung des dynamischen Betriebs eines Schiffsdieselmotors hinsichtlich Kraftstoffverbrauch und Emissionen,“ Lehrstuhl für Technische Thermodynamik, Dissertation, Universität Rostock, Rostock, 2021, 163 S.
- [46] M. A. Patterson, S.-C. Kong, G. J. Hampson und R. D. Reitz, *Modeling the Effects of Fuel Injection Characteristics on Diesel Engine Soot and NO_x Emissions*, English, 1.03.1994. DOI: 10.4271/940523. Adresse: <https://www.sae.org/publications/technical-papers/content/940523/>.
- [47] Roland Soltysiak, „3. Empirische Modellbildung,“ de, *Wissensbasierte Prozeßregelung*, S. 55–70, 2020, ISSN: 97831107. Adresse: <https://www.degruyter.com/document/doi/10.1515/9783110705232-008/pdf>.
- [48] M. Ayoubi, „Fault Diagnosis with Dynamic Neural Structure and Application to a Turbocharger,“ in Bd. 27, PII: S1474667017480906, S. 597–602. DOI: 10.1016/S1474-6670(17)48090-6.

-
- [49] H. Sequenz und R. Isermann, „Emission Model Structures for an Implementation on Engine Control Units,“ *IFAC Proceedings Volumes*, Jg. 44, Nr. 1, S. 11 851–11 856, 2011, PII: S1474667016455205, ISSN: 14746670. DOI: 10.3182/20110828-6-IT-1002.03131.
 - [50] O. Nelles, „Local linear model trees for on-line identification of time-variant nonlinear dynamic systems,“ in *Artificial Neural Networks — ICANN 96*, Ser. Lecture Notes in Computer Science, G. Goos, J. Hartmanis, J. Leeuwen u. a., Hrsg., Bd. 1112, Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1996, S. 115–120, ISBN: 978-3-540-61510-1. DOI: 10.1007/3-540-61510-5_23.
 - [51] B. Schölkopf, K.-R. Müller und A. J. Smola, „Lernen mit Kernen,“ *Informatik - Forschung und Entwicklung*, Jg. 14, Nr. 3, S. 154–163, 1999, PII: C8E5T4RG266XV3X8, ISSN: 0178-3564. DOI: 10.1007/s004500050135.
 - [52] D. Schröder und M. Buss, *Intelligente Verfahren, Identifikation und Regelung nichtlinearer Systeme*, ger, 2., erweiterte Auflage. Berlin: Springer Vieweg, 2017, 918 S., Schröder, Dierk (VerfasserIn) Buss, Martin (VerfasserIn), ISBN: 978-3-662-55326-8. Adresse: <http://www.springer.com/>.
 - [53] H. Sequenz, K. Keller und R. Isermann, „Zur Identifikation mehrdimensionaler Kennfelder für Verbrennungsmotoren,“ *at - Automatisierungstechnik*, Jg. 60, Nr. 6, S. 344–351, 2012, ISSN: 0178-2312. DOI: 10.1524/auto.2012.1000.
 - [54] B. Bauer und M. Kohler, „On deep learning as a remedy for the curse of dimensionality in nonparametric regression,“ *The Annals of Statistics*, Jg. 47, Nr. 4, 2019, ISSN: 0090-5364. DOI: 10.1214/18-AOS1747.
 - [55] T. Masters, *Practical Neural Network Recipes in C++*, 1. Aufl. s.l.: Elsevier Reference Monographs, 2014, 493 S., ISBN: 0-12-479040-2. Adresse: <http://gbv.eblib.com/patron/FullRecord.aspx?p=1876682>.
 - [56] R. J. Kruse, C. Borgelt, F. Klawonn, C. Moewes, G. Ruß und M. Steinbrecher, Hrsg., *Computational Intelligence, Eine methodische Einführung in Künstliche Neuronale Netze, Evolutionäre Algorithmen, Fuzzy-Systeme und Bayes-Netze*, Studium, Wiesbaden: Vieweg + Teubner, 2012, ISBN: 978-3-8348-1275-9. DOI: 10.1007/978-3-8348-8299-8.
 - [57] A. Zell, *Simulation neuronaler Netze*, 1. Aufl. Bonn: Addison-Wesley, 1994, 624 S., ISBN: 3893195548.
 - [58] W. S. McCulloch und W. Pitts, „A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity,“ *The Bulletin of Mathematical Biophysics*, Jg. 5, Nr. 4, S. 115–133, 1943, PII: BF02478259, ISSN: 0007-4985. DOI: 10.1007/BF02478259.
 - [59] D. E. Rumelhart, G. E. Hinton und R. J. Williams, „Learning representations by back-propagating errors,“ *Nature*, Jg. 323, Nr. 6088, S. 533–536, 1986, PII: BF323533a0, ISSN: 0028-0836. DOI: 10.1038/323533a0.
 - [60] F.-L. Luo und R. Unbehauen, *Applied neural networks for signal processing*, eng. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1997, 367 S., ISBN: 0521563917.
 - [61] M. Ayoubi, *Nonlinear system identification based on neural networks with locally distributed dynamics and application to technical processes*, Als Ms. gedr, Ser. Fortschritt-Berichte VDI Reihe 8, Meß-, Steuerungs- und Regelungstechnik. Düsseldorf: VDI-Verl., 1996, Bd. 591, 158 S., Ayoubi, Mihir (VerfasserIn), ISBN: 978-3-18-359108-4.

- [62] Zhou Lu, Hongming Pu, Feicheng Wang, Zhiqiang Hu und Liwei Wang, „The Expressive Power of Neural Networks: A View from the Width,“ **presented at** Advances in Neural Information Processing Systems, 2017, S. 6231–6239. Adresse: <http://papers.nips.cc/paper/7203-the-expressive-power-of-neural-networks-a-view-from-the-width>.
- [63] R. Isermann, S. Ernst und O. Nelles, „Identification with Dynamic Neural Networks - Architectures, Comparisons, Applications,“ *IFAC Proceedings Volumes*, Jg. 30, Nr. 11, S. 947–972, 1997, PII: S1474667017429697, ISSN: 14746670. DOI: 10.1016/S1474-6670(17)42969-7.
- [64] R. Isermann, *Engine Modeling and Control*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2014, 646 S., ISBN: 978-3-642-39933-6. DOI: 10.1007/978-3-642-39934-3.
- [65] V. Gruhn, „Es gibt nicht die eine künstliche Intelligenz,“ *Computerwoche*, Jg. 2020, Nr. 14.03.2020, 2020. Adresse: <https://www.computerwoche.de/a/es-gibt-nicht-die-eine-kuenstliche-intelligenz,3545708#> (besucht am 21.05.2020).
- [66] B. Kolewe, *Interpretierbare datenbasierte Modellierung für die Anwendung in Motorsteuergeräten*, Dissertation. 2018, 158 S. Adresse: http://rosdok.uni-rostock.de/file/rosdok_disshab_0000001911/rosdok_derivate_0000044472/Dissertation_Kolewe_2018.pdf.
- [67] L. A. Zadeh, „Fuzzy sets,“ *Information and Control*, Jg. 8, Nr. 3, S. 338–353, 1965, PII: S00199586590241X, ISSN: 0019958. DOI: 10.1016/S0019-9958(65)90241-X.
- [68] L.-X. Wang und L.-X. Wang, *A Course in Fuzzy Systems and Control by Li-Xin Wang (z-lib.org) // A course in fuzzy systems and control*. Upper Saddle River: Prentice Hall und Prentice-Hall, 1997, 441 S., ISBN: 0-13-593005-7.
- [69] L. Schnitman, J. Felipe de Souza und T. Yoneyama, „Takagi-Sugeno-Kang Fuzzy Structures in Dynamic System Modeling,“ in Adresse: http://webx.ubi.pt/~felippe/paper/paper2001_banff.pdf (besucht am 12.04.2020).
- [70] H. Namgung und J.-S. Kim, „Vessel Trajectory Analysis in Designated Harbor Route Considering the Influence of External Forces,“ en, *Journal of Marine Science and Engineering*, Jg. 8, Nr. 11, S. 860, 2020, PII: jmse8110860. DOI: 10.3390/jmse8110860. Adresse: <https://www.mdpi.com/2077-1312/8/11/860>.
- [71] Y. Zhu, Y. Zuo und T. Li, „Modeling of Ship Fuel Consumption Based on Multisource and Heterogeneous Data: Case Study of Passenger Ship,“ *Journal of Marine Science and Engineering*, Jg. 9, Nr. 3, S. 273, 2021, PII: jmse9030273. DOI: 10.3390/jmse9030273.
- [72] V. Vapnik, *The nature of statistical learning theory*, eng, 2. ed., 6. print, Ser. Statistics for engineering and information science. New York: Springer, 2008, 314 S., ISBN: 0387987800. Adresse: <http://www.loc.gov/catdir/enhancements/fy0816/99039803-d.html>.
- [73] M. Heinert, „Support Vector Machines, Teil 1: Ein theoretischer Überblick,“ *zfv – Zeitschrift für Geodäsie, Geoinformation und Landmanagement*, Nr. 135, S. 179–189, 2010. Adresse: [zfv%20%E2%80%93%20Zeitschrift%20f%C3%BCr%20Geod%C3%A4sie,%20Geoinformation%20und%20Landmanagement](http://www.zfv-zeitschrift-fuer-geodasie.de/2010/135/179-189).

-
- [74] —, „Support Vector Machines, Teil 2: Praktische Beispiele und Anwendungen,“ *zfv – Zeitschrift für Geodäsie, Geoinformation und Landmanagement*, Nr. 135, 2010. Adresse: [zfv%20%E2%80%93%20Zeitschrift%20f%C3%BCr%20Geod%C3%A4sie,%20Geoinformation%20und%20Landmanagement](#).
 - [75] A. J. Smola und B. Schölkopf, „A tutorial on support vector regression,“ *Statistics and Computing*, Jg. 14, Nr. 3, S. 199–222, 2004, ISSN: 1573-1375. DOI: 10.1023/B:STCO.0000035301.49549.88.
 - [76] R. Isermann, *Modellgestützte Steuerung, Regelung und Diagnose von Verbrennungsmotoren*, ger. Berlin und Heidelberg: Springer, 2003, 435254 S., ISBN: 3-540-44286-3. DOI: 10.1007/978-3-642-55698-2. Adresse: <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-55698-2>.
 - [77] M. Hafner, M. Schüler, O. Nelles und R. Isermann, „Fast neural networks for diesel engine control design,“ *Control Engineering Practice*, Jg. 8, Nr. 11, S. 1211–1221, 2000, PII: S0967066100000575, ISSN: 09670661. DOI: 10.1016/S0967-0661(00)00057-5.
 - [78] D. Mandic, *Recurrent Neural Networks for Prediction, Learning Algorithms, Architectures and Stability*, eng, 1st ed., Ser. Wiley series in adaptive and learning systems for signal processing, communications, and control. Chichester: John Wiley Sons Ltd, 2001, 308 S., ISBN: 0-470-84535-X. DOI: 10.1002/047084535X. Adresse: <http://search.ebscohost.com/login.aspx?direct=true&scope=site&db=nlebk&db=nlabk&AN=78944>.
 - [79] JAAIL.de. „Machine / Deep Learning - Wie lernen künstliche neuronale Netze?“ (2018), Adresse: <https://jaail.de/machine-deep-learning-529/> (besucht am 14.01.2021).
 - [80] J. Brownlee, „What is the Difference Between a Parameter and a Hyperparameter?“ *Machine Learning Mastery*, 25. Juli 2017. Adresse: <https://machinelearningmastery.com/difference-between-a-parameter-and-a-hyperparameter/> (besucht am 14.01.2021).
 - [81] M. Li, T. Zhang, Y. Chen und A. J. Smola, „Efficient mini-batch training for stochastic optimization,“ in *Proceedings of the 20th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, August 24 - 27, 2014, New York, NY, USA, (New York New York USA)*, S. Macskassy, Hrsg., KDD u. a., New York, NY: ACM, 2014, S. 661–670, ISBN: 9781450329569. DOI: 10.1145/2623330.2623612.
 - [82] R. Battiti, „First- and Second-Order Methods for Learning: Between Steepest Descent and Newton’s Method,“ *Neural Computation*, Jg. 4, Nr. 2, S. 141–166, 1992, ISSN: 0899-7667. DOI: 10.1162/neco.1992.4.2.141.
 - [83] M. T. Hagan und M. B. Menhaj, „Training feedforward networks with the Marquardt algorithm,“ eng, *IEEE transactions on neural networks*, Jg. 5, Nr. 6, S. 989–993, 1994, Journal Article, ISSN: 1045-9227. DOI: 10.1109/72.329697. eprint: 18267874.
 - [84] S. Geman, E. Bienenstock und R. Doursat, „Neural Networks and the Bias/Variance Dilemma,“ *Neural Computation*, Jg. 4, Nr. 1, S. 1–58, 1992, ISSN: 0899-7667. DOI: 10.1162/neco.1992.4.1.1.
 - [85] A. C. Tsoi und A. D. Back, „Locally recurrent globally feedforward networks: a critical review of architectures,“ eng, *IEEE transactions on neural networks*, Jg. 5, Nr. 2, S. 229–239, 1994, Journal Article, ISSN: 1045-9227. DOI: 10.1109/72.279187. eprint: 18267793.

- [86] T. G. Barbounis, J. B. Theocharis, M. C. Alexiadis und P. S. Dokopoulos, „Long-Term Wind Speed and Power Forecasting Using Local Recurrent Neural Network Models,“ *IEEE Transactions on Energy Conversion*, Jg. 21, Nr. 1, S. 273–284, 2006, ISSN: 0885-8969. DOI: 10.1109/TEC.2005.847954.
- [87] D. V. Velmurugan, M. Grahn und T. McKelvey, „Diesel Engine Emission Model Transient Cycle Validation,“ *IFAC-PapersOnLine*, Jg. 49, Nr. 11, S. 1–7, 2016, PII: S2405896316313222, ISSN: 24058963. DOI: 10.1016/j.ifacol.2016.08.001.
- [88] ABB Automation Products GmbH, *VORTEX-VT, Wirbel-Durchflussmesser*, Betriebsanleitung, ABB Automation Products GmbH, Hrsg., 2000.
- [89] I.-F. Fiebak, *Messtechnik am Motorprüfstand 6L23/30*, M. Schaub, Mitarb., E-Mail, schriftlich, Rostock, 6. Mai 2020.
- [90] Heinzmann GmbH&Co.KG, *HEINZMANN Magnetventilsteuerung, DARDANOS I*, Regelsysteme für Elektronisch geregelte Einspritzsysteme, 2004.
- [91] KRAL AG, *KRAL Volumeter, Baureihe OMG*. Betriebsanleitung, KRAL AG, Hrsg., 2007.
- [92] Hottinger Baldwin Messtechnik GmbH, *T40FM, Drehmoment-Messflansch*, Hottinger Baldwin Messtechnik GmbH, Hrsg.
- [93] Bosch, Robert, „Bosch Technische Berichte,“ *Bosch Technische Berichte*, Jg. 1994, Nr. Heft 56, 1994.
- [94] R. Pischinger, *Thermodynamik der Verbrennungskraftmaschine*, Ser. Die Verbrennungskraftmaschine. Wien: Springer, 1989, Bd. N.F., 5, 524 S., ISBN: 3-341-00163-8.
- [95] ms4 ANALYSENTECHNIK, *Pegasor Mi3, Turnkey System für Partikelmasse und -anzahl*, ms4 ANALYSENTECHNIK, Hrsg. Adresse: <http://www.ms4.info/datenblaetter/pegasor-mi3.pdf> (besucht am 25.01.2021).
- [96] H. e. a. Beck, Hrsg., *Correlation between Pegasor Particle Sensor and Particle Number Counter Application of Pegasor Particle Sensor in Heavy Duty Exhaust*, **presented at** 16th ETH Conference on Combustion Generated Nanoparticles (ETH Zürich, Schweiz), ETH Zürich, Schweiz, Zürich, Schweiz, 2012.
- [97] pegasor, *Pegasor Mi3, Operating Instructions*, pegasor, Hrsg. Adresse: <https://pegasor.fi/products/mi3> (besucht am 20.01.2021).
- [98] R. Heusch-Lahl, „Seefahrt sicherer machen - mit Satelliten,“ in *Forschungsfonds Mecklenburg-Vorpommern*. Adresse: <https://www.regierung-mv.de/Landesregierung/bm/Wissenschaft/Forschung/F%C3%B6rderung-von-Forschungsvorhaben?id=9392&processor=veroeff> (besucht am 25.01.2021).
- [99] F. Dahms, M. Reska, J. Nocke, E. Hassel, M. Schaub und M. Reißig, „Characterizing of a Transient Engine Operating with Investigation on Particle Size Distribution on a Four-Stroke Medium-Speed Engine, Emission Reduction Technologies - What’s in Store for the Future,“ in *Proceedings CIMAC Congress 2019*, CIMAC Congress 2019, Hrsg., 2019.
- [100] A. Wygrabek, *Einführung in Python für die Data Science, Einführung in das Machine Learning*, Graduiertenakademie, Mitarb., online: Universität Rostock, 30. Nov. 2020.

-
- [101] J. Kuhlmann, „Ausgewählte Verfahren der Holdout- und Kreuzvalidierung,“ in *Methodik der empirischen Forschung*, S. Albers, Hrsg., 2., überarb. und erw. Aufl., Wiesbaden: Gabler, 2007, S. 407–416, ISBN: 978-3-8349-0469-0. DOI: 10.1007/978-3-8349-9121-8_27.
 - [102] Machine Learning Mastery. „How to Grid Search Deep Learning Models for Time Series Forecasting.“ (2018), Adresse: <https://machinelearningmastery.com/how-to-grid-search-deep-learning-models-for-time-series-forecasting/> (besucht am 04.02.2021).
 - [103] Z. Car, S. Baressi Šegota, N. Anđelić, I. Lorencin und V. Mrzljak, „Modeling the Spread of COVID-19 Infection Using a Multilayer Perceptron,“ eng, *Computational and mathematical methods in medicine*, Jg. 2020, S. 5714714, 2020, Journal Article The authors declare that they have no conflicts of interest—financial or otherwise. DOI: 10.1155/2020/5714714. eprint: 32565882.
 - [104] M. Gerstle, „Simulation des instationären Betriebsverhalten hochaufgeladener Vier und Zweitakt Dieselmotoren,“
 - [105] J. Bergstra und Y. Bengio, „Random Search for Hyper-Parameter Optimization,“ *Journal of Machine Learning Research*, Jg. 2012, Nr. 13 (2012) 281-305, 2012.
 - [106] I. I. Vibe, *Brennverlauf und Kreisprozess von Verbrennungsmotoren*. Verlag Technik, 1970.
 - [107] J. A. Nelder und R. Mead, „A Simplex Method for Function Minimization,“ *The Computer Journal*, Jg. 7, Nr. 4, S. 308–313, 1965, ISSN: 0010-4620. DOI: 10.1093/comjnl/7.4.308.
 - [108] W. Zucchini und O. Nenadi, *Zeitreihenanalyse, Teil II: Lineare Zeitreihenmodelle*, 2007. Adresse: https://www.google.com/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&source=web&cd=&ved=2ahUKEwiQ6NOaocTwAhUs_7sIHcmhAaAQFjAAegQIBBAD&url=https%3A%2F%2Fwww.uni-goettingen.de%2Fde%2Fdocument%2Fdownload%2Fbced8d2cf092e3487839c365955c85f2.pdf%2FZRSkript_Teil2_Okt09.pdf&usg=AOvVaw0qNtJ-ZoCv589B2ENrG7te (besucht am 20.10.2019).
 - [109] J. D. Cook. „Time series analysis vs DSP terminology.“ (2017), Adresse: <https://www.johndcook.com/blog/2017/10/20/time-series-analysis-vs-dsp-terminology-ma-arma-fir-iir/> (besucht am 25.02.2020).
 - [110] K. Patan, „Local stability conditions for discrete-time cascade locally recurrent neural networks,“ *International Journal of Applied Mathematics and Computer Science*, Jg. 20, Nr. 1, S. 23–34, 2010, ISSN: 1641-876X. DOI: 10.2478/v10006-010-0002-x.
 - [111] N. Kourentzes, D. K. Barrow und S. F. Crone, „Neural network ensemble operators for time series forecasting,“ *Expert Systems with Applications*, Jg. 41, Nr. 9, S. 4235–4244, 2014, PII: S0957417413009834, ISSN: 09574174. DOI: 10.1016/j.eswa.2013.12.011.
 - [112] P. S. G. de Mattos Neto, P. R. A. Firmino, H. Siqueira u. a., „Neural-Based Ensembles for Particulate Matter Forecasting,“ *IEEE Access*, Jg. 9, S. 14 470–14 490, 2021. DOI: 10.1109/ACCESS.2021.3050437.

- [113] F. Biancofiore, M. Busilacchio, M. Verdecchia u. a., „Recursive neural network model for analysis and forecast of PM10 and PM2.5,“ *Atmospheric Pollution Research*, Jg. 8, Nr. 4, S. 652–659, 2017, PII: S1309104216304056, ISSN: 13091042. DOI: 10.1016/j.apr.2016.12.014.
- [114] F. Chollet und K. Lorenzen, *Deep Learning mit Python und Keras, Das Praxis-Handbuch ; vom Entwickler der Keras-Bibliothek = Deep learning with Python*, 1. Auflage, Ser. Safari Tech Books Online. Frechen und Ipswich, Massachusetts: mitp und EBSCO Industries, 2018, 443 S., ISBN: 9783958458406. Adresse: <http://proquest.safaribooksonline.com/9783958458406>.
- [115] P. T. Martins und V. Lobo, „Estimating Maneuvering and Seakeeping Characteristics with Neural Networks,“ in *OCEANS 2007 - Europe*, 2007, S. 1–5. DOI: 10.1109/OCEANSE.2007.4302465.
- [116] G. Woschni und F. Anisits, „EINE METHODE ZUR VORAUSBERECHNUNG DER ANDERUNG DES BRENNVERLAUFS MITTELSCHNELLLAUFENDER DIESELMOTOREN BEI . . .,“ *MTZ*, Jg. 1973, Nr. 34, S. 106–115, 1973.
- [117] F. Di Natale und C. Carotenuto, „Particulate matter in marine diesel engines exhausts: Emissions and control strategies,“ *Transportation Research Part D: Transport and Environment*, Jg. 40, S. 166–191, 2015, PII: S1361920915001169, ISSN: 13619209. DOI: 10.1016/j.trd.2015.08.011.
- [118] H. Pucher und K. Zinner, *Aufladung von Verbrennungsmotoren, Grundlagen, Berechnungen, Ausführungen*, ger, 4. Auflage. Berlin und Heidelberg: Springer Vieweg, 2012, 371 S., Pucher, Helmut (VerfasserIn) Zinner, Karl (VerfasserIn), ISBN: 978-3-642-28990-3. DOI: 10.1007/978-3-642-28990-3. Adresse: <http://site.ebrary.com/lib/alltitles/docDetail.action?docID=10604617>.
- [119] K. Mollenhauer, Hrsg., *Handbuch Dieselmotoren*, ger, VDI-Buch, Berlin: Springer, 1997, 1029 S., ISBN: 3540625143.
- [120] S. Prehn, „Erstellung eines neuen, MATLAB-basierten Programms zur Druckverlaufsanalyse unter Berücksichtigung der aus den Forschungsprojekten am LKV erwachsenden speziellen Aufgabenstellungen und Anforderunge,“ Lehrstuhl für Kolbenmaschinen und Verbrennungsmotoren, Universität Rostock, Rostock, 2010, 118 S.

A Auswahl von Termen der Energiebilanz

Tabelle A.1: Übersicht über mögliche Berechnungsverfahren für einzelne Komponenten der Energiebilanz

Term der Energiebilanz	mögliche Berechnungsansätze
spezifische innere Energie u	<ul style="list-style-type: none"> • nach Zacharias [37] • nach Justi [37] • mit Komponentenmodell [118]
Ersatzbrennverlauf $\frac{dH_R}{d\varphi}$ bzw. $\frac{\delta Q_B}{d\varphi}$	<ul style="list-style-type: none"> • Einfache Vibe-Funktion [106] • Doppel-Vibe-Funktion [23] • Polygon-Hyperbel-Funktion [23] • Künstliche Neuronale Netze [23]
Wärmeübergangskoeffizient α	<ul style="list-style-type: none"> • nach Woschni [28] • nach Hohenberg [28] • nach Eichelberg [119] • nach Nusselt [119]
Gastemperatur T	<ul style="list-style-type: none"> • nach Zacharias [120] • nach Dethloff [120] • für ideales Gas [120]

B Prüfstandmotoren

Tabelle B.1: Übersicht über die Motorprüfstände

Motoren: Parameter:	MAN B&W 6L23/30	Caterpillar MaK 6M20
Typ	Mittelschnelllaufender 4-Takt Schiffsdieselmotor	Mittelschnelllaufender 4-Takt Schiffsdieselmotor
Baujahr	2000	1991
Bohrung	225 mm	200 mm
Hub	300 mm	300 mm
Kraftstoff	Dieselmotorkraftstoff, schwefelfrei, DIN EN 590	Dieselmotorkraftstoff, schwefelfrei, DIN EN 590
Nennleistung	960 kW	1020 kW
Nenndrehzahl	900 rpm	1000 rpm
Verdichtungsverhältnis	12,5:1	14,8:1
effektiver Mitteldruck	17,9 bar	21,7
Einspritzsystem	konventionelle Pumpe- Leitung-Düse Einspritzung	Common Rail Einspritzung
Belastung	Wasserwirbelbremse (hy- draulische Leistungsbremse, Typ: 9N38/12F)	Generator



Abbildung B.1: Motorprüfstand MAN B&W 6L23/30 mit Wasserwirbelbremse

C Synthetisch generierte Datensätze

C.1 Bewertung des Modells für den Stationäranteil

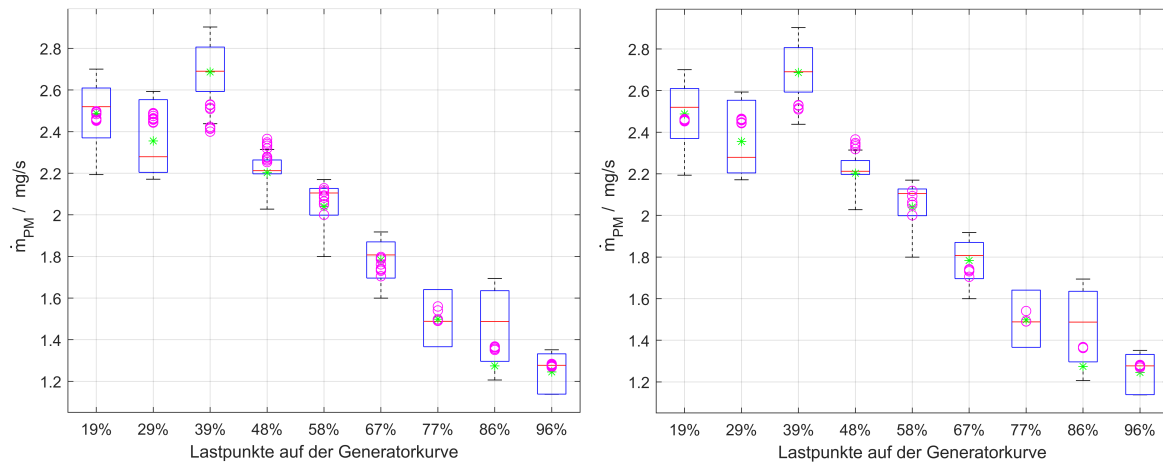


Abbildung C.1: Box Plots von Partikelemissionen entlang der Generatorkurve: MLP-Netz (a) mit $h = 6$ links, MLP-Netz (b) mit $h = 7$ rechts; grün: gemessene Mittelwerte, magenta: Simulation

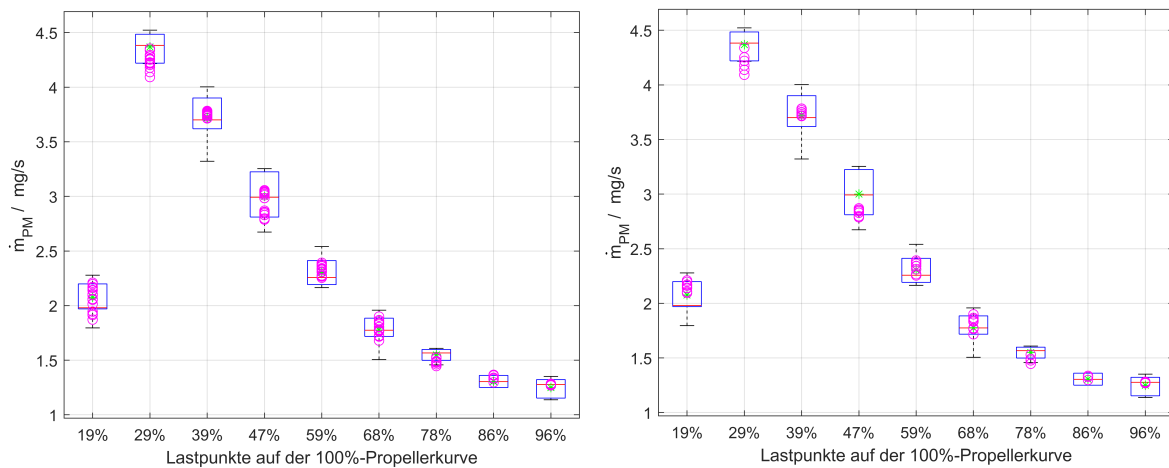


Abbildung C.2: Box Plots von Partikelemissionen entlang der 100%-Propellerkurve: MLP-Netz (a) mit $h = 6$ links, MLP-Netz (b) mit $h = 7$ rechts; grün: gemessene Mittelwerte, magenta: Simulation

C.2 Vergleich des Modells zur synthetischen Datenerzeugung mit Messdaten

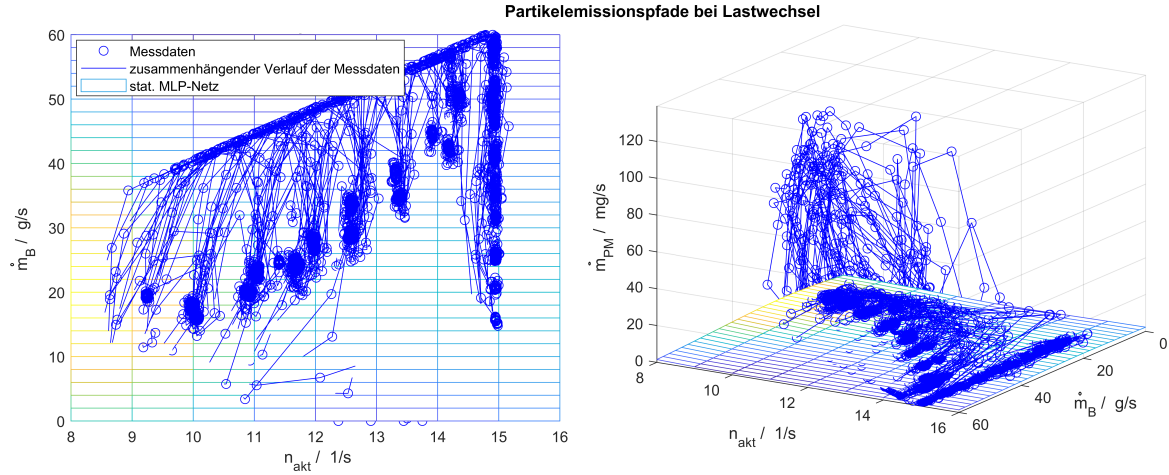


Abbildung C.3: Verläufe aller gemessenen Lastwechsel abhängig von Motordrehzahl und Verbrauch: Die Draufsicht auf das Kennfeld (links) zeigt die stationären Betriebspunkte auf Propeller- bzw. Generatorkurven. Die Häufung von Datenpunkten am oberen Bildrand macht die Begrenzung der Brennstoffeinspritzung in Abhängigkeit von der Drehzahl sichtbar. Zwischen Propeller- und Generatorkurven sind die Partikelverläufe kaum sichtbar, da sie sich unterhalb des MLP-Netzes für Stationärbetrieb befinden. Dabei handelt es sich um Lastreduktionen mit geringerem Partikelaustrag als für den Stationärbetrieb erwartet würde (rechts).

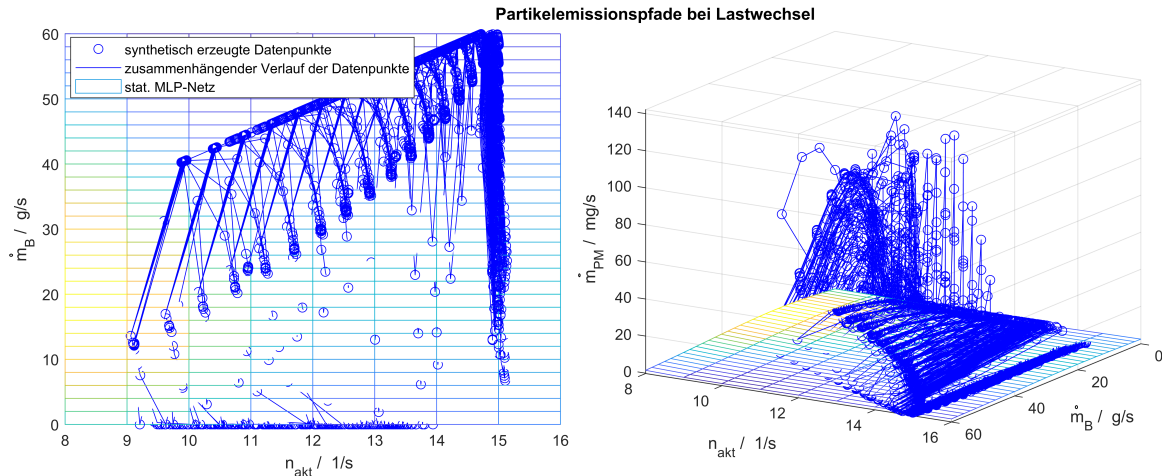


Abbildung C.4: Verläufe aller mit Modell M0 synthetisch erzeugten Lastwechsel abh. von Motordrehzahl und Verbrauch: Draufsicht auf Kennfeld (links) und Seiten- bzw. Untenansicht.

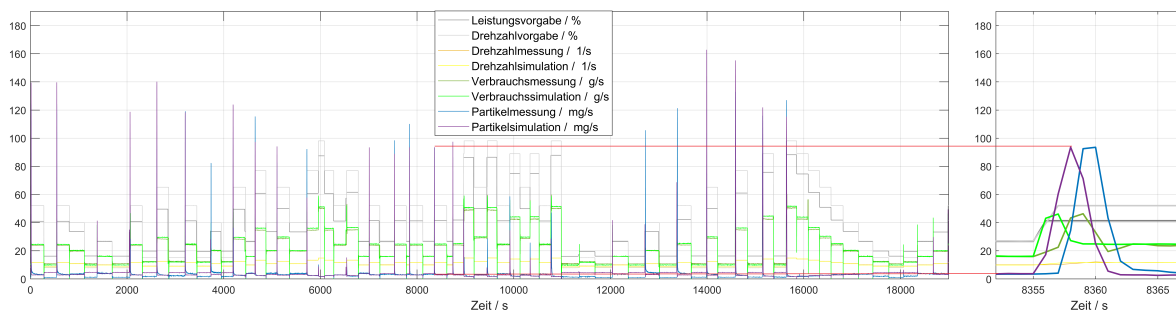


Abbildung C.5: Vergleich des Modells zur synthetischen Datenerzeugung mit Messdaten vom Testdatensatz: Darstellung aller Lastwechsel von 85%-Propellerkurve mit hinterlegtem (vereinfachten) Motormodell und hybridem Partikelmodell.

Zoombild: Lastsprung von 30% -> 40% auf der 85%-Propellerkurve (vgl. Abb. 3.5)

C.3 Vier Trainings- und Validierungsdatensätze

Trainings- und Validierungsdatensätze erzeugt mit Modell 0 als Grundlage für die Untersuchungen der Modell M1, M2 und M3 aus Kapitel 5:

- Datensatz 1 (DS1) mit einem Lastwechsel (Abb. C.6),
- Datensatz 2 (DS2) mit 144 Lastwechsel (Abb. C.7),
- Datensatz 3 (DS3) mit 544 Lastwechsel (Abb. C.8),
- Datensatz 4 (DS4) mit 12960 Lastwechsel (Abb. C.9).

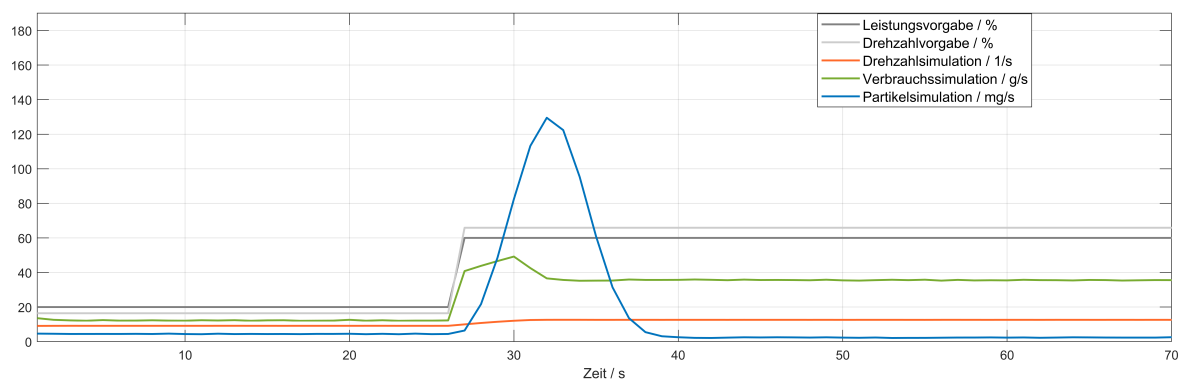


Abbildung C.6: DS 1 mit einem Lastwechsel auf der 100%-Propellerkurve

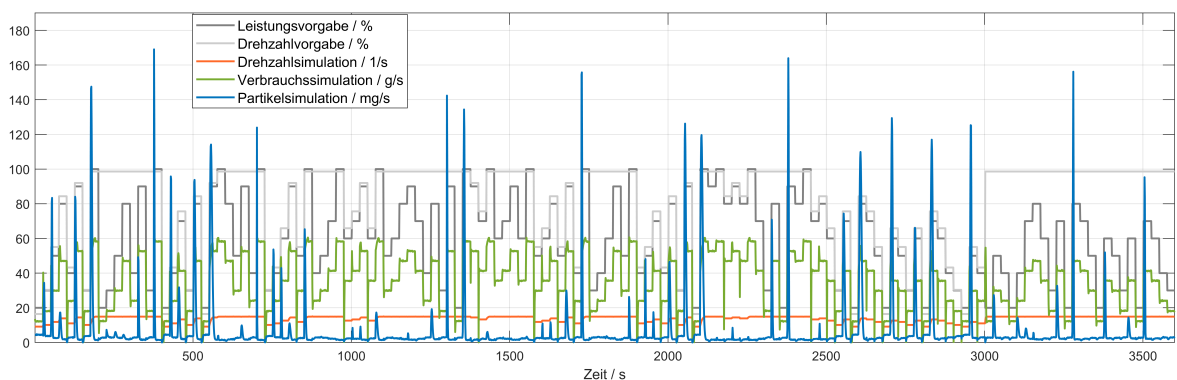


Abbildung C.7: DS 2 mit 144 Lastwechseln auf der 100%-Propellerkurve und Generatorkurve

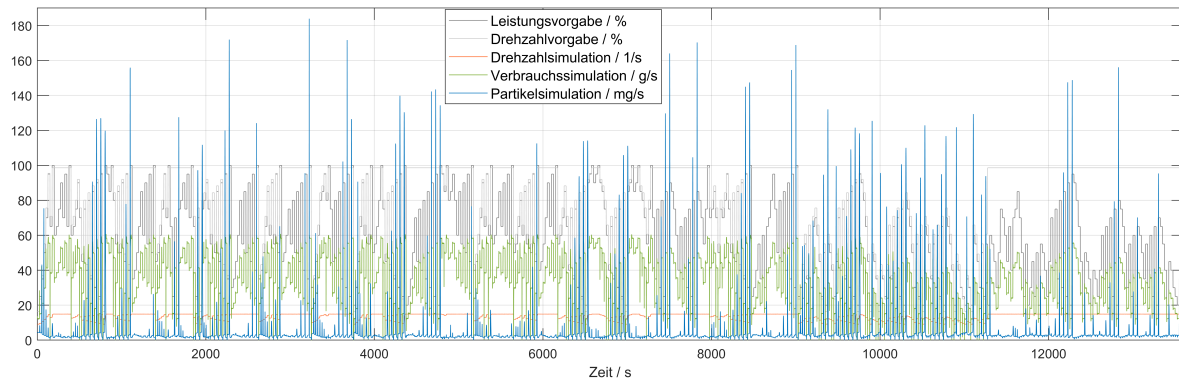


Abbildung C.8: DS 3 mit 544 Lastwechseln auf der 100%-Propellerkurve und Generatorkurve

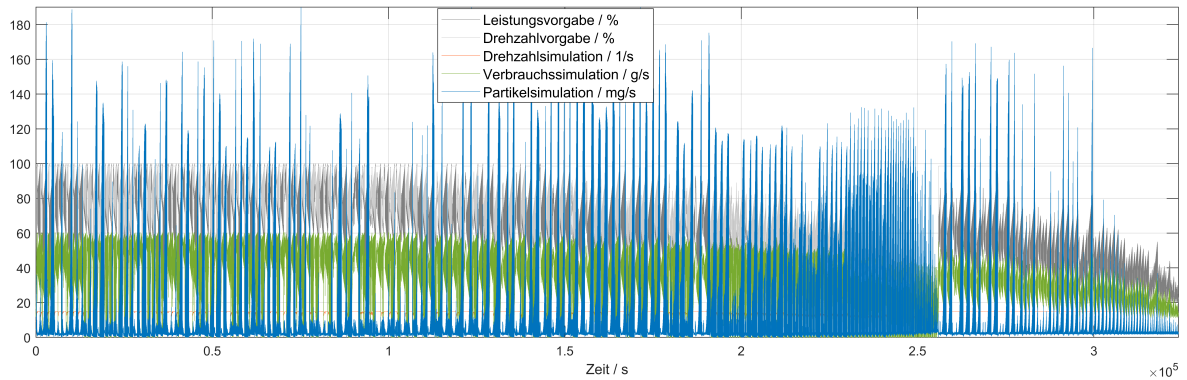


Abbildung C.9: DS 4 mit 12960 Lastwechseln auf der 100%-Propellerkurve und Generatorkurve

C.4 Testdatensatz

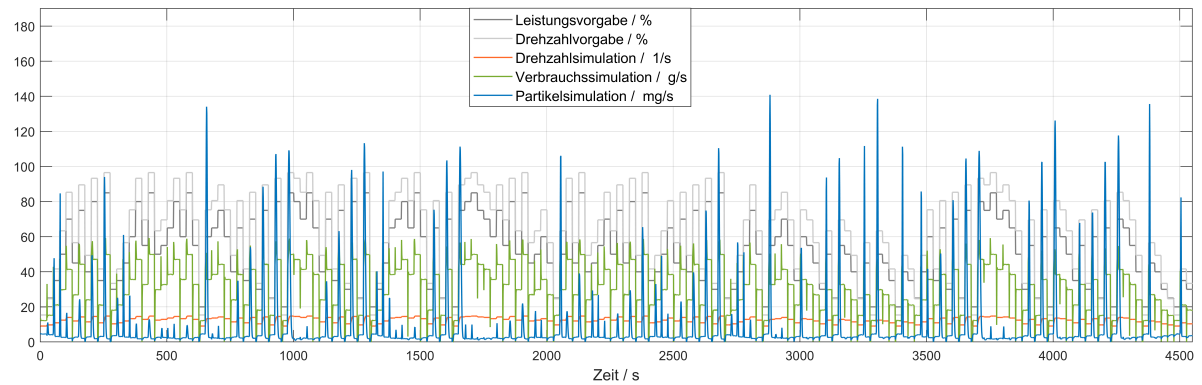


Abbildung C.10: Mit Modell M0 synthetisch generierter Testdatensatz mit 181 Lastwechseln auf der 85%-Propellerkurve

D Darstellung von Ergebnissen

D.1 Abbildungen zum 1. Datensatz mit einem Lastwechsel

Vergleich Simulationsergebnisse der Modelle M1_1LW, M2_1LW und M3_1LW mit Trainings- bzw. Validierungsdatensatz von Modell M0.

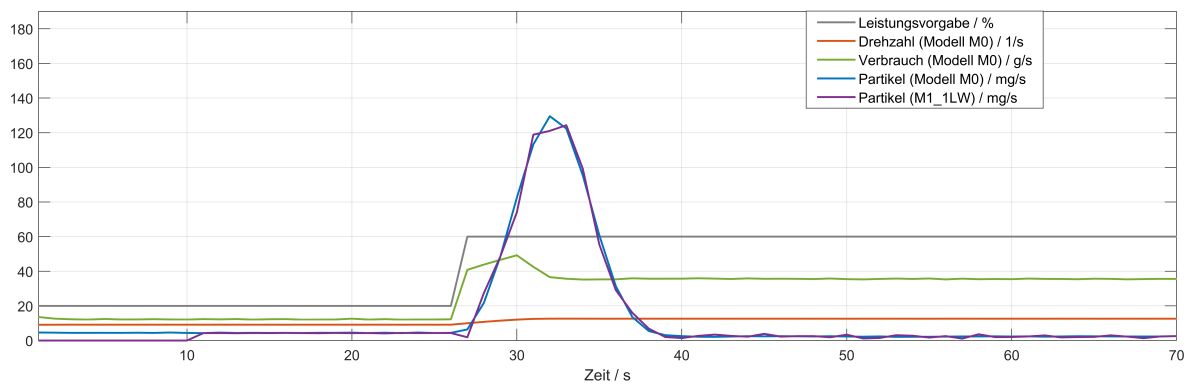


Abbildung D.1: $m_{PM,tot}$ synth. Daten von Modell M0: 927 mg; $m_{PM,tot}$ M1_1LW: 918 mg

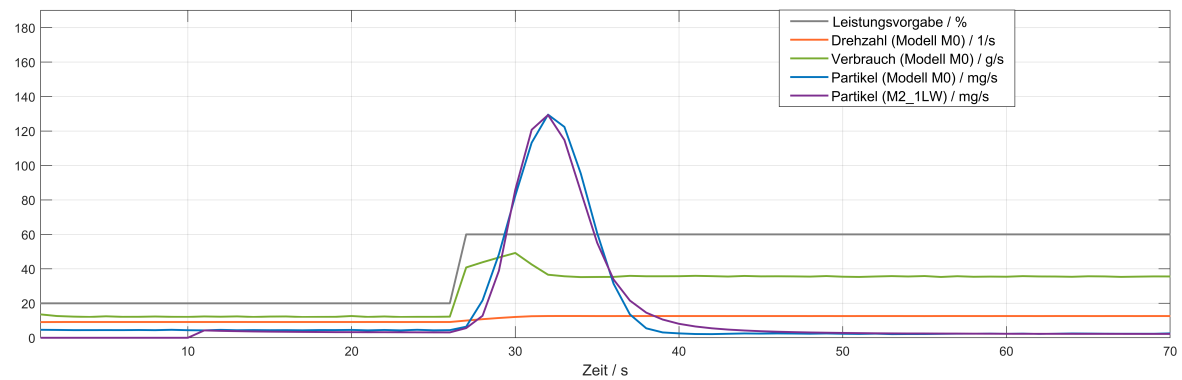


Abbildung D.2: $m_{PM,tot}$ synth. Daten von Modell M0: 927 mg; $m_{PM,tot}$ M2_1LW: 934 mg

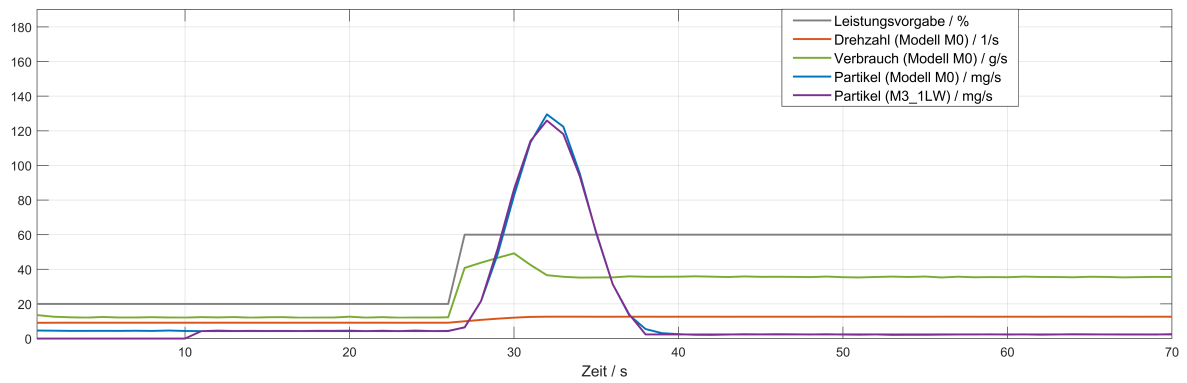


Abbildung D.3: $m_{PM,tot}$ synth. Daten von Modell M0: 927 mg; $m_{PM,tot}$ M3_1LW: 906 mg

D.2 Abbildungen zur Simulation der Testdaten mit Modellen vom 1. Datensatz

Vergleich Simulationsergebnisse der Modelle M1_1LW, M2_1LW und M3_1LW mit Testdatensatz von Modell M0.

Zoombild: Lastsprung von 30% -> 40% auf der 85%-Propellerkurve (vgl. Abb. 3.5)

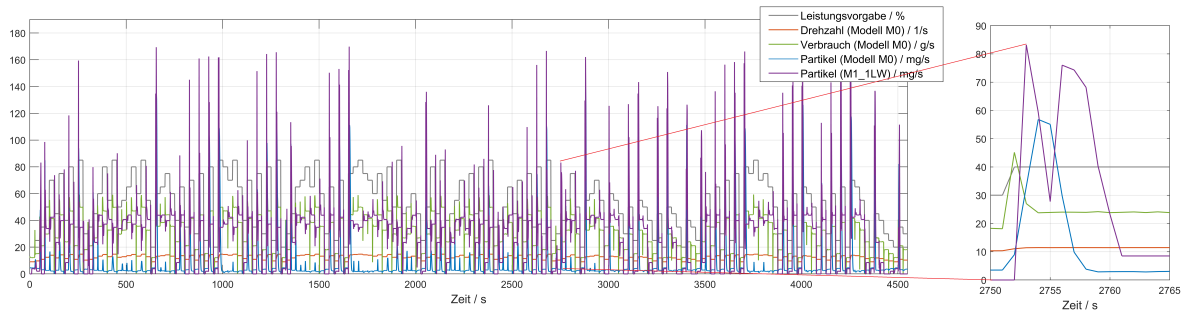


Abbildung D.4: $m_{PM,tot}$ synth. Daten von Modell M0: 35493 mg; $m_{PM,tot}$ M1_1LW: 130050 mg

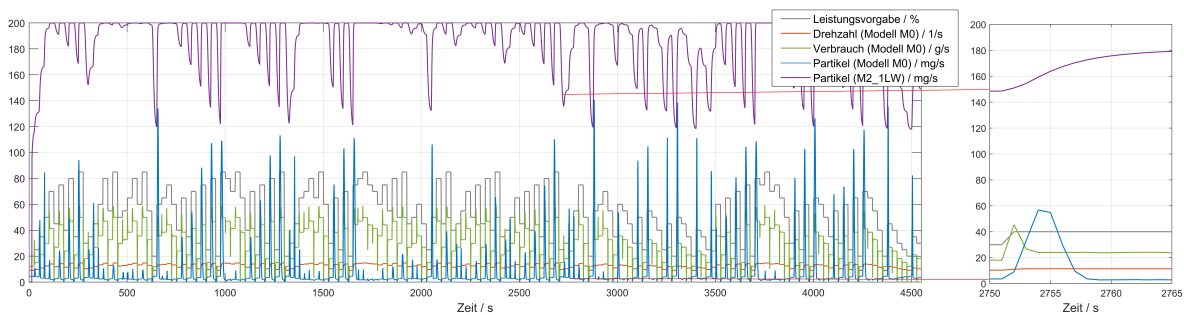


Abbildung D.5: $m_{PM,tot}$ synth. Daten von Modell M0: 35493 mg; $m_{PM,tot}$ M2_1LW: 842471 mg

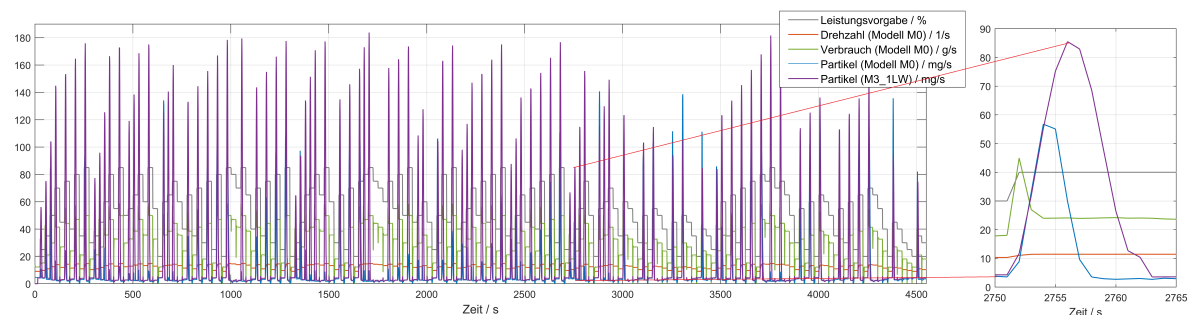


Abbildung D.6: $m_{PM,tot}$ synth. Daten von Modell M0: 35493 mg; $m_{PM,tot}$ M3_1LW: 83270 mg

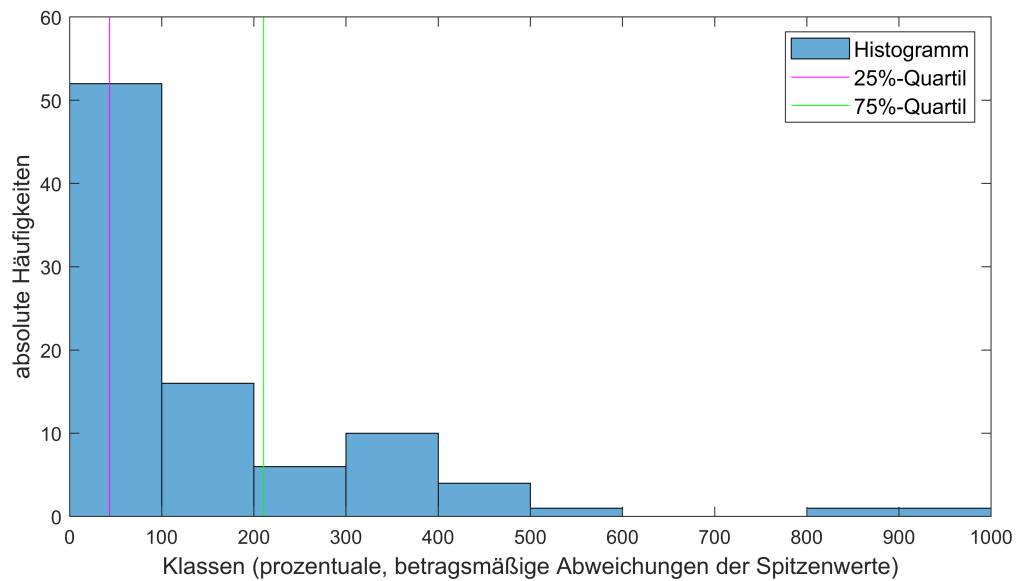


Abbildung D.7: Histogramm der prozentualen, betragsmäßigen Abweichungen der Spitzenwerte bei der Nachsimulation des Testdatensatzes mit M1_1LW

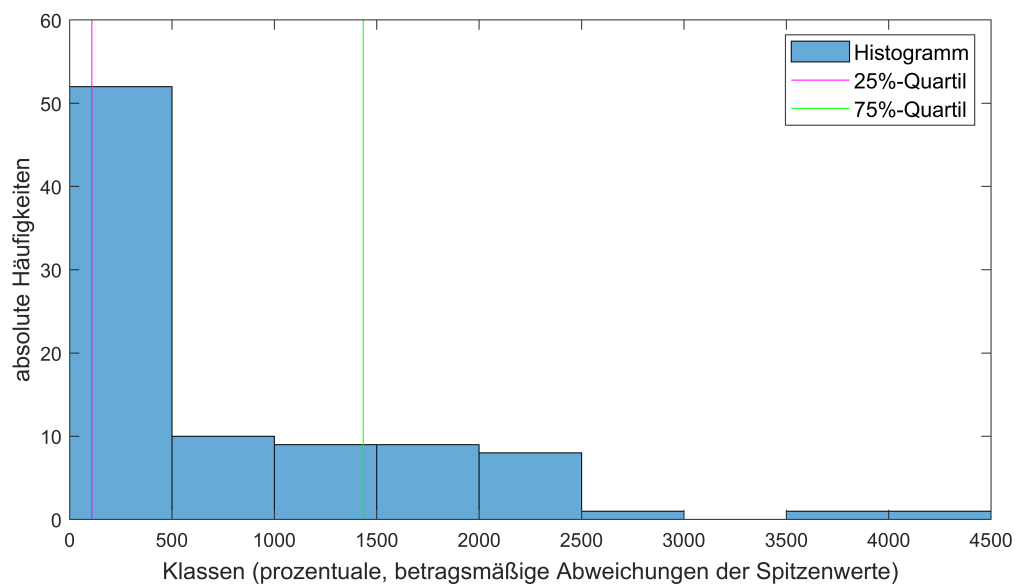


Abbildung D.8: Histogramm der prozentualen, betragsmäßigen Abweichungen der Spitzenwerte bei der Nachsimulation des Testdatensatzes mit M2_1LW

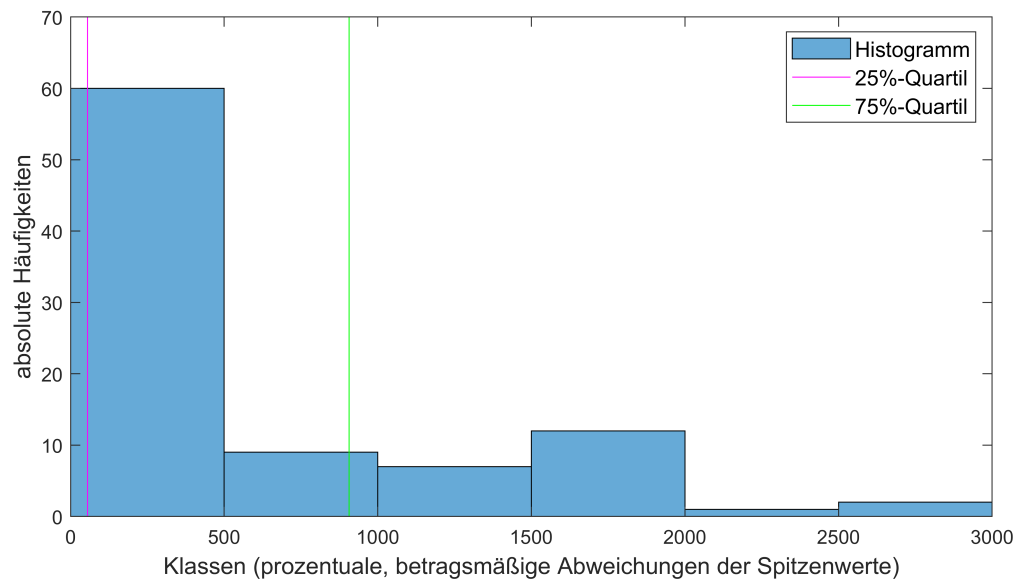


Abbildung D.9: Histogramm der prozentualen, betragsmäßigen Abweichungen der Spitzenwerte bei der Nachsimulation des Testdatensatzes mit M3_1LW

D.3 Abbildungen zum 2. Datensatz mit 144 Lastwechsel

Vergleich Simulationsergebnisse der Modelle M1_144LW, M2_144LW und M3_144LW mit Trainings- bzw. Validierungsdatensatz von Modell M0.

Zoombild: Lastsprung von 40% -> 60% auf der 100%-Propellerkurve (vgl. Abb. 3.5)

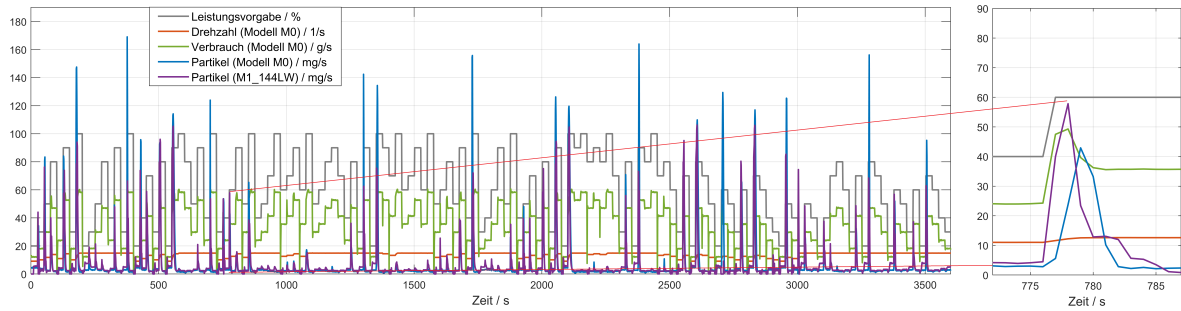


Abbildung D.10: $m_{PM,tot}$ synth. Daten von Modell M0: 21919 mg; $m_{PM,tot}$ M1_144LW: 22966 mg

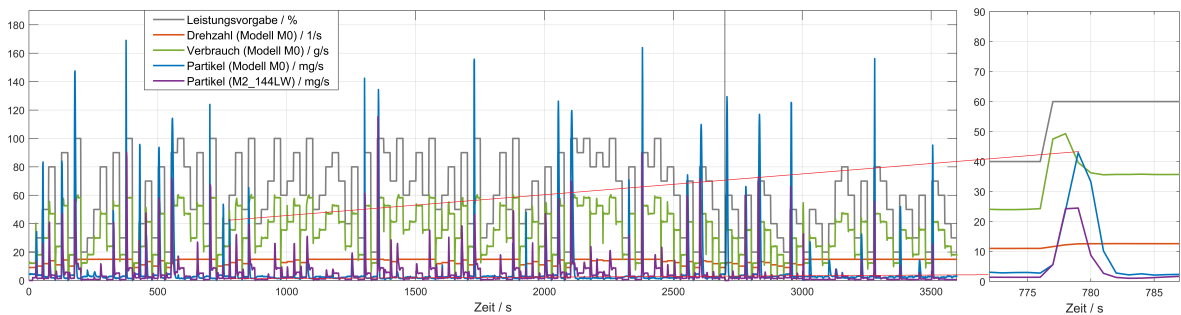


Abbildung D.11: $m_{PM,tot}$ synth. Daten von Modell M0: 21919 mg; $m_{PM,tot}$ M2_144LW: 16526 mg

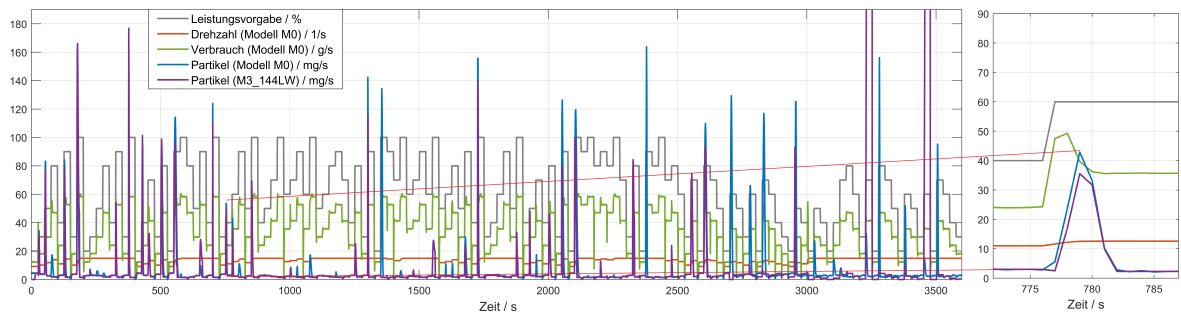


Abbildung D.12: $m_{PM,tot}$ synth. Daten von Modell M0: 21919 mg; $m_{PM,tot}$ M3_144LW: 54196 mg

D.4 Abbildungen zur Simulation der Testdaten mit Modellen vom 2. Datensatz

Vergleich Simulationsergebnisse der Modelle M1_144LW, M2_144LW und M3_144LW mit Testdatensatz.

Zoombild: Lastsprung von 30% -> 40% auf der 85%-Propellerkurve (vgl. Abb. 3.5)

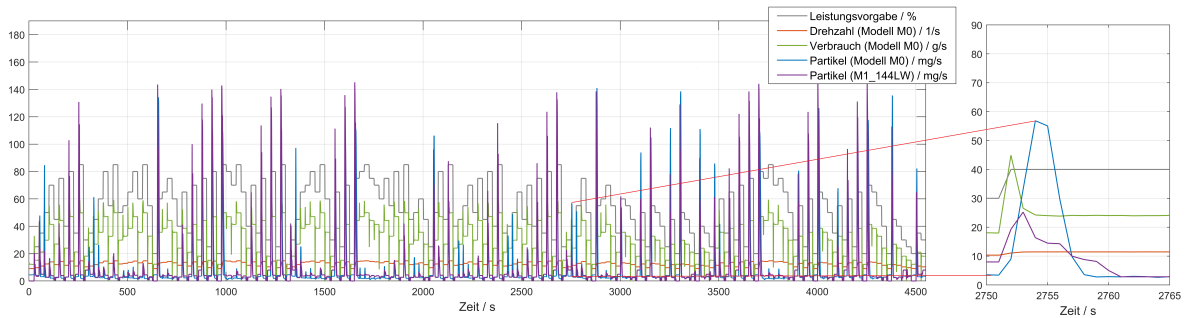


Abbildung D.13: $m_{PM,tot}$ synth. Daten von Modell M0: 35493 mg; $m_{PM,tot}$ M1_144LW: 38194 mg

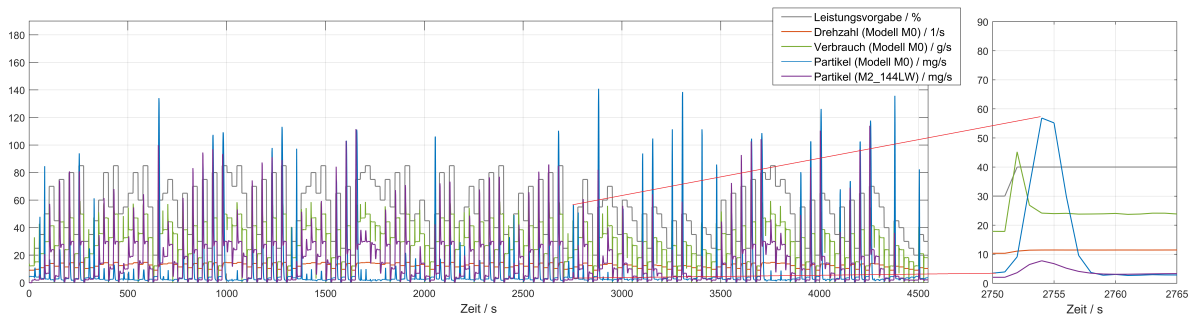


Abbildung D.14: $m_{PM,tot}$ synth. Daten von Modell M0: 35493 mg; $m_{PM,tot}$ M2_144LW: 65938 mg

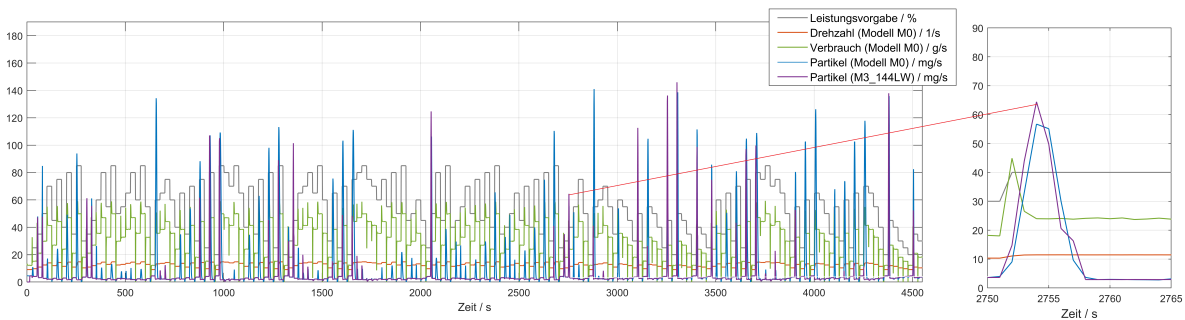


Abbildung D.15: $m_{PM,tot}$ synth. Daten von Modell M0: 35493 mg; $m_{PM,tot}$ M3_144LW: 19020 mg

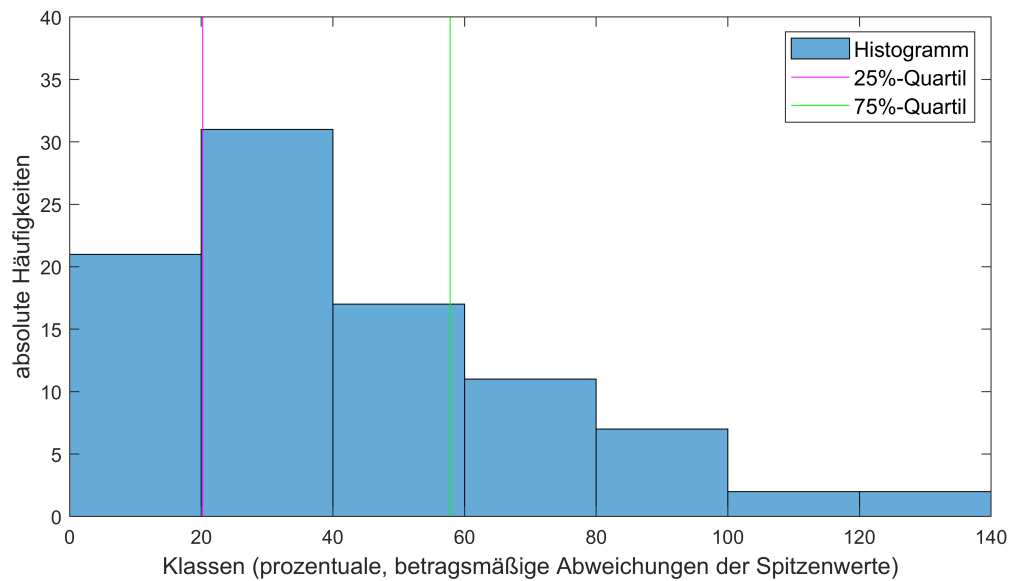


Abbildung D.16: Histogramm der prozentualen, betragsmäßigen Abweichungen der Spitzenwerte bei der Nachsimulation des Testdatensatzes mit M1_144LW

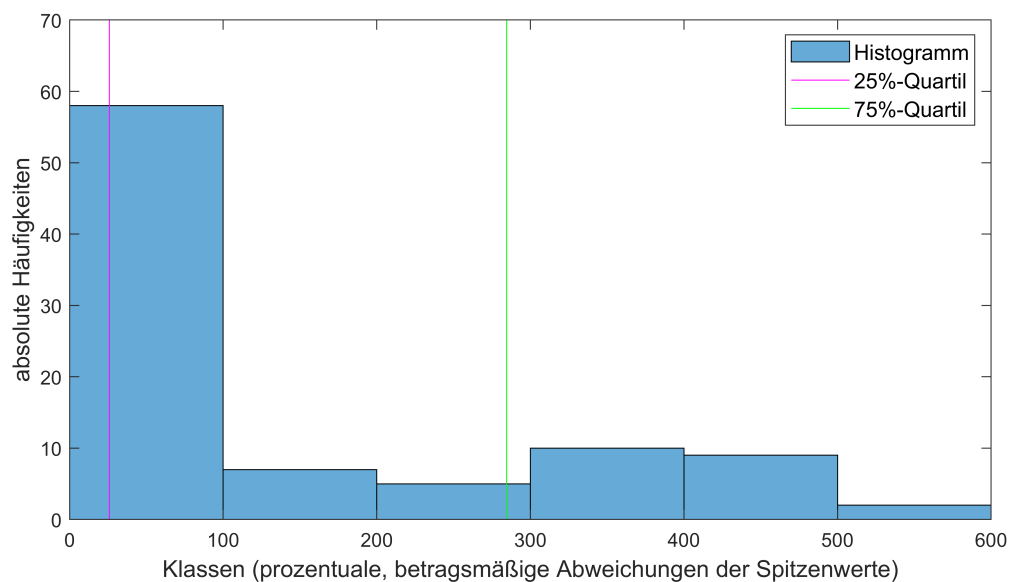


Abbildung D.17: Histogramm der prozentualen, betragsmäßigen Abweichungen der Spitzenwerte bei der Nachsimulation des Testdatensatzes mit M2_144LW

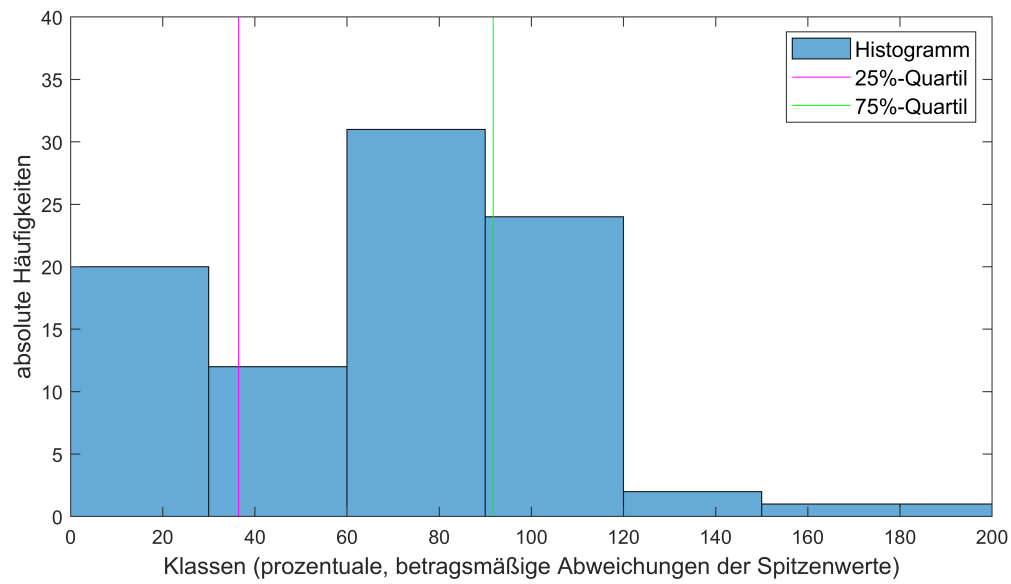


Abbildung D.18: Histogramm der prozentualen, betragsmäßigen Abweichungen der Spitzenwerte bei der Nachsimulation des Testdatensatzes mit M3_144LW

D.5 Abbildungen zum 3. Datensatz mit 544 Lastwechsel

Vergleich Simulationsergebnisse der Modelle M1_544LW, M2_544LW und M3_544LW mit Trainings- bzw. Validierungsdatensatz von Modell M0.

Zoombild: Lastsprung von 40% -> 60% auf der 100%-Propellerkurve (vgl. Abb. 3.5)

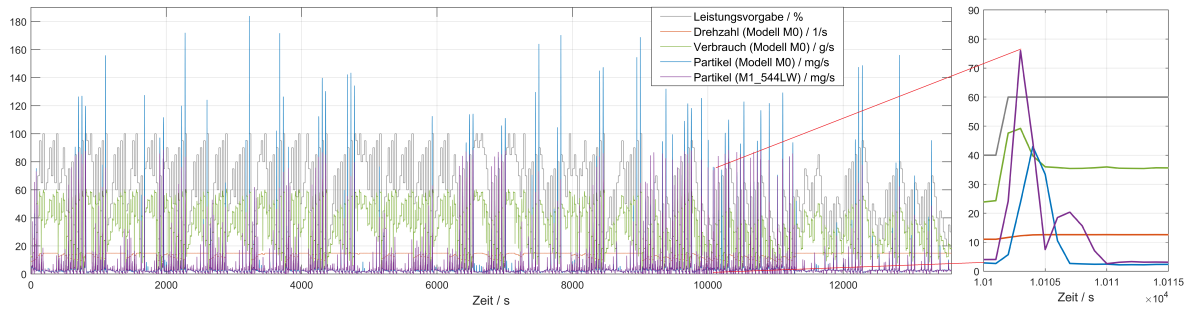


Abbildung D.19: $m_{PM,tot}$ synth. Daten (Modell M0): 76742 mg; $m_{PM,tot}$ M1_544LW: 69919 mg

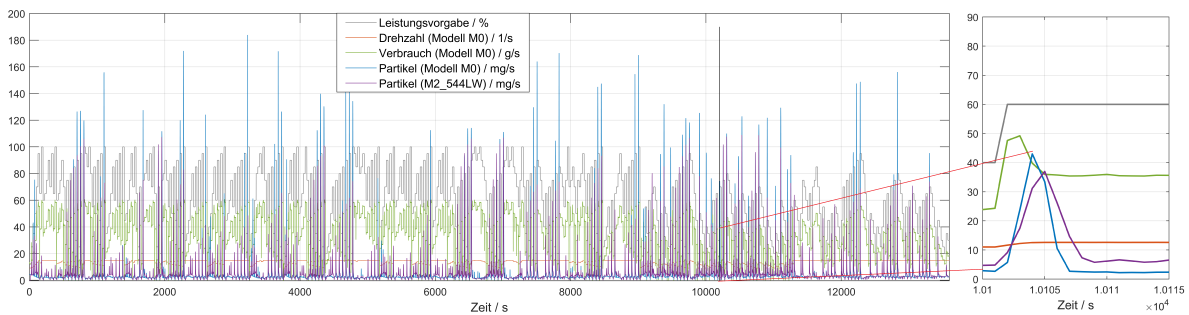


Abbildung D.20: $m_{PM,tot}$ synth. Daten von Modell M0: 76742 mg; $m_{PM,tot}$ M2_544LW: 84956 mg

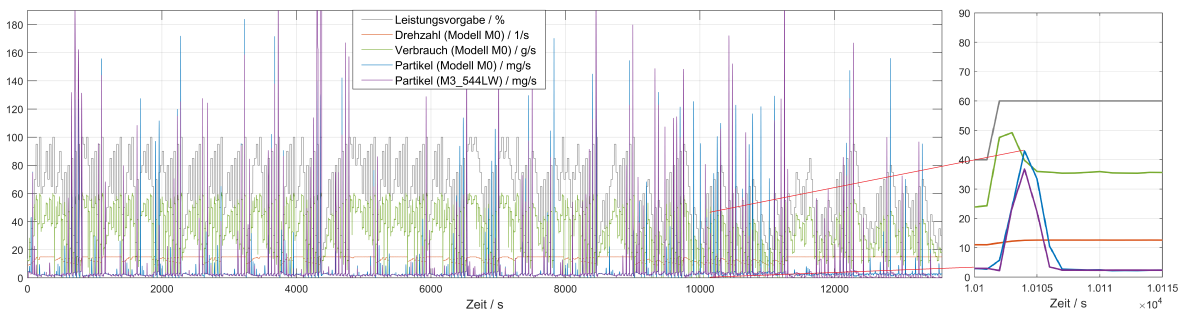


Abbildung D.21: $m_{PM,tot}$ synth. Daten von Modell M0: 76742 mg; $m_{PM,tot}$ M3_544LW: 103645 mg

D.6 Abbildungen zur Simulation der Testdaten mit Modellen vom 3. Datensatz

Vergleich Simulationsergebnisse der Modelle M1_544LW, M2_544LW und M3_544LW mit Testdatensatz von Modell M0.

Zoombild: Lastsprung von 30% -> 40% auf der 85%-Propellerkurve (vgl. Abb. 3.5)

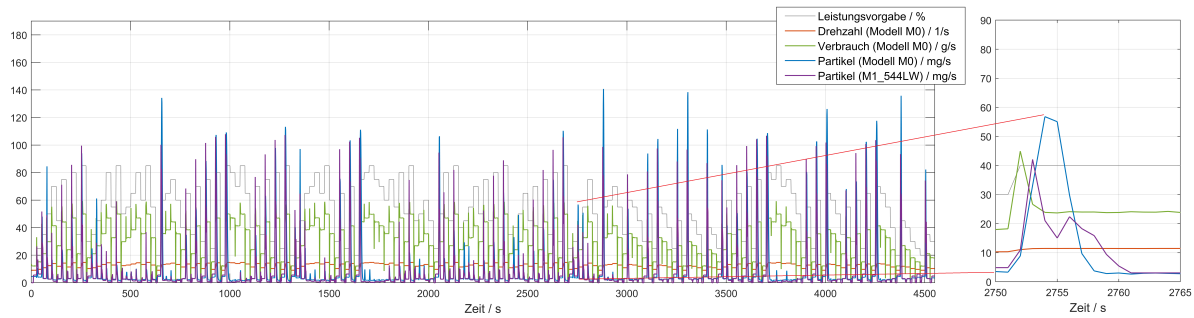


Abbildung D.22: $m_{PM,tot}$ synth. Daten (Modell M0): 35493 mg; $m_{PM,tot}$ M1_544LW: 29315 mg

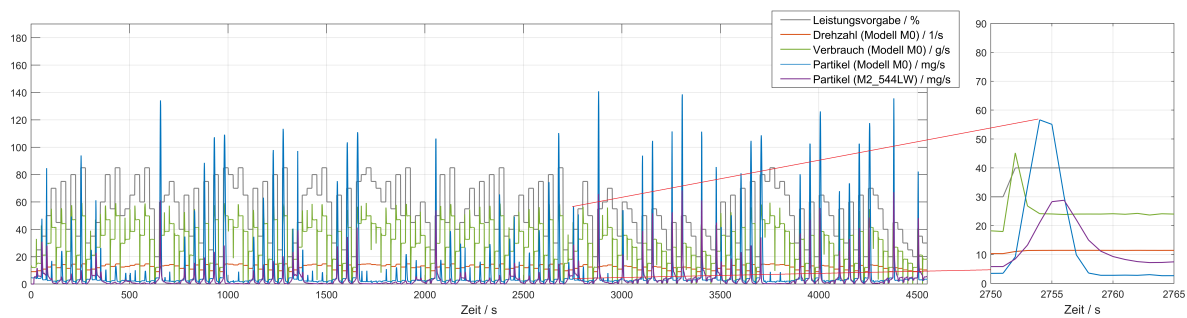


Abbildung D.23: $m_{PM,tot}$ synth. Daten von (Modell M0: 35493 mg; $m_{PM,tot}$ M2_544LW: 15825 mg

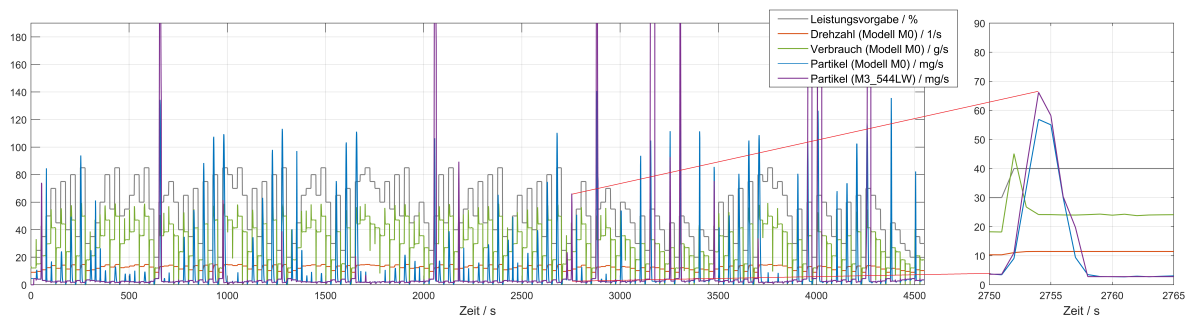


Abbildung D.24: $m_{PM,tot}$ synth. Daten von Modell M0: 35493 mg; $m_{PM,tot}$ M3_544LW: 2657288 mg

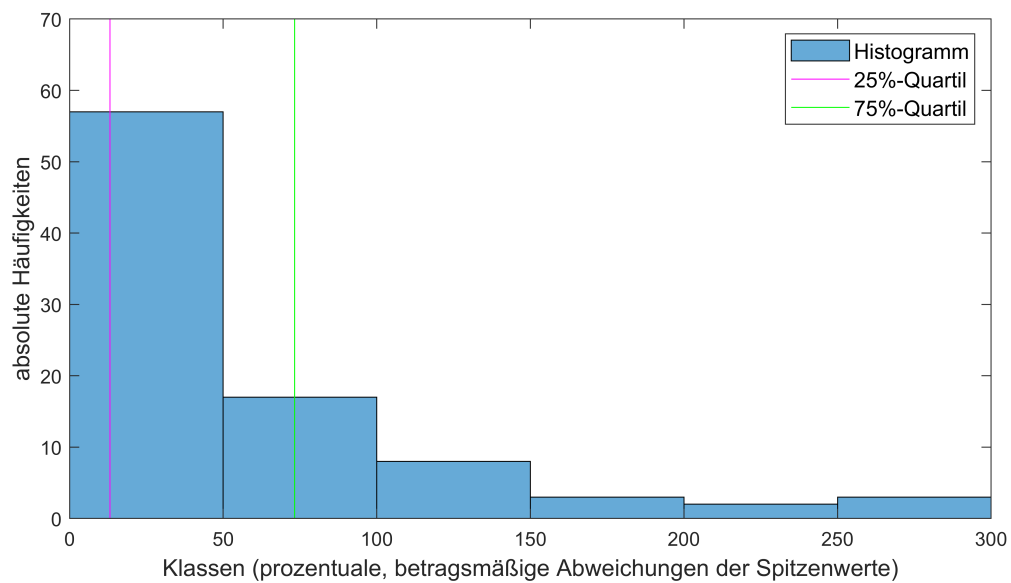


Abbildung D.25: Histogramm der prozentualen, betragsmäßigen Abweichungen der Spitzenwerte bei der Nachsimulation des Testdatensatzes mit M1_544LW

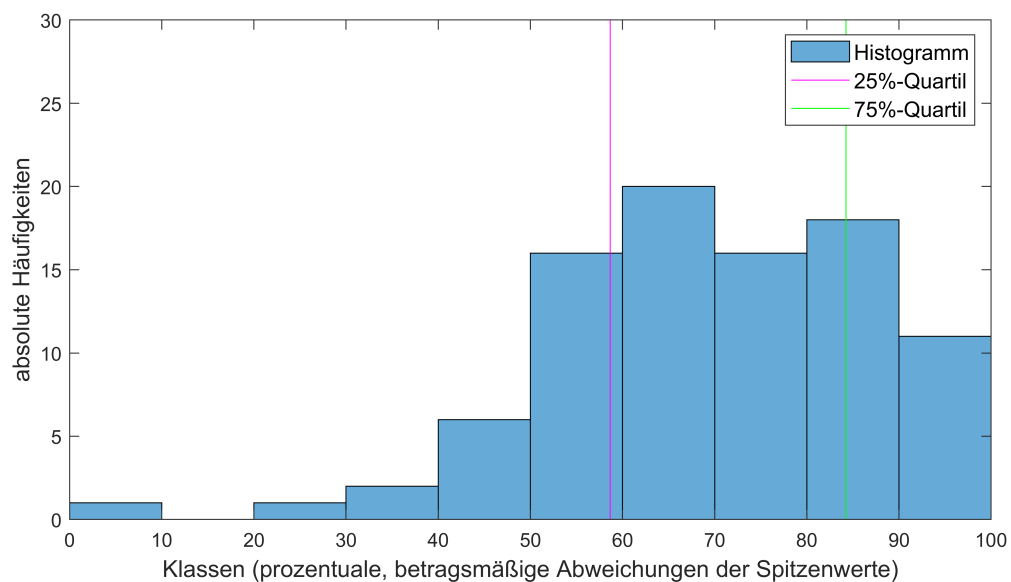


Abbildung D.26: Histogramm der prozentualen, betragsmäßigen Abweichungen der Spitzenwerte bei der Nachsimulation des Testdatensatzes mit M2_544LW

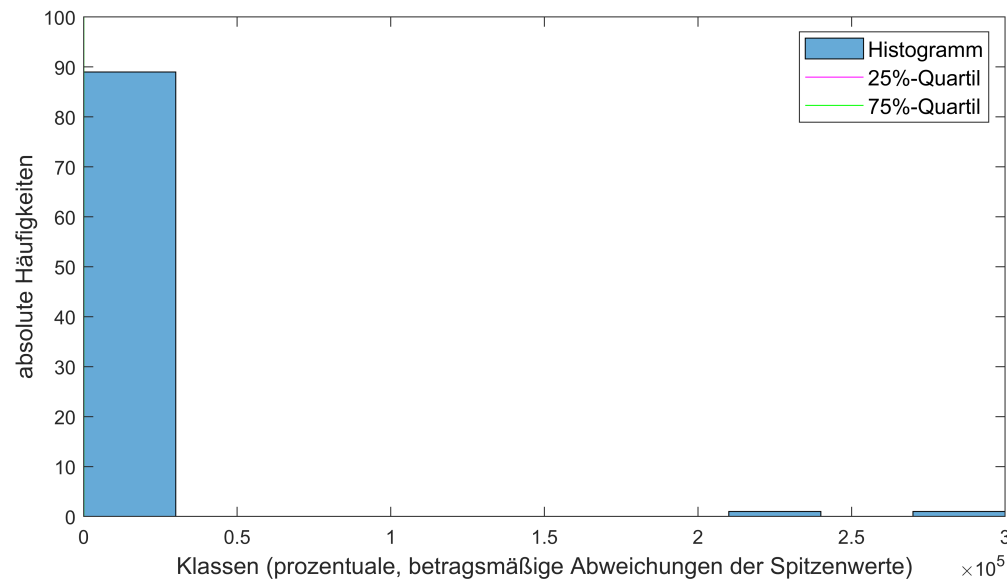


Abbildung D.27: Histogramm der prozentualen, betragsmäßigen Abweichungen der Spitzenwerte bei der Nachsimulation des Testdatensatzes mit M3_544LW

D.7 Abbildungen zum 4. Datensatz mit 12960 Lastwechsel

Vergleich Simulationsergebnisse der Modelle M1_12960LW, M2_12960LW und M3_12960LW mit Trainings- bzw. Validierungsdatensatz von Modell M0.

Zoombild: Lastsprung von 40% -> 60% auf der 100%-Propellerkurve (vgl. Abb. 3.5)

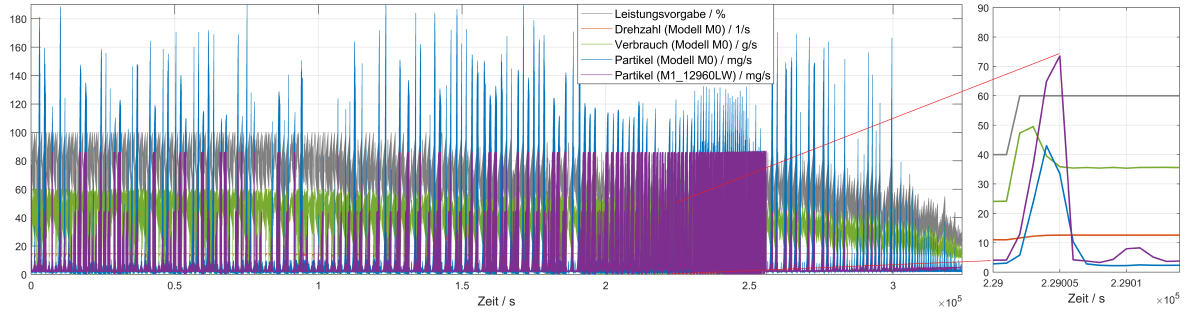


Abbildung D.28: $m_{PM,tot}$ synth. Daten von Modell M0: 1694527 mg; $m_{PM,tot}$ M1_12960LW: 1655434 mg

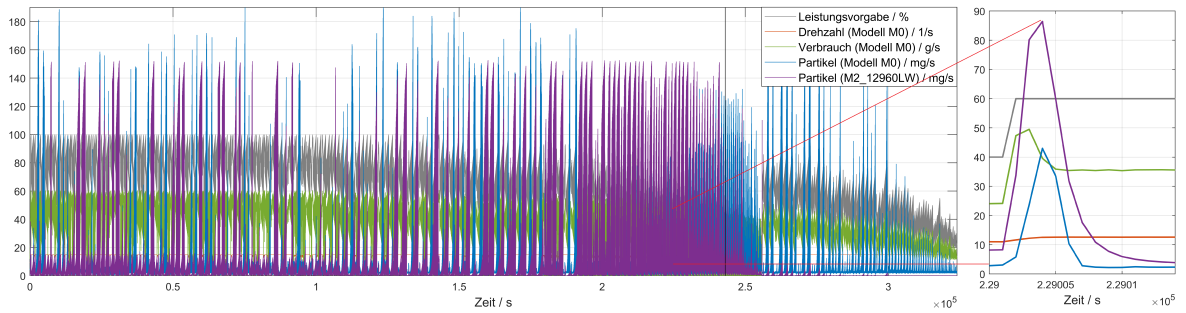


Abbildung D.29: $m_{PM,tot}$ synth. Daten von Modell M0: 1694527 mg; $m_{PM,tot}$ M2_12960LW: 1767144 mg

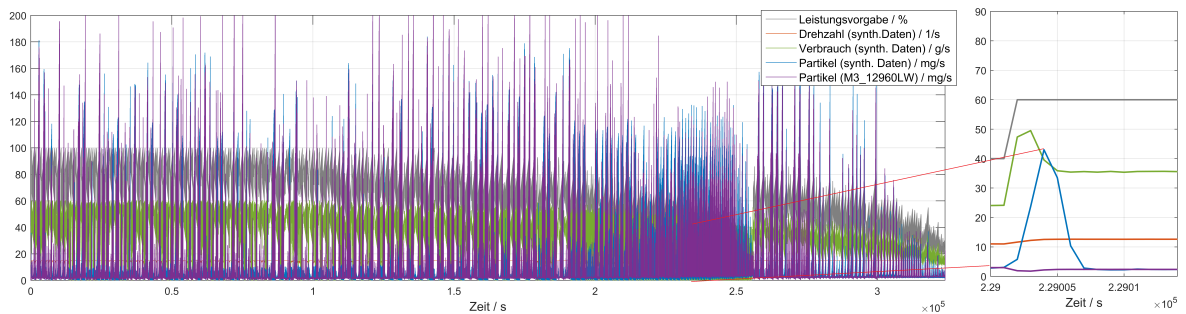


Abbildung D.30: $m_{PM,tot}$ synth. Daten von Modell M0: 1694527 mg; $m_{PM,tot}$ M3_12960LW: 2197477 mg

D.8 Abbildungen zur Simulation der Testdaten mit Modellen vom 4. Datensatz

Vergleich Simulationsergebnisse der Modelle M1_12960LW, M2_12960LW und M3_12960LW mit Testdatensatz von Modell M0.

Zoombild: Lastsprung von 30% -> 40% auf der 85%-Propellerkurve (vgl. Abb. 3.5)

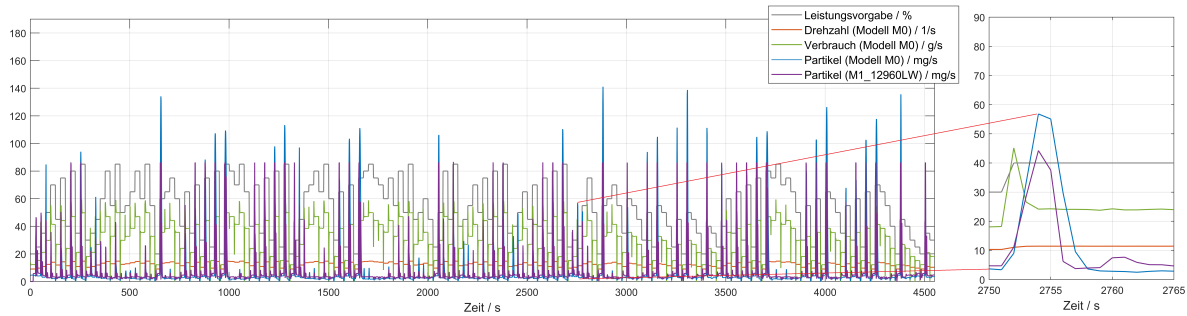


Abbildung D.31: $m_{PM,tot}$ synth. Daten von Modell M0: 35493 mg; $m_{PM,tot}$ M1_12960LW: 34433 mg

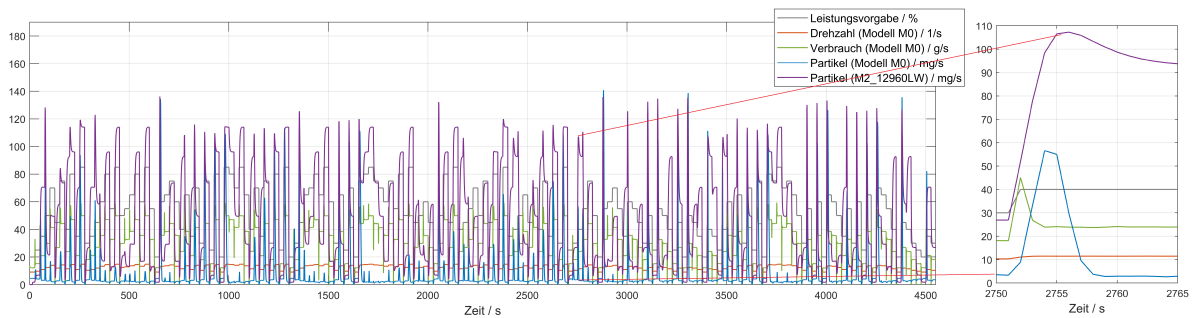


Abbildung D.32: $m_{PM,tot}$ synth. Daten von Modell M0: 35493 mg; $m_{PM,tot}$ M2_12960LW: 216315 mg

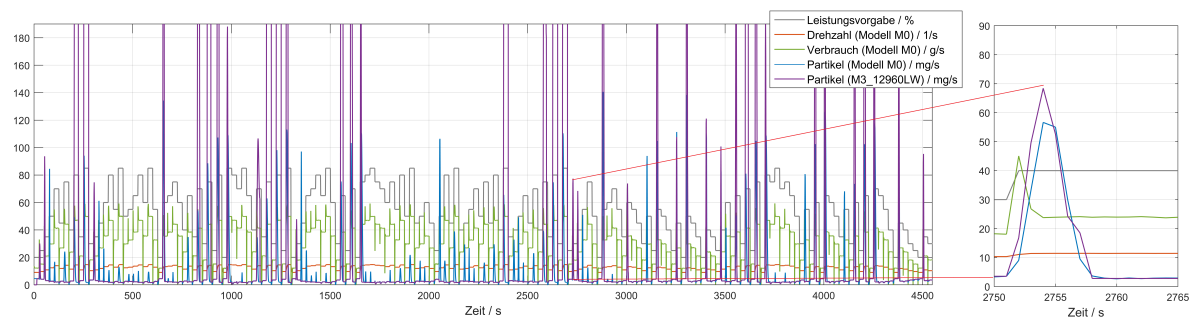


Abbildung D.33: $m_{PM,tot}$ synth. Daten von Modell M0: 35493 mg; $m_{PM,tot}$ M3_12960LW: 37499535 mg

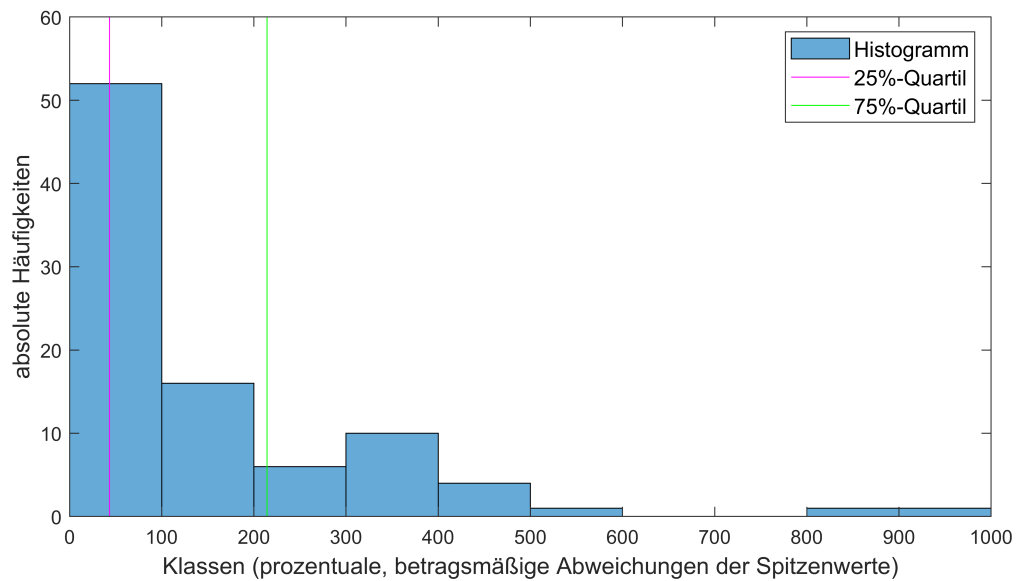


Abbildung D.34: Histogramm der prozentualen, betragsmäßigen Abweichungen der Spitzenwerte bei der Nachsimulation des Testdatensatzes mit M1_12960LW

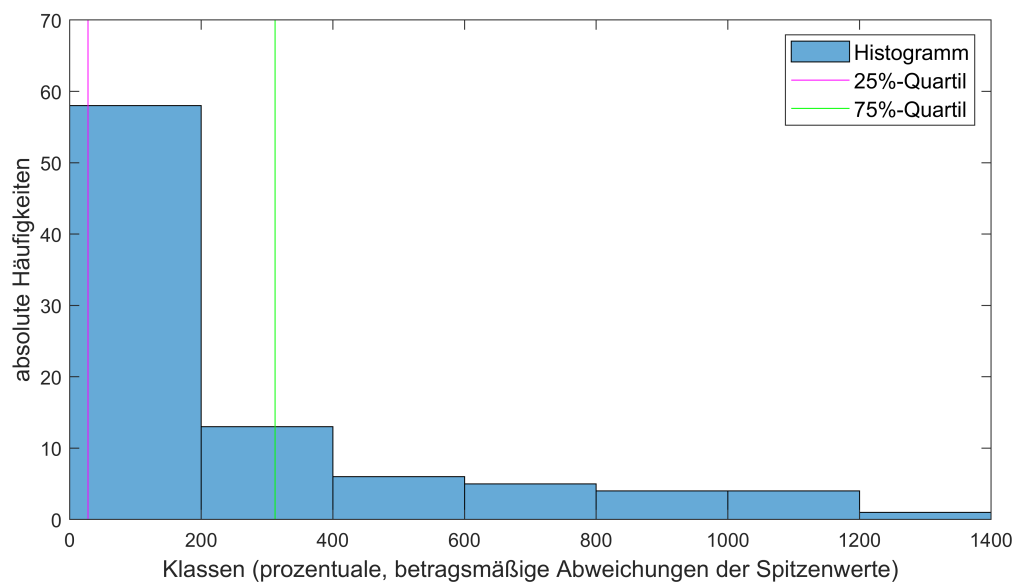


Abbildung D.35: Histogramm der prozentualen, betragsmäßigen Abweichungen der Spitzenwerte bei der Nachsimulation des Testdatensatzes mit M2_12960LW

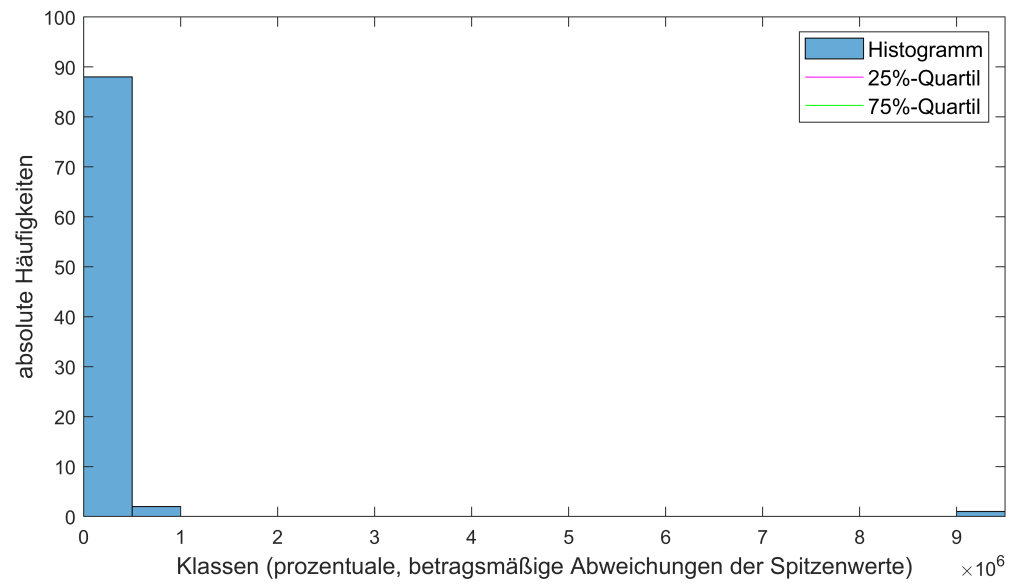


Abbildung D.36: Histogramm der prozentualen, betragsmäßigen Abweichungen der Spitzenwerte bei der Nachsimulation des Testdatensatzes mit M3_12960LW

D.9 Veränderung der Parameter beim Modell M2

Tabelle D.1: Veränderung der Synapsengewichte (w), Schwellenwerte (c) und Filterkoeffizienten (a,b) beim Training ausgewählter KNN mit interner Dynamik (Modell M2). Forts. in Tabelle D.2

Parameter:	Startwerte	Endwerte M2_1LW	Endwerte M2_144LW	Endwerte M2_544LW	Endwerte M2_12960LW
w_{11}	-0,001	0,0952	-0,0051	-0,0	0,0440
w_{21}	0,001	0,2117	0,0069	0,0039	0,2337
w_{31}	-0,001	0,0952	-0,0051	-0,0	0,0440
w_{41}	0,001	0,2117	0,0069	0,0039	
w_{51}	-0,001	0,0952	-0,0051		
w_{61}	0,001		0,0069		
w_{71}	-0,001		-0,0051		
w_{12}	0,001	-0,1136	-0,0772	0,4986	0,1754
w_{22}	-0,001	-0,2038	-0,2361	0,0506	0,1077
w_{32}	0,001	-0,1136	-0,0772	0,4986	0,1754
w_{42}	-0,001	-0,2038	-0,2361	0,0506	
w_{52}	0,001	-0,1136	-0,0772		
w_{62}	-0,001		-0,2361		
w_{72}	0,001		-0,0772		
a_{11}	0	0,0119	-0,0129	-0,4680	0,0096
a_{12}	0	-0,0075	0,0828	-0,2632	-0,1505
a_{13}	0	0,0119	-0,0129	-0,4680	0,0096
a_{14}	0	-0,0075	0,0828	-0,2632	
a_{15}	0	0,0119	-0,0129		
a_{16}	0		0,0828		
a_{17}	0		-0,0129		
a_{21}	0	0,0241	-0,0142	0,5999	0,0547
a_{22}	0	0,0030	0,1374	-0,5535	-0,2336
a_{23}	0	0,0241	-0,0142	0,5999	0,0547
a_{24}	0	0,0030	0,1374	-0,5535	
a_{25}	0	0,0241	-0,0142		
a_{26}	0		0,1374		
a_{27}	0		-0,0142		
b_{01}	1	1,0061	0,9997	1,0684	1,0118
b_{02}	1	1,0280	1,0077	0,8301	1,0137
b_{03}	1	1,0061	0,9997	1,0684	1,0118
b_{04}	1	1,0280	1,0077	0,8301	
b_{05}	1	1,0061	0,9997		
b_{06}	1		1,0077		
b_{07}	1		0,9997		

Tabelle D.2: Fortsetzung von Tabelle D.1: Veränderung der Synapsengewichte (w), Schwellenwerte (c) und Filterkoeffizienten (a,b) beim Training ausgewählter KNN mit interner Dynamik.

Parameter:	Startwerte	Endwerte M2_1LW	Endwerte M2_144LW	Endwerte M2_544LW	Endwerte M2_12960LW
$b1_1$	-0,1	-0,0925	-0,0881	-0,1891	-0,1078
$b1_2$	-0,1	-0,0633	-0,2120	-0,2004	-0,0298
$b1_3$	-0,1	-0,0925	-0,0881	-0,1891	-0,1078
$b1_4$	-0,1	-0,0633	-0,2120	-0,2004	
$b1_5$	-0,1	-0,0925	-0,0881		
$b1_6$	-0,1		-0,2120		
$b1_7$	-0,1		-0,0881		
$b2_1$	0,1	0,1082	0,1117	-0,3092	0,0486
$b2_2$	0,1	0,1452	-0,0688	0,1153	0,2249
$b2_3$	0,1	0,1082	0,1117	-0,3092	0,0486
$b2_4$	0,1	0,1452	-0,0688	0,1153	
$b2_5$	0,1	0,1082	0,1117		
$b2_6$	0,1		-0,0688		
$b2_7$	0,1		0,1117		
c_1	-0,001	-0,0314	0,1129	-0,1938	-0,1765
c_2	0,001	-0,0804	0,3172	0,5947	-0,5753
c_3	-0,001	-0,0314	0,1129	-0,1938	-0,1765
c_4	0,001	-0,0804	0,3172	0,5947	
c_5	-0,001	-0,0314	0,1129		
c_6	0,001		0,3172		
c_7	-0,001		0,1129		
$w_{aus,1}$	0,001	-0,1098	0,2615	0,1267	0,4268
$w_{aus,2}$	-0,001	-0,1161	-0,2661	-0,1850	-0,4285
$w_{aus,3}$	0,001	-0,1098	0,2615	0,1267	0,4268
$w_{aus,4}$	-0,001	-0,1161	-0,2661	-0,1850	
$w_{aus,5}$	0,001	-0,1098	0,2615		
$w_{aus,6}$	-0,001		-0,2661		
$w_{aus,7}$	0,001		0,2615		
$a1_{aus}$	-0,001	-1,1797	-1,1821	-1,4045	-0,6045
$a2_{aus}$	0	0,2929	0,4539	0,6480	-0,0355
$b0_{aus}$	0	1,0994	2,0078	1,0875	1,5118
$b1_{aus}$	1	0,4345	0,7004	-0,4047	0,4623
$b2_{aus}$	-0,1	0,8229	0,4474	1,1616	0,4037
c_{aus}	-0,1	-1,5446	-0,8527	-2,7931	-1,9968

D.10 Modell M3: Vergleich der Simulationsergebnisse

Vergleich der Simulation mit über das Gleichungssystem rechnerisch ermittelten und mit den über die MLP-Netze geschätzten ARMA-Koeffizienten:

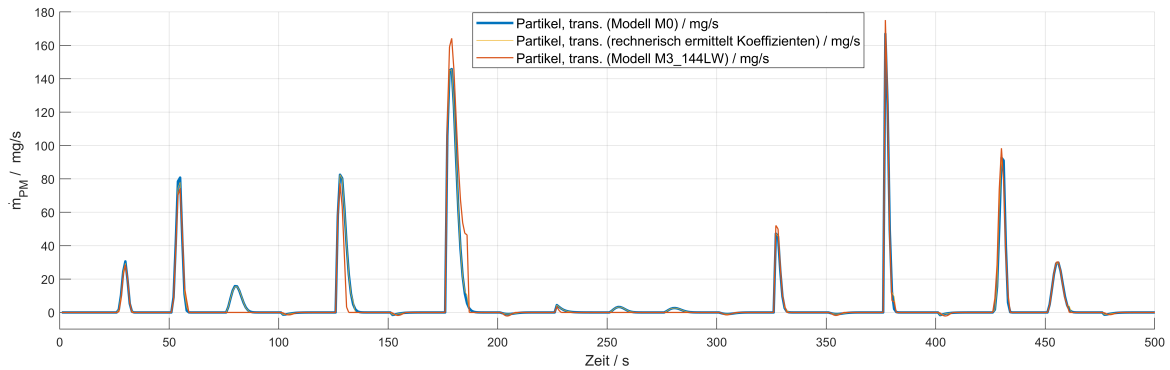


Abbildung D.37: Nachbildung des transienten Anteils des 2. Datensatzes (blau) mithilfe der rechnerisch ermittelten Modellkoeffizienten (gelb - überlagert sich mit blau!) und unter Verwendung der mit Modell M3_144LW simulierten Koeffizienten (rot). Dargestellt werden die ersten 500 Sekunden des Trainingsdatensatzes.

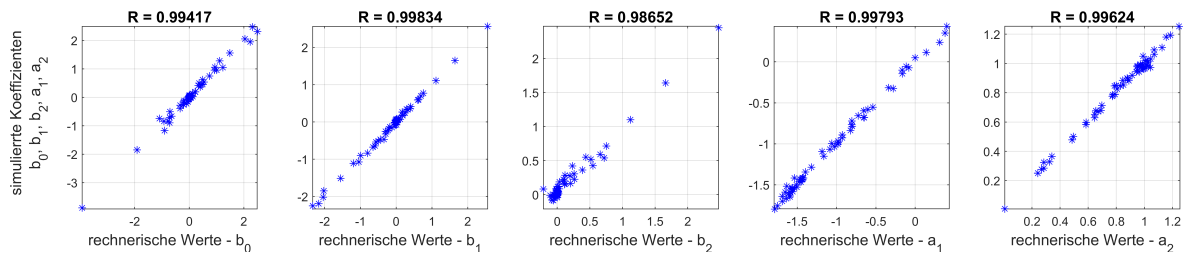


Abbildung D.38: Streudiagramm zur Visualisierung der Korrelationskoeffizienten R zwischen den über das Gleichungssystem ermittelten und jenen mithilfe des jeweiligen stat. MLP-Netzes berechneten Koeffizienten. Beispiel aus Parametrierung von Modell M3_144LW.

E Vergleich Simulation von Messdaten vom Prüfstandmotor 6L23/30

Vergleich der Messungen vom Testdatensatz (85%-Propellerkurve) mit Simulationsergebnissen der verschiedenen Modelle.

Zoombild: Lastsprung von 30% -> 40% auf der 85%-Propellerkurve (vgl. Abb. 3.5)

- Modell M0 zur synthetischen Datenerzeugung (Abb. E.1),
- Modell M1 (KNN mit externer Dynamik) mit Hyperparameterkonfiguration von M1_12960LW (Abb. E.2),
- Modell M2 (KNN mit interner Dynamik) mit Hyperparameterkonfiguration von M2_544LW (Abb. E.3),
- Modell M3 (Hybrides Modell mit stat. KNN + ARMA-Modell) mit Hyperparameterkonfiguration von M3_544LW (Abb. E.4).

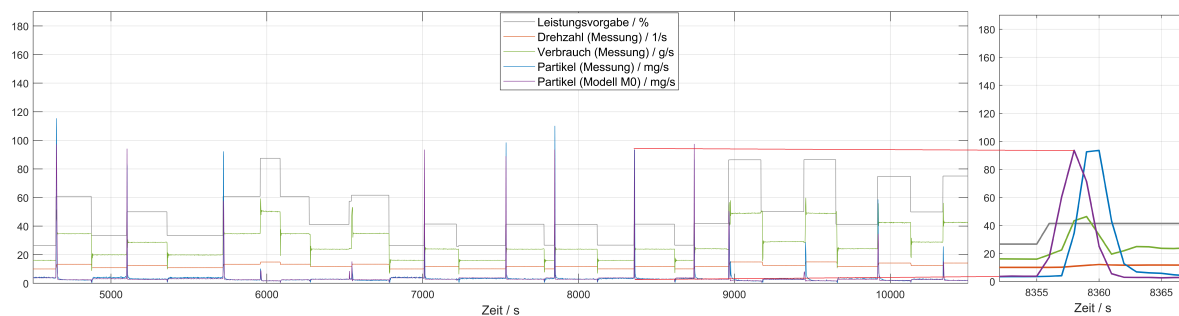


Abbildung E.1: PM_{tot} Messung: 61030 mg; PM_{tot} Simulation mit Modell M0: 74274 mg, hier zur besseren Lesbarkeit nur Ausschnitt von Sekunde 4500 bis 10500 dargestellt.

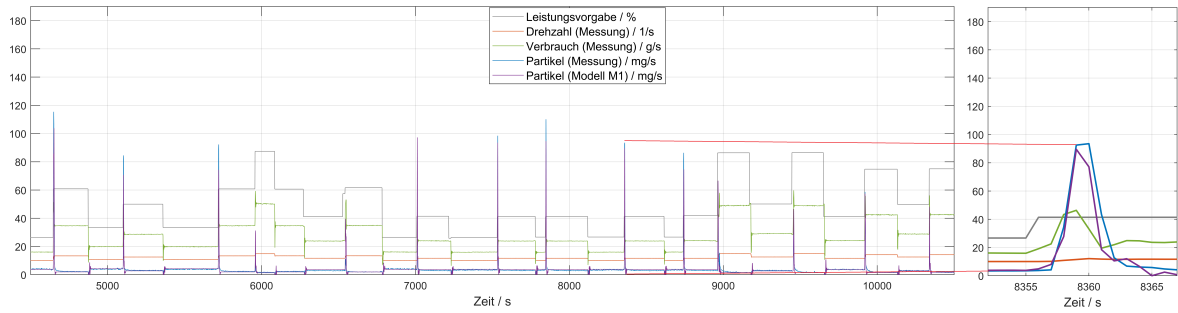


Abbildung E.2: PM_{tot} Messung: 61030 mg; PM_{tot} Simulation mit KNN mit externer Dynamik M1_12960LW: 63776 mg, hier zur besseren Lesbarkeit nur Ausschnitt von Sekunde 4500 bis 10500 dargestellt.

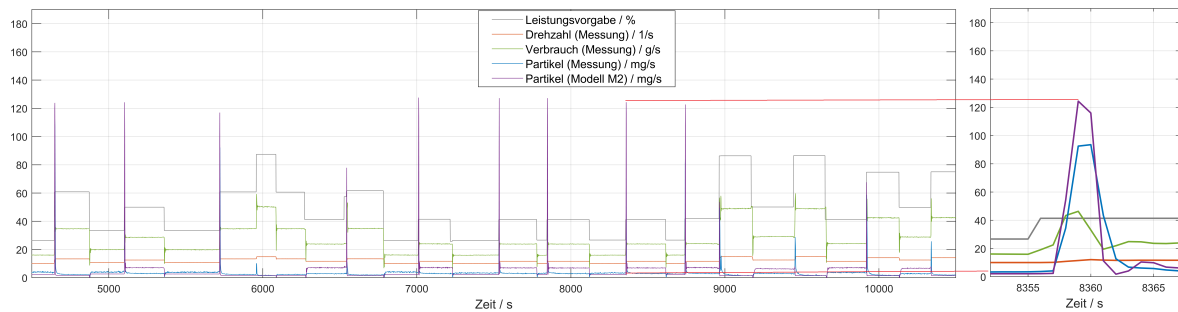


Abbildung E.3: PM_{tot} Messung: 61030 mg; PM_{tot} Simulation mit KNN mit interner Dynamik M2_544LW: 74884 mg, hier zur besseren Lesbarkeit nur Ausschnitt von Sekunde 4500 bis 10500 dargestellt.

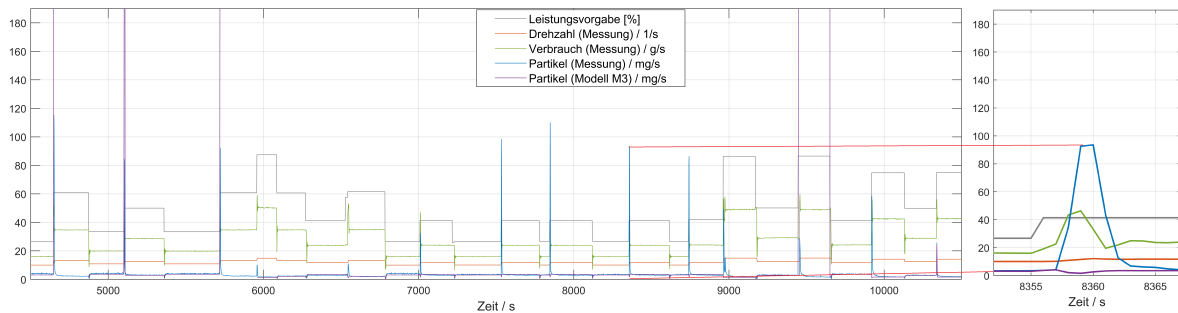


Abbildung E.4: PM_{tot} Messung: 61030 mg; PM_{tot} Simulation mit stat. KNN + ARMA-Modell M3_544LW: NaN mg, hier zur besseren Lesbarkeit nur Ausschnitt von Sekunde 4500 bis 10500 dargestellt.

Selbstständigkeitserklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Dissertation selbstständig und ohne fremde Hilfe verfasst und keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel genutzt habe. Alle wörtlich oder inhaltlich übernommenen Stellen habe ich als solche gekennzeichnet. Ich versichere außerdem, dass ich die beigefügte Dissertation nur in diesem und keinem anderen Promotionsverfahren eingereicht habe und diesem keine Promotionsverfahren vorausgegangen sind.

Rostock, den

Datum, Michèle Schaub

Wissenschaftlicher Lebenslauf

M.Sc. Michèle Schaub

geb. am 17.02.1981 in Lausen/Schweiz

seit SS 2015	immatrikuliert an der Universität Rostock als Promotionsstudentin im Studiengang Maschinenbau, Lehrstuhl für Technische Thermodynamik
seit 09/2011	Wissenschaftliche Mitarbeiterin im Institut ISSIMS (Innovative Schiffs-Simulation und Maritime Systeme) am Bereich Seefahrt der HS Wismar
10/2011 - 03/2014	berufsbegleitendes Fernstudium im interdisziplinären Studiengang Umweltschutz an der Universität Rostock (Abschluss: Master of Science)
09/2006 – 09/2009	Studium Nautik/Seeverkehr am Bereich Seefahrt Warnemünde, HS Wismar (Abschluss: Bachelor of Science)
07/2004 – 06/2006	Anstellung als Nautische Offiziersassistentin bei der Hamburger Reederei Ernst Russ mit insgesamt einem Jahr Fahrtzeit (Vorpraktikum für Studium Nautik/Seeverkehr)
10/2002 – 09/2006	Studium in vergleichenden Religionswissenschaften und Volkswirtschaft an der Universität Fribourg/Schweiz (Abschluss: Bachelor of Arts)

Liste der Veröffentlichungen

- [V1] Schaub, Michèle; Benedict, Knud; Kirchhoff, Matthias (2020): Artificial Intelligence as a Practical Approach to Represent Complex Dynamic Relationships in Maritime Navigation. In: Bauk S, Ilcev SD (2021) The 1st International Conference on Maritime Education and Development. ICMED, 1. Aufl. Springer International Publishing; Imprint: Springer, Cham. DOI: 10.1007/978-3-030-64088-0.

- [V2] Benedict, Knud; Schaub, Michèle; Tuschling, Gerrit; Baldauf, Michael; Gluch, Michael; Kirchhoff, Matthias (2020): Innovative SAMMON Teaching Method for Shiphandling – Element of the Project EURO ZA between South Africa and Europe. In: Bauk S, Ilcev SD (2021) The 1st International Conference on Maritime Education and Development. ICMED, 1. Aufl. Springer International Publishing; Imprint: Springer, Cham. DOI: 10.1007/978-3-030-64088-0.

- [V3] Schaub, Michèle; Baldauf, Michael; Hassel, Egon (2020): Prediction of PM emissions during transient operation of marine diesel engines using artificial neural networks. 25. Symposium Simulationstechnik – ASIM 2020.

- [V4] Schaub, Michèle; Finger, Georg; Milbradt, Gerd; Riebe, Tino; Baldauf, Michael; Kirchhoff, Matthias (2020): Numerische Modellierung von Emissionen und Brennstoffverbrauch beim Manövrieren von Schiffen. In: Schiff & Hafen (09/2020):12–17.

- [V5] Schaub, Michèle; Finger, Georg; Benedict, Knud (2020): Sustainable manoeuvring of ships through simulation-supported additional information- using the example of Particulate Matters (PM). In: The Baltic University Program (Hrsg) Oral presentations given on-line at BUP Symposium 2020, Uppsala Universitet.

- [V6] Külper, Nils; Dahms, Felix; Milbradt, Gerd; Finger, Georg; Schaub, Michèle et al. (2019): MEmBran - Modellierung von Emissionen und Brennstoffverbrauch beim Manövrieren von Schiffen. In: Tagungsband der Statustagung 2019: Maritime Technologien, Seite 11-26, Schriftreihe Projekt-träger Jülich.

- [V7] Schaub, Michèle; Finger, Georg; Krüger, Caspar; Tuschling, Gerrit; Baldauf, Michael; Benedict, Knud (2019): Innovative Simulation Method for Sustainable & Safe Operation of Cruise Ships in Coastal and Harbour Areas. In: Jahrbuch der Schiffbautechnischen Gesellschaft e.V. (114. Hauptversammlung) Papenburg.

- [V8] Schaub, Michèle (2019): DATA-BASED PREDICTION OF SOOT EMISSIONS FOR TRANSIENT ENGINE OPERATION. In: IAPGOS 9 (4), S. 10–13. DOI: 10.35784/IAPGOS.29.
- [V9] Schaub, Michèle; Finger, Georg; Krüger, Caspar; Tuschling, Gerrit; Baldauf, Michael; Benedict, Knud (2019): Innovative Simulation Method for Sustainable & Safe Operation of Ships in Coastal and Harbour Areas. In: IMLA 26 (Hg.): Proceedings IMLA 2019. Batumi, Georgia.
- [V10] Schaub, Michèle; Finger, Georg; Krüger, Caspar; Tuschling, Gerrit; Baldauf, Michael; Benedict, Knud (2019): Quantifying Fuel Consumption & Emission in Ship Handling Simulation for Sustainable and Safe Operation in Harbour Areas. In: IAMUC2019 (Hg.): Proceedings of the International Association of Maritime Universities (IAMU) Conference. Tokyo.
- [V11] Finger, Georg; Schaub, Michèle; Dahms, Felix; Hassel, Egon; Riebe, Tino; Milbradt, Gerd; Wehner, Karsten (2019): On-board Support System for the eco-friendly ship operation in coastal and port areas. In: OCEANS 2019 - Marseille. OCEANS 2019 - Marseille. Marseille, France, 17.06.2019 - 20.06.2019: IEEE
- [V12] Schaub, Michèle; Finger, Georg; Riebe, Tino; Dahms, Felix; Hassel, Egon; Baldauf, Michael (2019): Data-based modelling of ship emissions and fuel oil consumption for transient engine operation. In: OCEANS 2019 - Marseille. OCEANS 2019 - Marseille. Marseille, France, 17.06.2019 - 20.06.2019: IEEE, S. 1–5.
- [V13] Dahms, Felix; Reska, Michael; Nocke, Jürgen; Hassel, Egon; Schaub, Michèle; Reißig, Martin (2019): Characterizing of transient engine operating with investigation on particle size distribution on a four-stroke medium-speed engine, CIMAC Congress 2019, June 10-14 2019, Vancouver, Canada
- [V14] Schaub, Michèle; Finger, Georg; Dahms, Felix; Hassel, Egon; Jeinsch, Torsten; Kirchhoff, Matthias (2019): Data-based prediction of particle emissions during manoeuvring of ships. In: 2019 International Interdisciplinary PhD Workshop (IIPhDW). 2019 International Interdisciplinary PhD Workshop (IIPhDW). Wismar, Germany, 15.05.2019 - 17.05.2019: IEEE, S. 68–73.
- [V15] Benedict, Knud; Gluch, Michael; Kirchhoff, Matthias; Schaub, Michèle; Tuschling, Gerrit; Baldauf, Michael; Gehrke, Mario (2018): Enhanced Fast-Time-Simulation Features to support Ship-Handling Simulator Training. In: G. Grifoll, F. X. Martinez de Oses, M. Castelles und A. Martin (Hg.): IAMU 2018. 19th Annual General Assembly (AGA) of the International Association of Maritime Universities (IAMU). 17-19 October 2018, Barcelona, Spain. Barcelona: Barcelona School of Nautical Studies, Universitat Politècnica de Catalunya, S. 94–112. Online verfügbar unter http://www.iamu2018.com/frontaldocEbook_IAMU_2018.pdf, zuletzt geprüft am 22.10.2018.

-
- [V16] Bornhorst, Claus; Gehrke, Mario; Benedict, Knud; Schaub, Michèle; Finger, Georg; Tuschling, Gerrit; Baldauf, Michael (2018): Fast-Time-Simulation as a Feature for Enhanced Training in connection with Rheinmetall's ANS 6000 Ship Handling Simulator. In: International Conference on Ship Manoeuvrability and Maritime Simulation (MARSIM) (Hg.): MARSIM 18. Halifax, Nova Scotia, Canada.
- [V17] Baldauf, Michael; Benedict, Knud; Kirchhoff, Matthias; Schaub, Michèle; Gluch, Michael; Fischer, Sandro (2018): Energy-Efficient Ship Operation: The Concept of Green Manoeuvring. In: Froholdt L. (eds) Corporate Social Responsibility in the Maritime Industry. WMU Studies in Maritime Affairs, vol 5. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-319-69143-5_11
- [V18] Benedict, Knud; Fischer, Sandro; Gluch, Michael; Kirchhoff, Matthias; Schaub, Michèle; Baldauf, Michael; Müller, Burkhard (2017): Innovative Fast Time Simulation Tools for Briefing / Debriefing in Advanced Ship Handling Simulator Training and Ship Operation. In: ToMS 6 (1), S. 24–38. DOI: 10.7225/toms.v06.n01.003.
- [V19] Benedict, Knud; Fischer, Sandro; Gluch, Michael; Kirchhoff, Matthias; Schaub, Michèle; Baldauf, Michael; Müller, Burkhard (2017): Innovative Fast Time Simulation Tools for Briefing/Debriefing in Advanced Ship Handling Simulator Training and Ship Operation. In: Pero Vidan und Nikola Račić (Hg.): Book of Proceedings of the 7th International Maritime Science Conference (IMSC 2017). 7th International Maritime Science Conference (IMSC 2017). Solin, Croatia, 20.-21.04.2017. Faculty of Maritime Studies Split. Split, Croatia: Faculty of Maritime Studies, S. 24–41. Online verfügbar unter <http://www.pfst.unist.hr/imsc/>.
- [V20] Benedict, Knud; Gluch, Michael; Fischer, Sandro; Kirchhoff, Matthias; Schaub, Michèle; Baldauf, Michael; Müller, Burkhard (2017): Innovative Fast Time Simulation Tools for Briefing/Debriefing in Advanced Ship Handling Simulator Training for Cruise Ship Operation. In: Volker Bertram (Hg.): COMPIT'17. 16th International Conference on Computer and IT Applications in the Maritime Industries : Cardiff, 15-17 May 2017. Hamburg: Technische Universität Hamburg-Harburg (Schriftenreihe Schiffbau), S. 31–47.
- [V21] Benedict, Knud; Baldauf, Michael; Fischer, Sandro; Gluch, Michael; Kirchhoff, Matthias; Schaub, Michèle; Klaes, Sebastian (2016): Simulation Technology brings new visualisation of the future ships path – and advanced use of the well-known Speed Vector. In: IMLA (Hg.): 24th Annual International Maritime Lecturers' Association (IMLA) Conference "Quality Standards in Maritime Education". Galveston, Texas, 10.-14.11.2016: Texas A&M University.

- [V22] Benedict, Knud; Baldauf, Michael; Fischer, Sandro; Gluch, Michael; Kirchhoff, Matthias; Schaub, Michèle et al. (2016): Innovative Fast Time Simulation Tools for Briefing/Debriefing in Advanced Ship Handling Simulator Training at AIDA Cruises. In: International Navigation Simulator Lecturers' Conference (Hg.): Proceedings to the 19th International Navigation Simulator Lecturers' Conference (INSLC19). 19th International Navigation Simulator Lecturers' Conference (INSLC19). Cape Town, South Africa, 05.-08.09.2016. International Navigation Simulator Lecturers' Conference.
- [V23] Benedict, Knud; Baldauf, Michael; Gluch, Michael; Kirchhoff, Matthias; Krüger, Caspar-Maria; Schaub, Michèle (2016): Simulation-augmented manoeuvring system to support autonomous ships from the shore. In: Autonomous Ship Technology Symposium (Hg.): Proceedings to the 1st Autonomous Ship Symposium. 1st Autonomous Ship Symposium. Amsterdam, 21.-23.06.2016.
- [V24] Benedict, Knud; Kirchhoff, Matthias; Gluch, Michael; Fischer, Sandro; Schaub, Michèle; Baldauf, Michael (2016): Simulation-Augmented Methods for Safe and Efficient Manoeuvres in Harbour Areas. In: TransNav 10 (2), S. 193–201. DOI: 10.12716/1001.10.02.02.
- [V25] Schaub, Michèle; Benedict, Knud; Klaes, Sebastian; Baldauf, Michael (2016): FAST-TIME SIMULATION FOR PREDICTION OF FUEL CONSUMPTION AND EMISSIONS DURING SHIP MANOEUVRES. In: Universität Rostock und LKV (Hg.): 4. Rostocker Großmotorentagung (4. RGMT). Rostock.
- [V26] Schaub, Michèle; Benedict, Knud; Milbradt, Gerd; Gluch, Michael; Fischer, Sandro; Wehner, Karsten et al. (2016): Manoeuvre Planing to minimize Emissions and save Energy. In: DGON - Deutsche Gesellschaft für Ortung und Navigation e.V. (Hg.): 12 th International Symposium on Integrated Ship's Information Systems & Maritime Traffic Engineering Conference. Unter Mitarbeit von Maritime University of Szczecin.
- [V27] Schaub, Michèle; Benedict, Knud; Gluch, Michael; Milbradt, Gerd; Tuschling, Gerrit; Kirchhoff, Matthias (2015): Modelling of Ships for Simulator Training and Simulation-Augmented Manoeuvring Support on Board and from the Shore. In: International Conference on Ship Manoeuvrability and Maritime Simulation (MARSIM) (Hg.): MARSIM 15. Newcastle, UK.
- [V28] Benedict, Knud; Gluch, Michael; Kirchhoff, Matthias; Schaub, Michèle; Fischer, Sandro; Baldauf, Michael (2015): Innovative Simulation Tools for Learning & Teaching Ships Dynamic and Investigation of Manoeuvring Capabilities. In: International Conference on Ship Manoeuvrability and Maritime Simulation (MARSIM) (Hg.): MARSIM 15. Newcastle, UK.
- [V29] Benedict, Knud; Gluch, Michael; Milbradt, Gerd; Schaub, Michèle; Fischer, Sandro; Kirchhoff, Matthias; Baldauf, Michael (2015): Improving Maritime Simulation through Prediction of Ships Manoeuvring Motion. In: DGLR (Hg.): Deutscher Luft- und Raumfahrtkongress 2015. 22.-24. September 2015 - Rostock.

-
- [V30] Krüger, Caspar-Maria; Schaub, Michèle; Benedict, Knud; Kirchhoff, Matthias; Gluch, Michael; Fischer, Sandro (2015): Simulation-Augmented Manoeuvring Support for Ship Handling on Board and from Shore. In: Volker Bertram (Hg.): COMPIT'15. 14th International Conference on Computer and IT Applications in the Maritime Industries : Ulrichshusen, 11-13 May 2015. Hamburg: Technische Universität Hamburg-Harburg (Schriftenreihe Schiffbau), S. 74–88.
- [V31] Schaub, Michèle; Benedict, Knud; Gluch, Michael; Milbradt, Gerd; Herberg, Sven; Kirchhoff, Matthias (2015): Modellierung von Schiffen für die simulationsunterstützte Schiffsführung auf der Grundlage exakter Positionsdaten. In: DGLR (Hg.): Deutscher Luft- und Raumfahrtkongress 2015. Rostock.
- [V32] Schaub, Michèle; Benedict, Knud; Klaes, Sebastian; Baldauf, Michael (2015): Fast-Time Simulation for Prediction of Fuel Consumption and Emissions during Ship Manoeuvres. In: University of Strathclyde (Hg.): SCC 2015. International Conference on Shipping in Changing Climates, Proceedings Vol. 1. Glasgow, UK, S. 171–184.
- [V33] Benedict, Knud; Fischer, Sandro; Gluch, Michael; Kirchhoff, Matthias; Schaub, Michèle; Baldauf, Michael (2014): Innovative Simulation Tools for Learning and Teaching Ships Dynamics & Manoeuvring. In: IMLA (Hg.): IMLA 2014. Xiamen, China.
- [V34] Benedict, Knud; Gluch, Michael; Fischer, Sandro; Kirchhoff, Matthias; Schaub, Michèle; Krüger, Caspar-Maria; Baldauf, Michael (2014): Innovative Manoeuvring Support - From today's Shipboard Organisational Structures to Shor Controlled Autonomous Ships. In: IAMU (Hg.): IAMU-14, AGA 15. Launceston, Tasmania.
- [V35] Benedict, Knud; Fischer, Sandro; Gluch, Michael; Kirchhoff, Matthias; Schaub, Michèle (2013): Simulation Augmented Manoeuvring Design and Monitoring - SAMMON. Development of new Fast Time Simulation Technology for Lecturing & Training in Simulators and on Board Ships. In: MariTeam User Conference 2013 (Hg.): 18th MariTEAM User Conference 2013.
- [V36] Benedict, Knud; Gluch, Michael; Kirchhoff, Matthias; Fischer, Sandro; Schaub, Michèle; Baldauf, Michael (2012): Application of Fast Time Manoeuvring Simulation for Ship Handling in Simulator Training and On-board. In: INSLC (Hg.): INSLC 17 -International Navigation Simulator Lecturer Conference. Rostock.
- [V37] Benedict, Knud; Kirchhoff, Matthias; Gluch, Michael; Fischer, Sandro; Schaub, Michèle (2012): Fast Time Manoeuvring Simulation as Decision Support for Planning and Monitoring of Ship Handling Processes for Ship Operation On-Board and Training in Simulators. In: International Conference on Ship Manoeuvrability and Maritime Simulation (MARSIM) (Hg.): MARSIM 12. Singapore.

- [V38] Benedict, Knud; Kirchhoff, Matthias; Gluch, Michael; Fischer, Sandro; Schaub, Michèle; Baldauf, Michael; Klaes, Sebastian (2012): Combining Fast Time and Full Mission Manoeuvring Simulation for Ships Design, Training and Operation of Ships. In: The Foundation for Safety of Navigation and Environment Protection (Hg.): Proceedings of Joint 19th International Conference on Hydrodynamics in Ship Design and 4th International Symposium on Ship Manoeuvring, HYDRONAV '2012, MANOEUVRING '2012, Iława, Poland. S. 13–26.