



DET TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE FAKULTET

MASTEROPPGAVE

Studieprogram/spesialisering:	Vårsemesteret 2024
Master i ingeniørfag / Robotteknologi og signalbehandling	Åpen
Forfatter: Malin Harr Overland	
Veileder: Eivind Sandve Haus	
Biveileder: Tormod Drengstig	
Tittel på masteroppgaven: Identifiserbarhet og parameterestimering ved bruk av Kalmanfilter anvendt på biologiske modeller	
Engelsk tittel: Identifiability and Kalman filter parameter estimation applied to biomolecular controller motifs	
Studiepoeng: 30	
Emneord: Kalmanfilter, observerbarhet, identifiserbarhet, kontrollmotiv	Sidetall: 51 + vedlegg/annet: 12 Stavanger 15. juni 2024

Sammendrag

For biologiske modeller er ofte tilgjengelige målinger svært begrenset eller behøver dyrt utstyr. Derfor er det nødvendig å optimalisere design av modeller, for å finne ut hvor mange og hvilke målinger som er nødvendige. Denne oppgaven foreslår en løsning hvor observerbarheten til modellene blir undersøkt ved hjelp av Kalmanfilter. Tidligere er modellene blitt undersøkt med tanke på strukturell identifiserbarhet, og målet for denne oppgaven er å sammenligne funnene med resultatene fra artikkelen om identifiserbarhet.

Det blir implementert 14 ulike Kalmanfilterversjoner, både for et lineært og et ulineært kontrollmotiv. For det lineære kontrollmotivet blir Kalmanfilteret augmentert med flere parametre som tilstander, og det blir funnet at ikke alle parametrene kan estimeres når de tas inn som tilstander. For det ulineære kontrollmotivet blir det eksperimentert med ulike målekombinasjoner, og effekten av både støy og initialverdier i Kalmanfilteret.

Forord

Jeg vil rette en stor takk til mine veiledere Eivind Sandve Haus og Tormod Drengstig, for utrolig god veiledning gjennom hele prosjektet. Begge to har vist stort engasjement for oppgaven gjennom hele semesteret, og har alltid vært tilgjengelig for rådgivning og veiledning.

Innhold

Sammendrag	i
Forord	ii
Innhold	iii
1 Introduksjon	1
1.1 Homeostase og biologiske modeller	1
1.2 Kontrollmotiv	1
1.3 Problemstilling og disposisjon for oppgaven	6
2 Teoretisk bakgrunn	7
2.1 Observerbarhet	7
2.1.1 Observerbarhet for lineære systemer	8
2.1.2 Observerbarhet for ulineære systemer	9
2.2 Strukturell identifiserbarhet	9
2.3 Kalmanfilter	10
2.3.1 Kalmanfilter for lineære systemer	11
2.3.2 Augmentert Kalmanfilter	13
2.3.3 Utvidet Kalmanfilter (EKF)	13

3 Tidligere arbeid	14
3.1 Utvide en modell med fluks lagt til som tilstand (metode 1)	15
3.2 Inkludere fluksuttrykk eksplisitt i målt utgang (metode 2)	17
3.3 Resultater fra strukturell identifiserbarhetsartikkel	18
4 Lineær modell	22
4.1 Modellering versjon 1	23
4.2 Modellering versjon 2	24
4.3 Modellering versjon 3	25
4.4 Modellering versjon 4	25
4.5 Resultater lineær modell	26
4.5.1 Versjon 1 - Resultater	27
4.5.2 Versjon 2 - Resultater	28
4.5.3 Versjon 3 - Resultater	29
4.5.4 Versjon 4 - Resultater	29
5 Ulineær modell	31
5.1 Ligninger metode 1	31
5.2 Ligninger metode 2	34
5.3 Resultater ulineær modell	36
5.3.1 Metode 1 kontra metode 2	38
5.3.2 Visuell analyse panel A-J, uten støy	40
5.3.3 Visuell analyse panel A-J, med støy	45
6 Diskusjon og konklusjon	49

INNHOOLD

6.1	Forbedringsforslag	49
6.2	Konklusjon	50
	Bibliografi	51
	Vedlegg	51
	A Programlisting	52
	B Simuleringer ulineært kontrollmotiv	53
B.1	Versjon 5-8/Panel A-D: Målinger relatert til både A og E	53
B.2	Versjon 9-11/Panel E-G: Målinger relatert til A	57
B.3	Versjon 12-14/Panel H-J: Målinger relatert til E	60

Kapittel 1

Introduksjon

Dette kapitlet gir en innføring i hva oppgaven dekker og bakgrunnen for den.

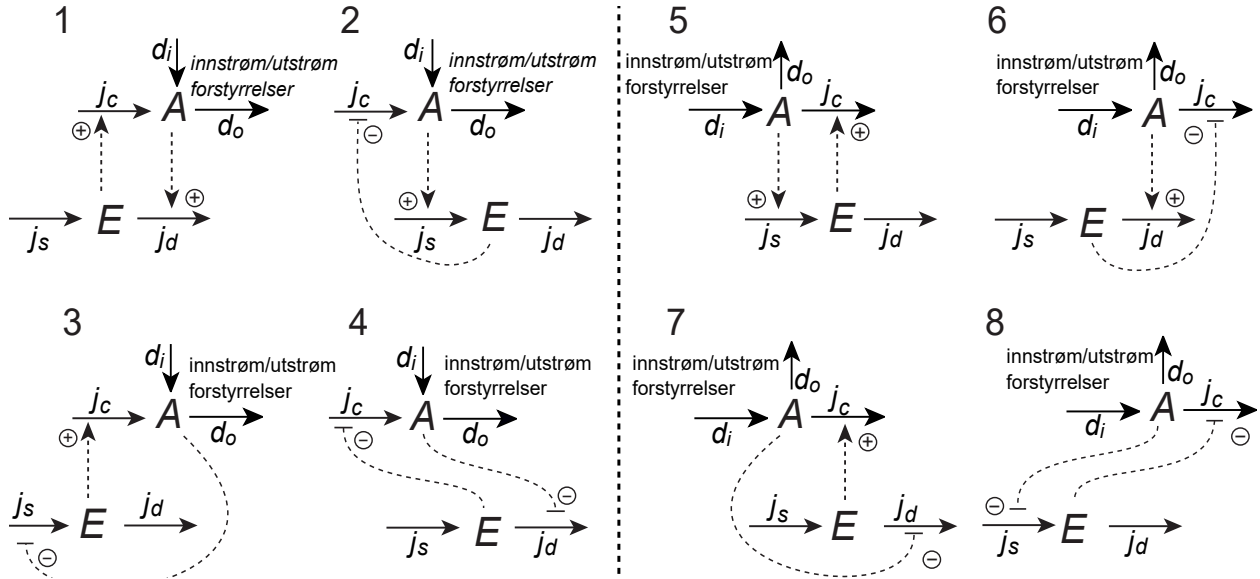
1.1 Homeostase og biologiske modeller

Mange biologiske systemer kan modelleres som et reguleringsystem bestående av en prosess og en regulator, hvor det som tilsvarer settpunktet typisk er gitt som funksjon av ulike ratekonstanter i systemet. Målet er at prosessen skal holde seg på et stabilt nivå rundt settpunktet, og i biologien kalles dette *homeostase*. Kjente eksempler på slike homeostatiske systemer er regulering av kroppstemperatur og regulering av blodsukkernivå. Kroppen vil alltid prøve å holde kroppstemperaturen på ca. 37.5°C , og blodsukkernivået hos en frisk person vil typisk ligge mellom 4 og 7-8 mikromol per liter, selv under et måltid eller ved fysisk aktivitet [3].

1.2 Kontrollmotiv

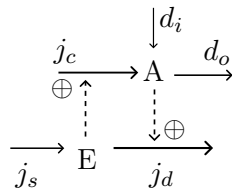
For å beskrive hvordan regulering kan oppnås i biologiske systemer er det blitt utviklet åtte generiske kontrollmotiv [4], se figur 1.1. Det har blitt skrevet flere artikler der disse er blitt analysert, se for eksempel [4], [5], [7] og [13].

1.2 Kontrollmotiv



Figur 1.1: Alle de åtte kontrollmotivene. Figuren er hentet fra [7].

Kontrollmotivene er bygd opp av to stoffer, A og E , som kan påvirke hverandres syntese og degradasjon. Stoffet A tilsvarer prosessen som skal reguleres, mens nivået av stoffet E tilsvarer pådraget ut fra regulatoren i et reguleringssystem. I denne oppgaven er det det første av de åtte kontrollmotivene som er undersøkt nærmere, og det er vist igjen i figur 1.2 med variabelnavn på de fem ratene. Modelligningene er vist i ligning (1.1) og (1.2).



Figur 1.2: Kontrollmotiv 1.

$$\dot{A}(t) = j_c(t) + d_i(t) - d_o(t) \quad (1.1)$$

$$\dot{E}(t) = j_s(t) - j_d(t) \quad (1.2)$$

Kontrollmotivet i figur 1.2 er klassifisert som et *aktiverende* kontrollmotiv, fordi synteseeffluksen til A , j_c , øker med en økende mengde av E . For å indikere aktivering benytter vi symbolet \oplus i kontrollmotivene. Uttrykket for j_c er vist i ligning (1.3), hvor k_c er en ratekonstant. Synteseeffluksen har fått navnet *kompenserende fluks*, fordi det er gjennom denne fluksen at E påvirker A for å kompensere for forstyrrelsene d_i og d_o . Det ser man fra formel (1.3), fordi j_c avhenger lineært av nivået til E .

1.2 Kontrollmotiv

$$j_c(t) = k_c \cdot E(t) \quad (1.3)$$

Degradasjonsfluksen til E , j_d , påvirkes på samme måte av mengden A , og er derfor markert med samme pil og plusstegn. Fluksen kan modelleres generelt som i ligning (1.4), hvor k_d er en ratekonstant. Vi har studert to varianter av $f(E)$, hvorav den enkleste er $f(E) = 1$, som betyr at j_d er helt uavhengig av E . Den andre varianten er $f(E) = E(t)$, som betyr at raten j_d avhenger lineært av E i tillegg til nivået av A . For den andre varianten er dermed modellen ulineær.

$$j_d(t) = k_d \cdot A(t) \cdot f(E) \quad (1.4)$$

For å bestemme settpunktet til kontrollmotivet tar vi utgangspunkt i differensialligningen til E , ligning (1.2). Ved å sette ligning (1.4) inn i differensialligningen, sette ligningen til stasjonære forhold ($\dot{E} = 0$) og løse for A , finnes settpunktet som i ligning (1.5).

$$A_{set} = A = \frac{j_s(t)}{k_d \cdot f(E)} \quad (1.5)$$

Den andre synteseffluksen til A , d_i , og degradasjonsfluksen, d_o , blir modellert som forstyrrelser til systemet, og er vist i ligning (1.6) og (1.7). k_i og k_o er ratekonstantene for forstyrrelsene.

$$d_i(t) = k_i \quad (1.6)$$

$$d_o(t) = k_o \cdot A(t) \quad (1.7)$$

Den siste fluksen, j_s , er synteseffluksen til E . Den modelleres som vist i ligning (1.8), hvor k_s er ratekonstanten.

$$j_s(t) = k_s \quad (1.8)$$

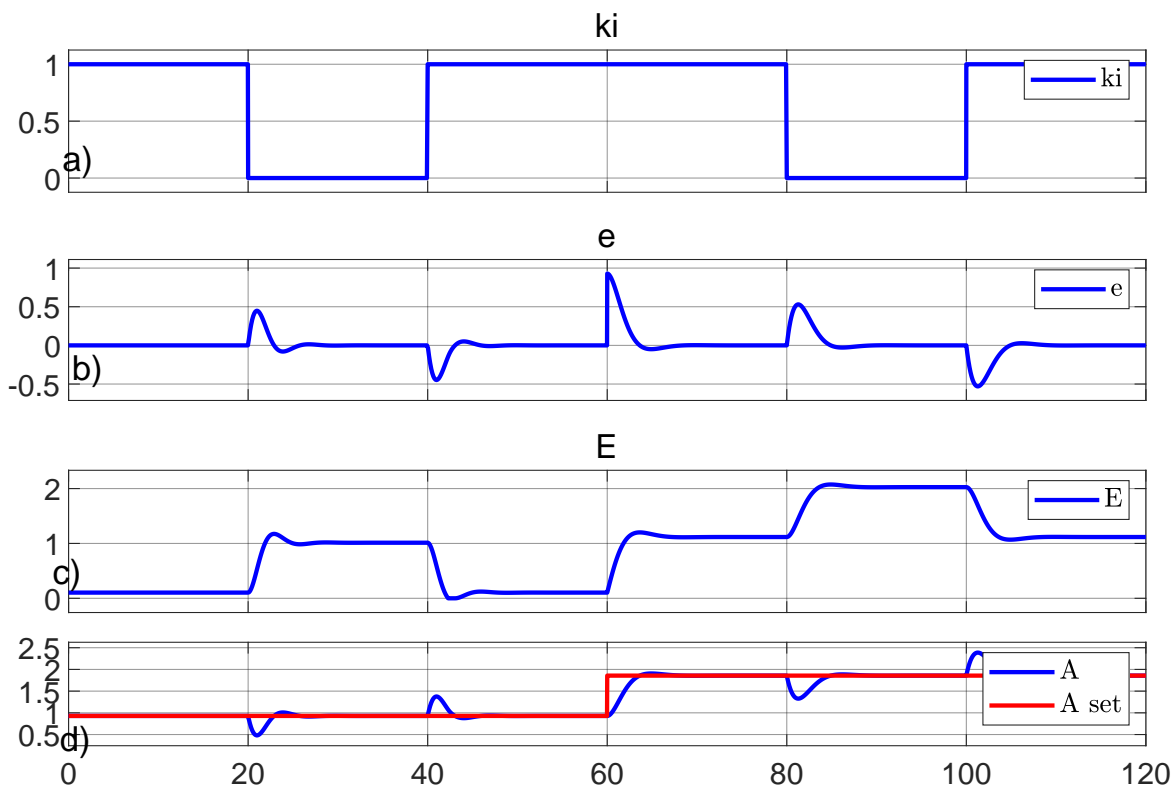
For å vise at kontrollmotivet fungerer som en regulator viser figur 1.3 et simuleringsresultat hvor det blir gitt sprang i forstyrrelsen k_i , sammen med et sprang i referansen ved $t = 60$ sekund. Spranget i referansen skyldes et sprang i k_d , og følgende parameterverdiene er benyttet:

- $k_c = 1.1$
- $k_o = 1.2$
- $k_s = 1.3$

1.2 Kontrollmotiv

- $k_d = 1.4$ for $t < 60$
- $k_d = 0.7$ for $t \geq 60$
- $f(E) = 1$

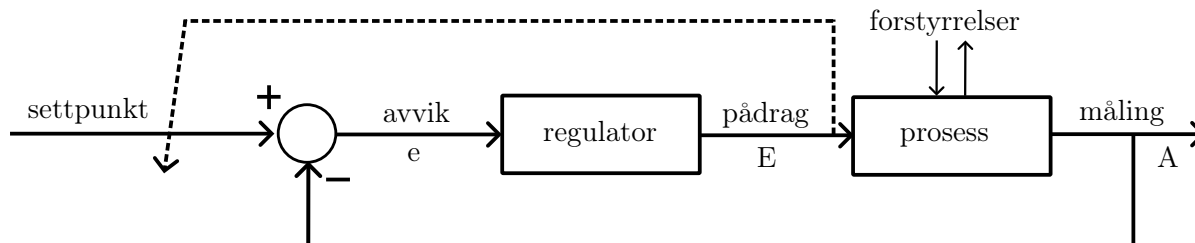
Fra $t = 0$ i figur 1.3 ser man i panel d) at A ligger på settpunktet og i panel b) at avviket er null. I $t = 20$ er det første steget i k_i (panel a)). Etter dette steget ser man i panel d) og b) at A raskt svinger seg inn mot settpunktet og avviket, e , blir igjen null. Som gitt av ligning (1.1) og (1.6), vil en mindre k_i minke innstrømmen til A . Derfor kompenserer systemet ved å øke den andre synteseffluksen, $j_c(t)$. $j_c(t)$ er gitt av ligning (1.3), så for å øke den øker systemet mengden E . Dette kan også observeres i panel c), ved $t = 20$, i figur 1.3. De samme observasjonene kan også gjøres ved de tre neste stegene i k_i i $t = 40$, $t = 80$ og $t = 100$, og ved steget i settpunktet i $t = 60$.



Figur 1.3: En simulering av kontrollmotiv 1, i Simulink, med $j_d(t) = k_d \cdot A(t)$.

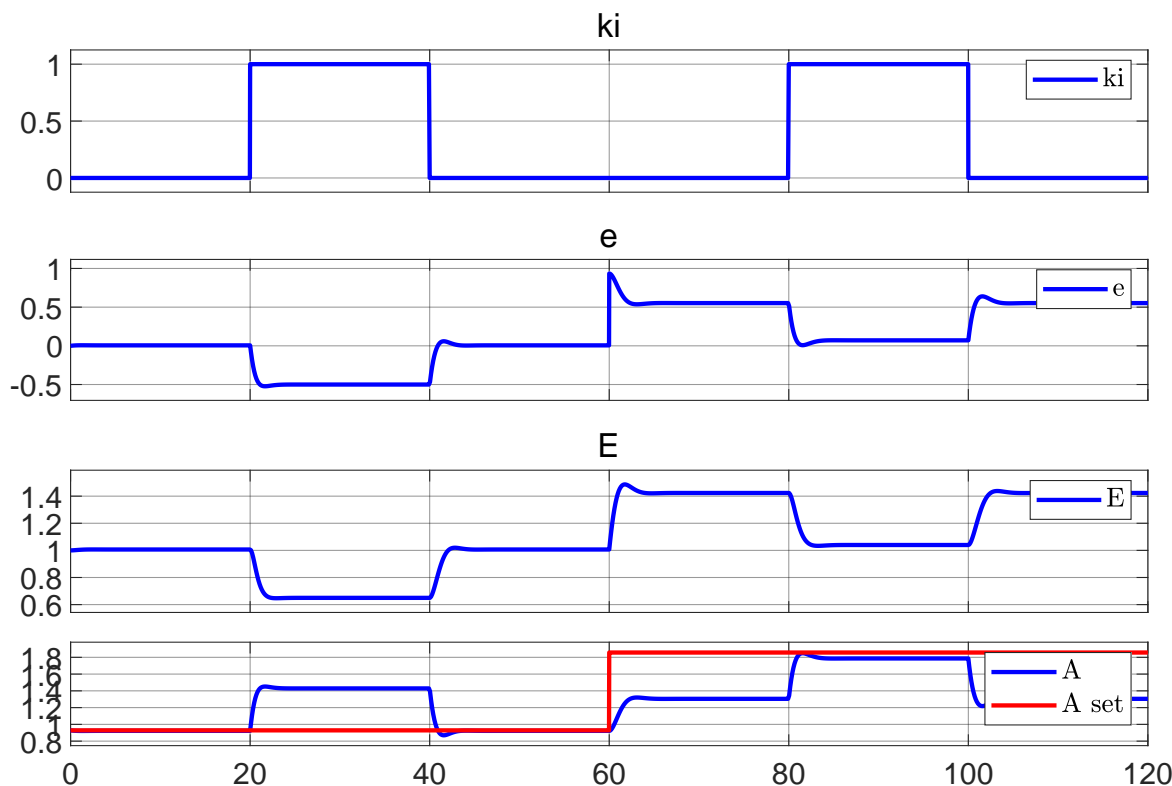
Det ble også gjort en simulering av motivet med $f(E) = E(t)$ i ligning (1.4), for å vise reguleringen når systemet er ulineært. En skjematisk fremvisning av systemet er vist i figur 1.4, hvor man ser at pådraget E påvirker settpunktet. I [12] fra 2017 ble det også analysert en situasjon hvor pådraget påvirket settpunktet i et tanksystem.

1.2 Kontrollmotiv



Figur 1.4: Den ulineære versjonen av motivet presentert som en reguleringsstruktur med negativ tilbakekobling. Her er det illustrert at pådraget $E(t)$ påvirker settpunktet.

Simuleringen av det ulineære motivet er vist i figur 1.5, med sprang i forstyrrelsen k_i og et sprang i settpunktet ved $t = 60$ sekund, slik som i figur 1.3. Selv om settpunktet ut fra ligning (1.5) her skulle vært $A_{set} = \frac{j_s(t)}{k_d \cdot E(t)}$ er det valgt å bruke samme settpunkt som for den lineære modellen, $A_{set} = \frac{j_s(t)}{k_d}$. Det er også brukt samme parameterverdier. Her observeres det at modellen ikke lenger klarer å følge settpunktet. Dette er fordi degradasjonen av E ikke lenger skjer ved såkalt nullte ordens kinetikk. Nullte ordens kinetikk betyr at degradasjonen av E skjer uavhengig av mengden av E , og dette er essensielt for å oppnå integralvirkning [5].



Figur 1.5: En kjøring av kontrollmotiv 1, i Simulink, med $j_d = k_d \cdot A(t) \cdot E(t)$.

1.3 Problemstilling og disposisjon for oppgaven

Denne oppgaven ser på både den lineære og den ulineære versjonen av kontrollmotiv 1, og analyserer dem med tanke på observerbarhet. Målet var å sammenligne resultater med identifiserbarhetsresultater som allerede er utført på det samme kontrollmotivet [7]. Disposisjonen av denne oppgaven er strukturert som følger:

- **Kapittel 2** går inn på teorien bak observerbarhet, identifiserbarhet og Kalmanfilter.
- **Kapittel 3** går gjennom det tidligere arbeidet som er blitt gjort om strukturell identifiserbarhet. Resultatene fra den artikkelen skal sammenlignes med resultatene fra denne oppgaven.
- **Kapittel 4** viser både metode og resultater for den lineære versjonen av kontrollmotivet. Det blir her implementert fire ulike Kalmanfilterversjoner.
- **Kapittel 5** tar for seg metode og resultater for den ulineære versjonen av kontrollmotivet. Her blir det implementert ti ulike Kalmanfilterversjoner.
- **Kapittel 6** er en diskusjon og konklusjon av oppgaven. Her diskuteres flere forbedringsforslag og hvordan oppgaven er blitt løst.

Kapittel 2

Teoretisk bakgrunn

Begrepene *observerbarhet* og *identifiserbarhet* er sentrale for denne oppgaven. De to konseptene er ikke identiske, men kan relateres til hverandre. Dette kapitlet går nærmere inn på sammenhengen mellom konseptene og den teoretiske bakgrunnen for begge begrepene. Videre står det om Kalmanfilter, både lineært, utvidet og augmentert. Det meste av stoffet i dette kapitlet er basert på tekstene [6] og [14].

2.1 Observerbarhet

Observerbarhet er en modellegenskap som beskriver om det er mulig å finne den nåværende tilstanden til et system basert på tilgjengelige målinger over et endelig tidsintervall. For å beskrive observerbarhet tar vi utgangspunkt i et lineært system gitt av ligning (2.1) og (2.2):

$$x(k+1) = \Phi(k)x(k) + \Gamma(k)u(k) \quad (2.1)$$

$$y(k) = D(k)x(k) \quad (2.2)$$

Det lineære systemet er observerbart dersom det finnes en endelig k slik at kjennskap til $u(0), \dots, u(k-1)$ og $y(0), \dots, y(k-1)$ gjør at man kan bestemme systemets tilstand $x(k)$ [6].

Et ulineært system vil ikke kunne uttrykkes med matriser og derfor er det to ulike metoder for å undersøke observerbarheten for lineære og ulineære systemer. Metodene er beskrevet i underkapittel 2.1.1 og 2.1.2.

2.1.1 Observerbarhet for lineære systemer

Observerbarhet handler om om det er mulig å finne nåværende tilstand basert på målinger, og for å undersøke dette er det naturlig å se på måleligningen og dens deriverte. Fra ligning (2.1) og (2.2) finnes de tre første måleligningene til:

$$\begin{aligned}
 y(0) &= Dx(0) \\
 y(1) &= Dx(1) \\
 &= D\Phi x(0) + \Gamma u(0) \\
 y(2) &= Dx(2) \\
 &= D(\Phi x(1) + \Gamma u(1)) \\
 &= D(\Phi(\Phi x(0) + \Gamma u(0)) + \Gamma u(1)) \\
 &= D\Phi^2 x(0) + D\Phi\Gamma u(0) + D\Gamma u(1)
 \end{aligned} \tag{2.3}$$

Siden virkningen av u på x er kjent kan man sette $u(k) = 0$, og dermed kan ligningene generaliseres til ligning 2.4.

$$y(n-1) = D\Phi^{n-1}x(0) \tag{2.4}$$

Dette kan settes på matrisform som i ligning 2.5.

$$\begin{bmatrix} y \\ y(1) \\ y(2) \\ \vdots \\ \vdots \\ y(n-1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D \\ D\Phi \\ D\Phi^2 \\ \vdots \\ \vdots \\ D\Phi^{n-1} \end{bmatrix} x(0) = \mathcal{O}x(0) \tag{2.5}$$

Ligning 2.5 har kun en løsning dersom rangen til observerbarhetsmatrisen \mathcal{O} er lik systemets orden, n , så kravet for observerbarhet for lineære systemer er at \mathcal{O} har full rang, se ligning (2.6).

$$\text{rank}(\mathcal{O}) = \text{rank} \begin{bmatrix} D \\ D\Phi \\ D\Phi^2 \\ \vdots \\ \vdots \\ D\Phi^{n-1} \end{bmatrix} = n \tag{2.6}$$

2.2 Strukturell identifiserbarhet

2.1.2 Observerbarhet for ulineære systemer

Et ulineært system kan skrives som i ligning (2.7):

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) &= f(x(t), u(t), p) \\ y(t) &= g(x(t), p) \\ x_0 &= x(t_0, p) \end{aligned} \tag{2.7}$$

hvor $x(t)$ er tilstandsvektoren, $u(t)$ er pådragsvektoren, $y(t)$ er utgangsvektoren, p er systemets parametervektor og x_0 er en vektor med systemets initialverdier.

Siden de deriverte av utgangen ikke kan beskrives på matriseform for ulineære systemer, må det defineres en ulineær versjon av observerbarhetsmatrisen, \mathcal{O}^{NL} . Til denne brukes *Lie-deriverte*. Den Lie-deriverte, av orden k , av måleligningen $g(x)$ med tanke på tilstandsligningen $f(x)$ er definert som:

$$\mathcal{L}_f^k g(x) = \frac{\partial \mathcal{L}_f^{k-1} g(x)}{\partial x} \cdot f(x) \tag{2.8}$$

Observerbarhetsmatrisen for ulineære systemer bygges så opp av de Lie-deriverte, som i ligning (2.9), hvor n er antall tilstander. Man ser i ligningen at matrisen bygges opp av de partiellderiverte av måleligningen og de Lie-deriverte av måleligningen opp til orden $n - 1$. Som for den lineære observerbarhetsmatrisen må rangen til \mathcal{O}^{NL} være lik systemets orden, n , for at systemet skal være observerbart.

$$\mathcal{O}^{NL} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x}(g(x)) \\ \frac{\partial}{\partial x}(\mathcal{L}_f g(x)) \\ \frac{\partial}{\partial x}(\mathcal{L}_f^2 g(x)) \\ \vdots \\ \frac{\partial}{\partial x}(\mathcal{L}_f^{n-1} g(x)) \end{bmatrix} \tag{2.9}$$

2.2 Strukturell identifiserbarhet

Strukturell identifiserbarhet er en annen modellegenskap som beskriver om det er mulig å finne systemets parametere basert på de tilgjengelige målingene. Forskjellen fra observerbarhet er altså at det er parametere som skal finnes istedenfor tilstander. Ved å sette parameterene til konstante tilstandsvariabler kan derimot strukturell identifiserbarhet regnes som et spesialtilfelle av observerbarhet. Dermed kan identifiserbarhetsmatrisen defineres likt som observerbarhetsmatrisen for

2.3 Kalmanfilter

ulineære system, bare med hensyn til antall parametre også. Matrisen blir som i ligning (2.10), hvor q er antall parametre.

$$\mathcal{O}_I^{NL} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x}(g(x)) \\ \frac{\partial}{\partial x}(\mathcal{L}_f g(x)) \\ \frac{\partial}{\partial x}(\mathcal{L}_f^2 g(x)) \\ \vdots \\ \frac{\partial}{\partial x}(\mathcal{L}_f^{n+q-1} g(x)) \end{bmatrix} \quad (2.10)$$

For at systemet skal være identifiserbart må rangen til \mathcal{O}_I^{NL} være lik systemets orden n .

2.3 Kalmanfilter

Kalmanfilter er en av de mest brukte metodene for tilstandsestimering. Filteret beregner et optimalt tilstandsestimat ved å, for hvert tidsskritt, få en minimal verdi på aposteriori-estimeringsavvikets varians [6]. For at Kalmanfilteret skal fungere optimalt antas det at systemet er påvirket av både prosessstøy, $v(k)$, og målestøy $w(k)$. Både prosessstøyen og målestøyen er *stokastisk* og har dermed forventningsverdier som i ligning (2.11) og (2.12):

$$E(v(k)) = m_v(k) = 0 \quad (2.11)$$

$$E(w(k)) = m_w(k) = 0 \quad (2.12)$$

og kovarianser som i ligning (2.13) og (2.14), hvor Q og R er kovariansmatrisene til støyen.

$$R_v(\tau, k) = E(v(k + \tau)v^T(k)) = Q(k)\delta(\tau) \quad (2.13)$$

$$R_w(\tau, k) = E(w(k + \tau)w^T(k)) = R(k)\delta(\tau) \quad (2.14)$$

Det antas også at $v(k)$ og $w(k)$ er ukorrelerte og initialtilstanden $x(0)$ er en stokastisk variabel med forventningsverdi som i ligning (2.15).

$$E(x(0)) = m_0 \quad (2.15)$$

2.3 Kalmanfilter

Da Kalmanfilteret ble utviklet på 1950- og 1960-tallet var det kun for lineære systemer, men i ettertid er det blitt utviklet både utvidet Kalmanfilter for ulineære systemer og augmentert Kalmanfilter for å ta inn flere parametre som tilstander. Ligningene til de ulike Kalmanfilterne er gjennomgått i de neste underkapitlene.

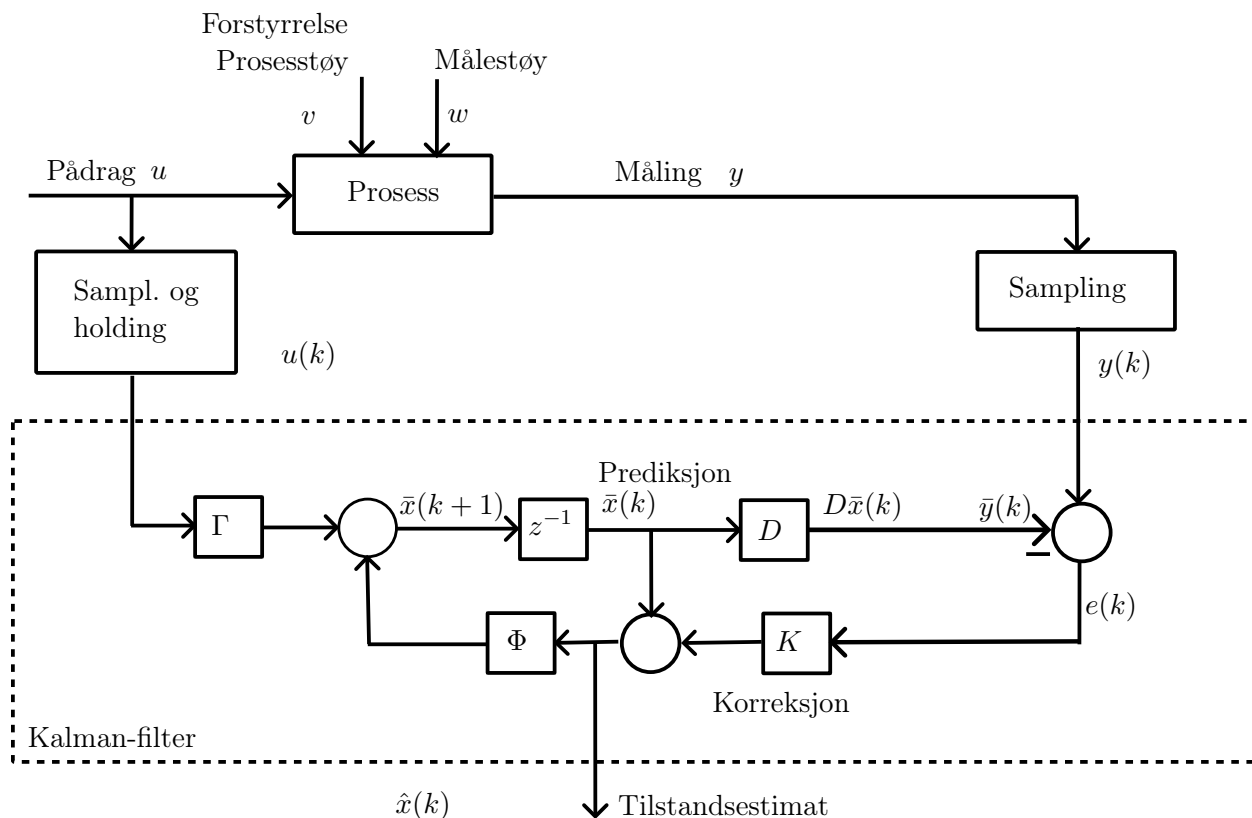
2.3.1 Kalmanfilter for lineære systemer

Et diskret Kalmanfilter beregner tilstandsestimat for et system gitt som i ligning 2.16 og 2.17:

$$x(k+1) = \Phi(k)x(k) + \Gamma(k)u(k) + \Omega(k)v(k) \quad (2.16)$$

$$y(k) = D(k)x(k) + w(k) \quad (2.17)$$

hvor x er tilstandsvektoren, y er målingene, u er pådragsvektoren, v er prosesstøyen, w er målestøyen, Φ er transmisjonsmatrisen, Γ er pådragsmatrisen, Ω er prosesstøymatrisen og D er målematrisen. Figur 2.1 viser strukturen for et Kalmanfilter, og ligningene er også gjengitt i ligning (2.18)-(2.24). Ligningene beregner det optimale tilstandsestimatet for tidsskritt k .



Figur 2.1: Struktur for en prosess med Kalmanfilter.

Apriori-estimatet, for neste tidsskritt, beregnes som i ligning (2.18).

2.3 Kalmanfilter

$$\bar{x}(k+1) = \Phi\hat{x}(k) + \Gamma u(k) \quad (2.18)$$

Ligning (2.19) viser hvordan måleestimatet for neste tidsskritt beregnes.

$$\bar{y}(k+1) = D(k+1)\bar{x}(k+1) \quad (2.19)$$

Måleestimatet brukes deretter til å beregne residualet, som i ligning (2.20).

$$e(k) = y(k) - \bar{y}(k) = y(k) - D(k)\bar{x}(k) \quad (2.20)$$

Apriori-estimeringsavvikets kovariansmatrise, $\bar{P}(k+1)$, for neste tidsskritt, finnes som i ligning (2.21).

$$\bar{P}(k+1) = \Phi\hat{P}(k)\Phi^T(k) + \Omega(k)Q(k)\Omega^T(k) \quad (2.21)$$

$\bar{P}(k+1)$ brukes deretter til å regne ut aposteriori-estimeringsavvikets kovariansmatrise, for neste tidsskritt. Utregningen er vist i ligning (2.22).

$$\hat{P}(k+1) = [I - K(k+1)D(k+1)]\bar{P}(k+1)[I - K(k+1)D(k+1)]^T + K(k+1)R(k+1)K^T(k+1) \quad (2.22)$$

Så finnes Kalman-filterforsterkningen, for neste tidsskritt, som i ligning (2.23). Kalman-filterforsterkningen bestemmer hvor mye vekt som skal legges på målingene, og er slik med på å bestemme balansen mellom å stole på modellen og å ta hensyn til nye målinger.

$$K(k+1) = \bar{P}(k+1)D(k+1)^T[D(k+1)\bar{P}(k+1)D(k+1)^T + R(k+1)]^{-1} \quad (2.23)$$

Til slutt finnes aposteriori-estimatet, $\hat{x}(k)$ som i ligning (2.24). Aposteriori-estimatet er tilstands-estimatet, og man ser i figur 2.1 at det er utgangen fra Kalmanfilteret.

$$\hat{x}(k) = \bar{x}(k) + K(k)e(k) \quad (2.24)$$

Begge de to kovariansmatrisene, både for apriori- og aposteriori-estimeringsavviket, uttrykker hvor sikkert tilstandsestimatet er. Jo mindre $\hat{P}(k)$ og $\bar{P}(k)$ er, jo mindre varians er det i estimeringsavviket, og jo sikrere er estimatet.

2.3.2 Augmentert Kalmanfilter

Når man anvender et Kalmanfilter på et system som er gitt som i ligning (2.7) så er det i utgangspunktet tilstandene i tilstandsvektoren $x(t)$ som blir estimert. Hvis man har lyst til å estimere parametrene i parametervektoren p i tillegg så må man bruke et augmentert Kalmanfilter. Da utvider man tilstandsvektoren til å inneholde parametrene også, i tillegg til de originale tilstandene. Det endrer ikke på ligning (2.18)-(2.24), annet enn størrelsen på vektorene og matrisene.

2.3.3 Utvidet Kalmanfilter (EKF)

Kalmanfilteret ble originalt utviklet for lineære systemer, men modeller for virkelige systemer er som regel ulineære. Da må også filterligningene justeres deretter. Ligningene for aposteriori-estimatet (ligning (2.24)), apriori-estimeringsavvikets kovariansmatrise (ligning (2.21)), Kalmanfilterforsterkningen (ligning (2.23)) og aposteriori-estimeringsavvikets kovariansmatrise (ligning (2.22)) er like som for lineært Kalmanfilter.

Apriori-estimatet, for neste tidsskritt, beregnes som i ligning (2.25).

$$\bar{x}(k+1) = f[\hat{x}(k), u(k), \dots] \quad (2.25)$$

Ligning (2.26) viser hvordan måleestimatet for neste tidsskritt beregnes.

$$\bar{y}(k+1) = g[\bar{x}(k+1)] \quad (2.26)$$

Deretter beregnes residualet som i ligning (2.27).

$$e(k) = y(k) - \bar{y}(k) = y(k) - g[\bar{x}(k)] \quad (2.27)$$

Kapittel 3

Tidligere arbeid

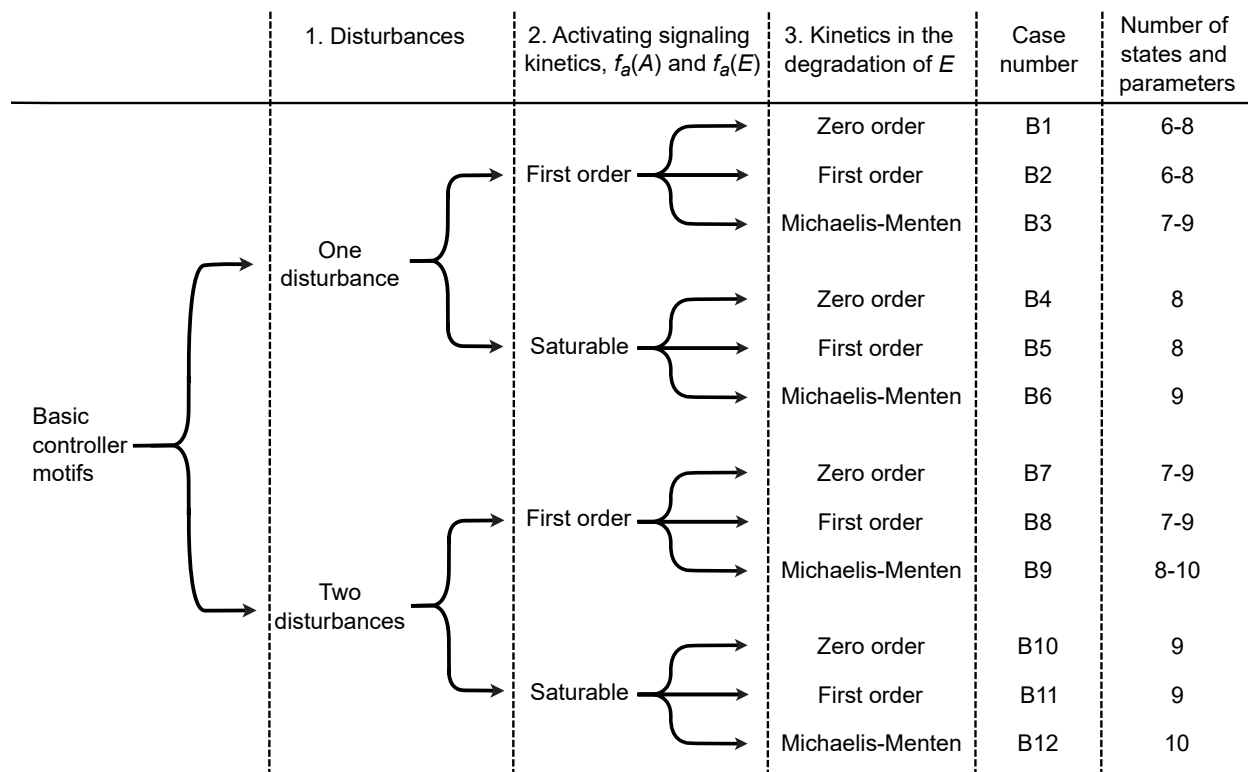
Dette kapitlet er basert på [7], for å gi et innblikk i arbeidet som ble gjort der.

Kontrollmotivene som ble presentert i kapittel 1 er generiske modeller på biologiske systemer, som blir brukt for å få innsikt i oppførselen og funksjonaliteten til disse systemene [1][8][10]. Kvaliteten på modeller er avhengig av både modellens struktur og parameterverdier, men i biologien er det et kjent problem at tilgjengelige målinger ofte er svært begrenset eller trenger veldig dyrt utstyr [9][11]. Dette fører til at det er nødvendig å optimalisere design av modeller, slik at man kun bruker de målingene som er nødvendige, og det er dette som ble undersøkt i artikkel [7]. For å bestemme dette minst mulige settet av målinger er konseptet *strukturell identifiserbarhet* nyttig. Konseptet sier at dersom en modell er strukturelt identifiserbar betyr det at alle parametre er identifiserbare, og det tilsvarer at parametrenes verdier kan finnes ved å observere modellens utganger [2]. I en strukturell uidentifiserbar modell er typisk en undergruppe av parametrene uidentifiserbare, noe som antyder at disse parametrene er korrelerte.

Tilgjengelige målinger fra kontrollmotivene er hovedsakelig konsentrasjonen av de modellerte stoffene (A og E), men siden våt-labeksperimentering også kan inneholde målinger av flukser i tillegg til eller istedenfor konsentrasjonsmålinger er fluksmålinger også inkludert. For å inkludere slike fluksmålinger i modellen ble det brukt to ulike metoder, som blir forklart i de to neste underkapitlene. Metodene ble brukt for å undersøke strukturell identifiserbarhet av kontrollmotivene for alle mulige kombinasjoner av konsentrasjon- og fluksmålinger med en eller to målinger som modellutgang.

I tillegg til å undersøke hvordan valg av måling påvirket identifiserbarheten ble det også sett på hvordan den ble påvirket av kompleksiteten til modellen. Det ble variert på antall forstyrrelser i modellen, modelleringen av de aktiverende signalene mellom A og E og kinetikken i degradasjonen av E . Dette resulterte i tolv ulike scenarier for de åtte kontrollmotivene, og de er illustrert i figur 3.1.

3.1 Utvide en modell med fluks lagt til som tilstand (metode 1)



Figur 3.1: De ulike scenarioene som ble analysert for de åtte kontrollmotivene i artikkelen om strukturell identifiserbarhet. Figuren er hentet fra [7].

3.1 Utvide en modell med fluks lagt til som tilstand (metode 1)

For modeller av biologiske prosesser består utgangssignalene y av interne tilstander x , som typisk er konsentrasjoner av kjemiske arter, som proteiner eller metabolitter. Siden flukser vanligvis ikke er tilstandsvariabler, er fremgangsmåten i metode 1 å utvide tilstandsvektoren x ved å inkludere fluksen som en ekstra tilstand, som dermed er tilgjengelig som en måling i y . For at den strukturelle identifiserbarheten ikke skal bli påvirket av dette, blir en parameter eliminert fra det aktuelle fluksuttrykket. Parameteren som blir eliminert er som regel ratekonstanten, som blir substituert med den nye tilstandsvariabelen. Dermed er antall tilstander og parametre som skal bli identifisert opprettholdt.

Metoden blir illustrert ved å bruke kontrollmotiv 2 fra figur 1.1, som er gjengitt i panel A i figur 3.2. I eksempelet blir syntesefluksen j_c lagt til som en tilstand. Det originale uttrykket for j_c er gitt som i ligning (3.1), hvor k_c er en ratekonstant og K_i^E er en inhiberingskonstant.

$$j_c(t) = k_c \cdot \frac{K_i^E}{K_i^E + E(t)} \quad (3.1)$$

Ved å ta den deriverte av j_c med tanke på tid finnes rateligningen til ligning (3.2),

3.1 Utvide en modell med fluks lagt til som tilstand (metode 1)

$$\frac{dj_c}{dt} = \frac{-k_c \cdot K_i^E}{(K_i^E + E(t))^2} \cdot \frac{dE(t)}{dt} \quad (3.2)$$

hvor $\frac{dE(t)}{dt}$ er rateligningen for mengden E , og den er gitt som i ligning (3.3).

$$\frac{dE(t)}{dt} = k_s \cdot A(t) - k_d \quad (3.3)$$

Når man løser ligning (3.1) for k_c får man uttrykket i ligning (3.4).

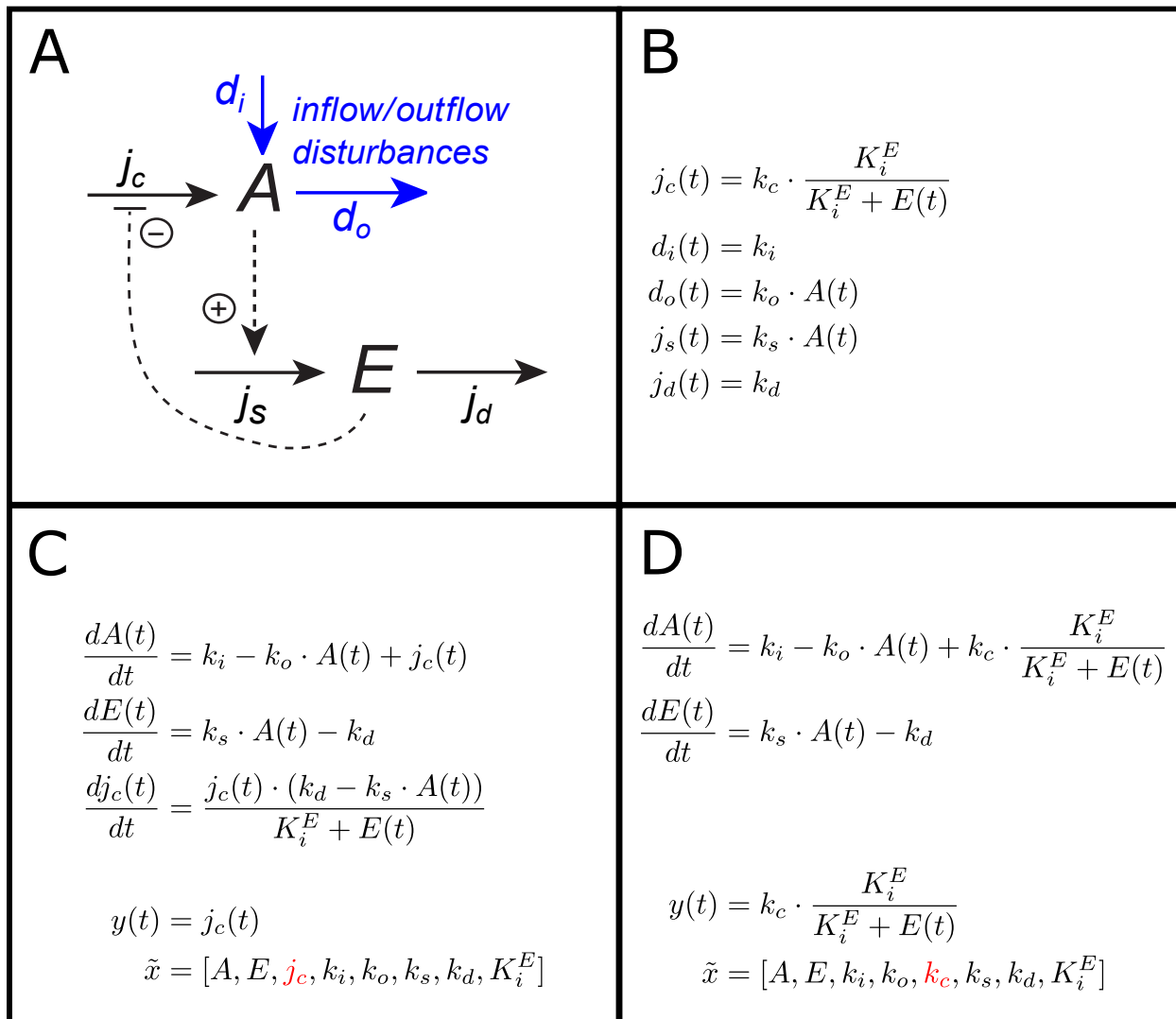
$$k_c = \frac{j_c(t) \cdot (K_i^E + E(t))}{K_i^E} \quad (3.4)$$

Vi substituerer ligning (3.3) og (3.4) inn i ligning (3.2) og finner den nye rateligningen for j_c til å være ligning (3.5).

$$\frac{dj_c}{dt} = \frac{j_c(t) \cdot (k_d - k_s \cdot A(t))}{K_i^E + E(t)} \quad (3.5)$$

Nå er ikke lenger parameteren k_c en del av modellen, og det er også vist i figur 3.2 panel C, hvor j_c er lagt til i tilstandsvektoren istedenfor k_c . Siden j_c nå er i tilstandsvektoren x kan den bli satt som modellutgangen y , og denne metoden kan bli brukt for å inkludere hvilken som helst fluks i tilstandsvektoren til modellen.

3.2 Inkludere fluksuttrykk eksplisitt i målt utgang (metode 2)



Figur 3.2: Sammenligning av metode 1 og metode 2 for å legge til måling av fluks. Panel A viser skjematisk framstilling av kontrollmotiv 2. Panel B er tilhørende fluksligninger. Panel C og D viser henholdsvis metode 1 og metode 2 for å inkludere fluksmålinger som utgang fra modellen. Figuren er hentet fra [7].

3.2 Inkludere fluksuttrykk eksplisitt i målt utgang (metode 2)

Den alternative metoden for å inkludere fluksmålinger som utganger, er å bruke ligningen for fluksen direkte i ligningen for måleutgangen y . Dette gjør at måleligningen kan bli mer kompleks, men påvirker ikke tilstandsvektoren x slik som metode 1 gjør.

Metode 2 er også illustrert med kontrollmotiv 2 i figur 3.2. Panel D viser rateligningene for mengden A og E , og uttrykket for y er nå fluksuttrykket for j_c fra panel B. På samme måte som for metode 1, kan alle flukser inkluderes i utgangen y på denne måten.

3.3 Resultater fra strukturell identifiserbarhetsartikkel

Det kontrollmotivet som ble analysert i denne oppgaven er kontrollmotiv 1, med to forstyrrelser, første ordens aktiveringssignal mellom A og E , og både nulte ordens og første ordens uttrykk for degradasjonen av E (se underkapittel 1.2 og ligning (1.3), (1.4), (1.6) og (1.7)). Dette tilsvarer scenario B7 og B8 i figur 3.1. Resultatene for scenario B8 er vist i figur 3.3, med rangen til identifiserbarhetsmatrisen for hver kombinasjon av måling og for hvert kontrollmotiv. Nederste rad viser en poengscore for hvert kontrollmotiv, som illustrerer hvor ofte det kontrollmotivet er identifiserbart. Poengscoren er regnet ut ved å ta antallet forekomster kontrollmotivet er identifiserbart og dele på hvor mange forekomster som er analysert.

I figur 3.3 er det brukt to ulike gråskalafarger for å illustrere om målingene er relatert til A , lys grå, eller E , mørk grå. Når rangen til identifiserbarhetsmatrisen er full betyr det at modellen er strukturelt identifiserbar, og cellen er da markert grønn. Når modellen er strukturelt uidentifiserbar er cellen markert gul eller rød. Rød er bare brukt der rangen er en eller to, og det tilsvarer at bare de valgte målingene er observerbare.

Figur 3.3 viser at modellen for kontrollmotiv 1 blir klassifisert som strukturelt identifiserbar i linje 3, 12, 13, 14, 15, 16, 22, 24, 25, 26 og 27. Felles for disse linjene er at det er to målinger i modellen, hvor en av målingene er relatert til A og den andre er relatert til E .

3.3 Resultater fra strukturell identifiserbarhetsartikkel

		Scenario B8								
Motiv		1	2	3	4	5	6	7	8	
Måling av mengder										
1	<i>A</i>		6	7	7	8	6	7	7	8
2	<i>E</i>		6	7	6	7	6	7	7	8
3	<i>A</i>	<i>E</i>	7	8	8	9	7	8	8	9
Måling av en fluks										
4	d_i		1	1	1	1	1	1	1	1
5	d_o		6	7	7	8	6	7	7	8
6	j_c		6	6	6	7	6	7	7	8
7	j_s		1	7	6	1	6	1	1	8
8	j_d		6	7	6	7	6	7	7	8
Måling av en mengde og en fluks										
9	<i>A</i>	d_i	6	7	7	8	6	7	7	8
10	<i>A</i>	d_o	6	7	7	8	6	7	7	8
11	<i>A</i>	j_c	6	7	7	8	6	7	7	8
12	<i>A</i>	j_s	7	8	8	9	7	8	8	9
13	<i>A</i>	j_d	7	8	8	9	7	8	8	9
14	<i>E</i>	d_i	7	8	7	8	7	8	8	9
15	<i>E</i>	d_o	7	8	8	9	7	8	8	9
16	<i>E</i>	j_c	7	8	7	8	7	8	8	9
17	<i>E</i>	j_s	6	7	6	7	6	7	7	8
18	<i>E</i>	j_d	6	7	6	7	6	7	7	8
Måling av to flukser										
19	d_i	d_o	6	7	7	8	6	7	7	8
20	d_i	j_c	6	7	7	8	6	7	7	8
21	d_i	j_s	2	8	7	2	7	2	2	9
22	d_i	j_d	7	8	7	8	7	8	8	9
23	d_o	j_c	6	7	7	8	6	7	7	8
24	d_o	j_s	7	8	8	9	7	8	8	9
25	d_o	j_d	7	8	8	9	7	8	8	9
26	j_c	j_s	7	8	7	8	7	8	8	9
27	j_c	j_d	7	8	7	8	7	8	8	9
28	j_s	j_d	6	7	6	7	6	7	7	8
Poeng			0,39	0,43	0,21	0,21	0,43	0,39	0,39	0,43

Figur 3.3: Rangene til identifiserbarhetsmatrisen for alle kontrollmotiv og målinger for scenario B8. Figuren er hentet fra [7].

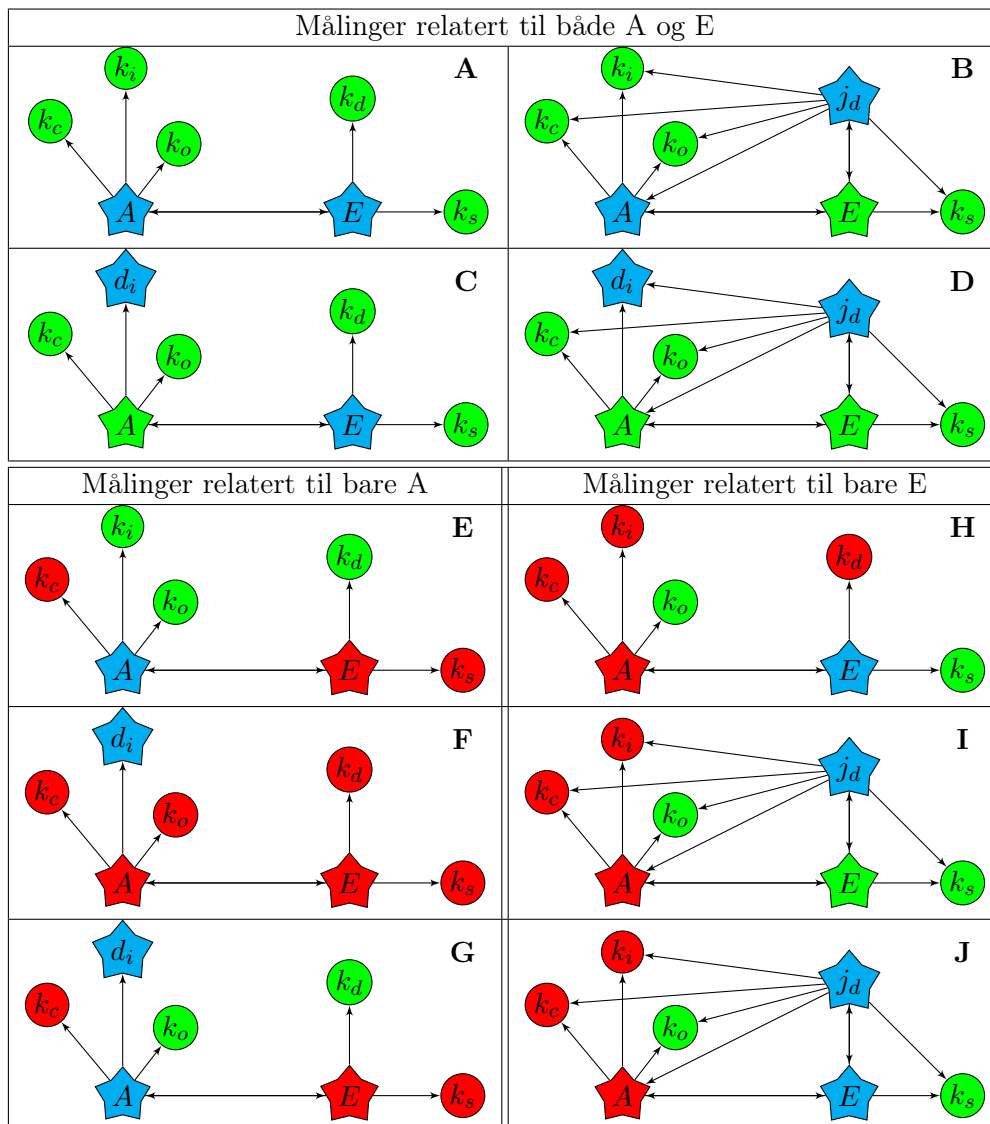
Artikkel [7] viste også frem resultater grafisk, for å vise sammenhengen mellom målinger og identifiserbare/uidentifiserbare parametere. Figur 3.4 viser denne sammenhengen, men målingene er begrenset til kombinasjoner av *A*, *E*, d_i og j_d . Linjene som er med fra figur 3.3 er:

- Strukturelt identifiserbare kombinasjoner av målinger relatert til både *A* og *E*: linje 3, 13, 14

3.3 Resultater fra strukturell identifiserbarhetsartikkel

og 22.

- Strukturelt uidentifiserbare kombinasjoner av målinger relatert bare til A : linje 1, 4 og 9.
- Strukturelt uidentifiserbare kombinasjoner av målinger relatert bare til E : linje 2, 8 og 18.



Figur 3.4: Figurer av utvalgte kombinasjoner av motiv 1, scenario B8. Figurene viser sammenhengen mellom tilstander (stjerner) og systemparametere (sirkler). En pil fra node X til node Y indikerer at Y er i ligningen til X. Målinger er markert i blått, identifiserbare parametere/tilstander er markert i grønt og uidentifiserbare parametere/tilstander er markert i rødt. Figuren er hentet fra [7].

Som figur 3.4 også viser er det nødvendig med målinger relatert til både A og E for å oppnå strukturell identifiserbarhet. Man ser også at k_c kun er identifiserbar ved måling relatert til begge stoffene. Når man sammenligner panel E og G og H og J, ser man at å legge til en fluksmåling

3.3 Resultater fra strukturell identifiserbarhetsartikkel

relatert til samme stoff ikke øker antallet identifiserbare parametere. En annen observasjon er at k_o er identifiserbar for nesten alle målekombinasjoner, mens hverken k_d eller k_s er identifiserbare fra målinger relatert til A . Når d_i blir målt alene er det kun d_i som er identifiserbar, noe som er rimelig siden d_i er en konstant fluks som er uavhengig av andre variabler i modellen.

I denne oppgaven skal begge metodene for å inkludere flukser i målingene benyttes på kontrollmotiv 1. Av de ulike scenarioene i figur 3.1 er det scenario B7 og B8 som blir analysert og målekombinasjonene fra figur 3.4.

Kapittel 4

Lineær modell

I figur 4.1 er det en oversikt over de ulike versjonene av Kalmanfilter som er laget. De er organisert etter om kontrollmotivet er lineært eller ulineært, om Kalmanfilteret er lineært, augmentert og/eller utvidet, hvor mange tilstander modellen har og hvilke parametre som er modellert som målinger. Dette kapitlet tar for seg versjonene der kontrollmotivet er lineært, versjon 1-4. Målet for disse fire versjonene var å starte med den helt grunnleggende tilstandsrommodellen og deretter augmentere modellen for å analysere om det er mulig å estimere de nye tilstandene.

	Kontrollmotiv	Kalmanfilter	Antall tilstander	Målinger	Versjon	
Motiv 1	Lineært	Lineært	2	$y = [A]$	1	
		Augmentert		3	$y = [A]$	2
				3	$y = [A]$	3
				4	$y = [A]$	4
	Ulineært	Augmentert og utvidet		7	$y = [A, E]^T$	5
				7	$y = [A, j_d]^T$	6
				7	$y = [d_i, E]^T$	7
				7	$y = [d_i, j_d]^T$	8
				7	$y = [A]$	9
				7	$y = [d_i]$	10
				7	$y = [A, d_i]^T$	11
				7	$y = [E]$	12
				7	$y = [j_d]$	13
				7	$y = [E, j_d]^T$	14

Figur 4.1: Oversikt over de ulike versjonene av modellen. Figuren er inndelt etter om kontrollmotivet er lineært eller ulineært, om Kalmanfilteret er lineært, utvidet eller augmentert, hvor mange tilstander det er i modellen og hvilke parametre som blir målt.

4.1 Modellering versjon 1

Kontrollmotiv 1 ble gjennomgått i kapittel 1 og modelligningene er gjengitt i ligning (4.1) og (4.2) for enkelhets skyld.

$$\begin{aligned}\dot{A}(t) &= j_c(t) + d_i(t) - d_o(t) \\ &= k_c \cdot E(t) + k_i - k_o \cdot A(t)\end{aligned}\tag{4.1}$$

$$\begin{aligned}\dot{E}(t) &= j_s(t) - j_d(t) \\ &= k_s - k_d \cdot A(t) \cdot f(E)\end{aligned}\tag{4.2}$$

For å analysere kontrollmotivet med en lineær modell ble degradasjonsfluksen til E modellert med $f(E) = 1$. Det gjelder for versjon 1-4. Valg av målinger er også felles for de fire modellene med lineært kontrollmotiv, og det er konsentrasjonen av stoffet A . Følgelig er målevektoren, y , gitt av ligning (4.3).

$$y(t) = A(t)\tag{4.3}$$

For å få modellen over på diskret form, for å kunne bruke ligningene fra underkapittel 2.3.1, ble Eulers forovermetode brukt. Da finnes transmisjonsmatrisen Φ som i ligning (4.4), pådragsmatrisen Γ som i ligning (4.5) og prosesstøyen Ω som i ligning (4.6). S er gitt som i ligning (4.7), hvor T er samplingstiden. Målematrisen D er lik både på kontinuerlig og diskret form.

$$\Phi(k) = I + AS\tag{4.4}$$

$$\Gamma(k) = SB_u\tag{4.5}$$

$$\Omega(k) = SB_v\tag{4.6}$$

$$S = IT\tag{4.7}$$

4.1 Modellering versjon 1

Fra figur 4.1 ser man at versjon 1 har to tilstander i tilstandsrommodellen, x_1 og x_2 . Ved å studere modelligningene ((4.1) og (4.2)) finner man at mengden A og E skal modelleres som tilstander:

$$x(t) = \begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A(t) \\ E(t) \end{bmatrix}\tag{4.8}$$

4.2 Modellering versjon 2

d_i er den synteseffluksen inn til A som blir modellert som en forstyrrelse i kontrollmotivet, og derfor blir ratekonstanten dens, k_i , modellert som et pådrag til modellen. k_s , er ratekonstanten til synteseffluksen til E , j_s , og blir derfor modellert som det andre pådraget. k_s er også med å setter settpunktet.

$$u = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k_i \\ k_s \end{bmatrix} \quad (4.9)$$

Fra modelligningene kan da tilstandsrommodellen settes opp på matrisiform som i ligning (4.10) og (4.11), hvor $v(t)$ og $w(t)$ er henholdsvis prosess- og målestøyen.

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) &= \begin{bmatrix} -k_o & k_c \\ -k_d & 0 \end{bmatrix} x(t) + \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} u + \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} v(t) \\ &= Ax(t) + B_u u + B_v v(t) \end{aligned} \quad (4.10)$$

$$\begin{aligned} y(t) &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} x(t) + w(t) \\ &= Dx(t) + w(t) \end{aligned} \quad (4.11)$$

Modellmatrisene for versjon 1 ble funnet med Eulers forovermetode, ligning (4.4), (4.5), (4.6) og (4.7), og er vist i ligning (4.12), (4.13) og (4.14).

$$\Phi(k) = \begin{bmatrix} 1 - k_o \cdot T & k_c \cdot T \\ -k_d \cdot T & 1 \end{bmatrix} \quad (4.12)$$

$$\Gamma(k) = \begin{bmatrix} T & 0 \\ 0 & T \end{bmatrix} \quad (4.13)$$

$$\Omega(k) = \begin{bmatrix} T & 0 \\ 0 & T \end{bmatrix} \quad (4.14)$$

4.2 Modellering versjon 2

I versjon 2 blir Kalmanfilteret augmentert med en ekstra tilstand, x_3 , slik at tilstandsvektoren nå er gitt som i ligning (4.15). I ligning (4.1) ser man at k_i står alene uten tidsvarierende variabler i leddet, og det er derfor vi har valgt å augmentere med den, slik at modellen fremdeles er lineær.

$$x(t) = \begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \\ x_3(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A(t) \\ E(t) \\ k_i \end{bmatrix} \quad (4.15)$$

4.3 Modellering versjon 3

Når k_i er satt som en tilstand blir pådragsvektoren redusert til bare et pådrag, $u = k_s$. Det er fremdeles A som blir målt, så tilstandsrommodellen blir som i ligning (4.16) og (4.17), hvor det er brukt Eulers forovermetode for å få matrisene på diskret form. k_i er en konstant og rateligningen for den er dermed lik null: $\dot{x}_3 = 0$.

$$\begin{aligned}x(k+1) &= \begin{bmatrix} 1 - k_o \cdot T & k_c \cdot T & T \\ -k_d \cdot T & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} x(k) + \begin{bmatrix} 0 \\ T \\ 0 \end{bmatrix} u + \begin{bmatrix} T & 0 & 0 \\ 0 & T & 0 \\ 0 & 0 & T \end{bmatrix} v(k) \\ &= \Phi x(k) + \Gamma u + \Omega v(k)\end{aligned}\tag{4.16}$$

$$\begin{aligned}y(k) &= [1 \ 0 \ 0] x(k) + w(k) \\ &= D x(k) + w(k)\end{aligned}\tag{4.17}$$

4.3 Modellering versjon 3

For den tredje versjonen er det også tre tilstander, men nå er den tredje tilstanden konstanten k_s , vist i ligning (4.18). Konstanten k_i er igjen modellert som pådrag til Kalmanfilteret, $u = k_i$.

$$x(t) = \begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \\ x_3(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A(t) \\ E(t) \\ k_s \end{bmatrix}\tag{4.18}$$

Som før er det A som blir målt og tilstandsrommodellen er vist i ligning (4.19) og (4.20).

$$\begin{aligned}x(k+1) &= \begin{bmatrix} 1 - k_o \cdot T & k_c \cdot T & 0 \\ -k_d \cdot T & 1 & T \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} x(k) + \begin{bmatrix} T \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} u + \begin{bmatrix} T & 0 & 0 \\ 0 & T & 0 \\ 0 & 0 & T \end{bmatrix} v(k) \\ &= \Phi x(k) + \Gamma u + \Omega v(k)\end{aligned}\tag{4.19}$$

$$\begin{aligned}y(k) &= [1 \ 0 \ 0] x(k) + w(k) \\ &= D x(k) + w(k)\end{aligned}\tag{4.20}$$

4.4 Modellering versjon 4

Den siste lineære versjonen augmenterer Kalmanfilteret med to ekstra tilstander fra grunnmodellen. Nå er tilstandsvektoren gitt som i ligning (4.21).

$$x(t) = \begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \\ x_3(t) \\ x_4(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A(t) \\ E(t) \\ k_i \\ k_s \end{bmatrix} \quad (4.21)$$

Nå er det ikke lenger noen pådragsvektor inn til Kalmanfilteret, i og med at begge de tidligere pådragene er modellert som tilstander. Igjen brukes Eulers forovermetode for å diskretisere systemet, og tilstandsrommodellen er som i ligning (4.22) og (4.23).

$$\begin{aligned} x(k+1) &= \begin{bmatrix} 1 - k_o \cdot T & k_c \cdot T & T & 0 \\ -k_d \cdot T & 1 & 0 & T \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} x(k) + \begin{bmatrix} T & 0 & 0 & 0 \\ 0 & T & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & T \end{bmatrix} v(k) \\ &= \Phi x(k) + \Omega v(k) \end{aligned} \quad (4.22)$$

$$\begin{aligned} y(k) &= [1 \quad 0 \quad 0 \quad 0] x(k) + w(k) \\ &= D x(k) + w(k) \end{aligned} \quad (4.23)$$

4.5 Resultater lineær modell

For å evaluere resultatene til modellene ble det gjort både en analytisk utregning av observerbarhetsmatrisen og en visuell analyse av de estimerte tilstandene for alle versjonene. I kapittel 2 ble det vist hvordan man finner observerbarhetsmatrisen for både lineære og ulineære systemer, og at for at et system skal klassifiseres som observerbart må rangen til matrisen være lik systemets orden.

For å regne ut rangen til observerbarhetsmatrisene ble det laget et enkelt *Matlab*-skript, som setter opp matrisene symbolsk og gir ut rangen. Tabell 4.1 viser hva den utregnede rangen ble for hver av Kalmanfilterversjonene for det lineære kontrollmotivet.

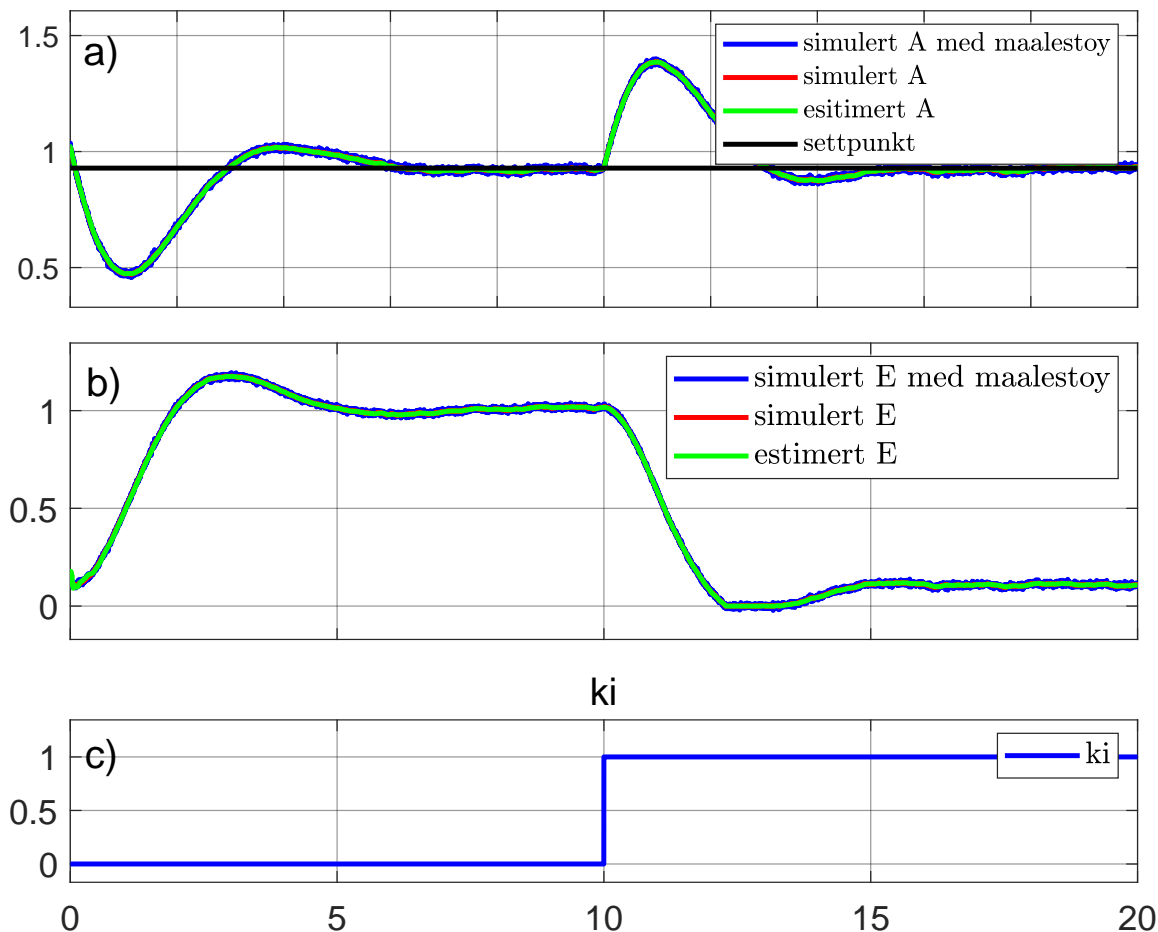
Versjon	Systemets orden	$rank(\mathcal{O})$
1	2	2
2	3	2
3	3	3
4	4	3

Tabell 4.1: Utregnet rang på observerbarhetsmatrisen for hver av de lineære Kalmanfilterversjonene.

For at et system skal være observerbart må rangen til observerbarhetsmatrisen være lik systemets orden. Tabellen viser at versjon 1 og 3 fikk full rang, og dermed forventes det at tilstandene i de versjonene vil være estimerbare. For versjon 2 og 4 derimot ble ikke rangen lik systemets orden, og det kan antas at de ikke vil klare å estimere alle parametrene. Vi vil nå gå gjennom simuleringene for de ulike lineære versjonene.

4.5.1 Versjon 1 - Resultater

Figur 4.2 viser simuleringen av versjon 1. Her er det lagt inn et steg i k_i for å se om Kalmanfilteret klarer å estimere riktig ved endring i forstyrrelsen til kontrollmotivet. Tilstandene A og E er også satt til å starte utenfor arbeidspunktet, slik at det blir et innsvingningsforløp i starten av simuleringen.



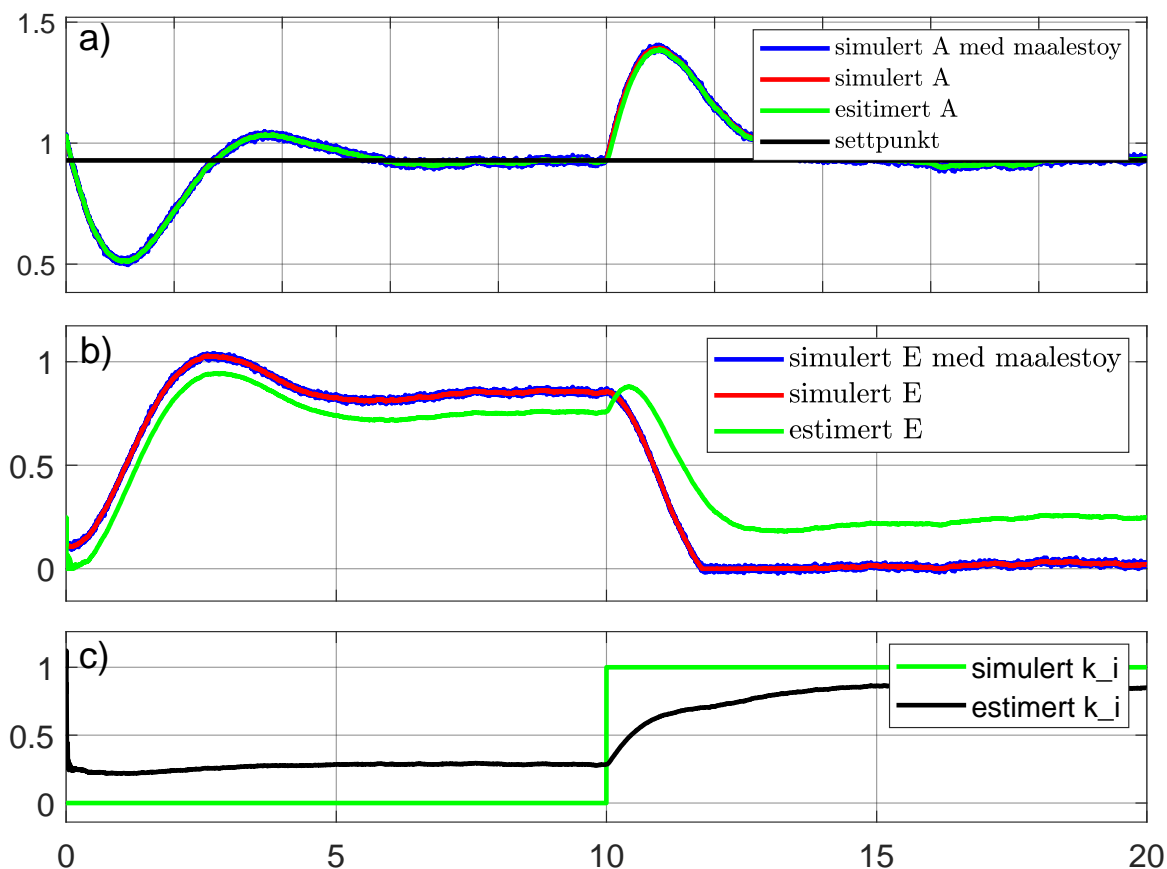
Figur 4.2: En simulering av lineært kontrollmotiv: versjon 1.

Man ser i figuren at Kalmanfilteret klarer å estimere begge tilstandene, fordi den estimerte av både A og E følger den simulerte responsen. Dette stemmer også med resultatet i tabell 4.1, hvor observertbarhetsmatrisen til versjon 1 fikk full rang. Dette tilsvarer at begge tilstandene er observerbare.

4.5 Resultater lineær modell

4.5.2 Versjon 2 - Resultater

Simuleringen av versjon 2 er vist i figur 4.3. Her er det også lagt inn et steg i k_i for å ha en forstyrrelse i kontrollmotivet, men k_i er ikke lenger modellert som et pådrag inn til Kalmanfilteret. Det vil si at Kalmanfilteret ikke lenger har direkte informasjon om hvordan k_i oppfører seg, siden det nå skal estimere k_i som en av tilstandene.

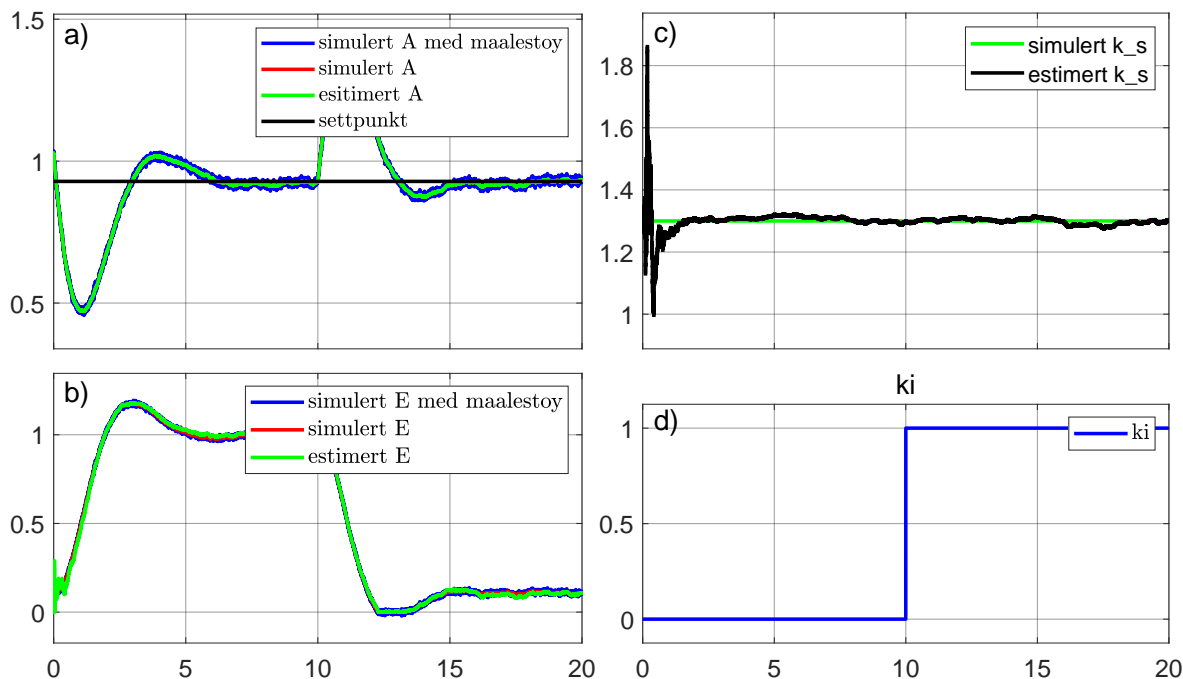


Figur 4.3: En simulering av lineært kontrollmotiv: versjon 2.

I panel a) i figur 4.3 ser man at den estimerte av A klarer å følge den simulerte, og siden det er A som måles er det naturlig. Men panel b) og c) viser at Kalmanfilteret ikke klarer å estimere hverken E eller k_i . Dette stemmer også overens med resultatet i tabell 4.1, hvor rangen til observerbarhetsmatrisen ble funnet til å være to. Systemets orden er tre, så det vil si at systemet ikke er observerbart.

4.5.3 Versjon 3 - Resultater

Figur 4.4 viser simuleringen for versjon 3 av Kalmanfilteret. Nå er igjen k_i modellert som et pådrag inn til filteret mens k_s er modellert som den tredje tilstanden som skal estimeres. Det er fremdeles lagt inn et steg i k_i og A og E starter utenfor arbeidspunktet.



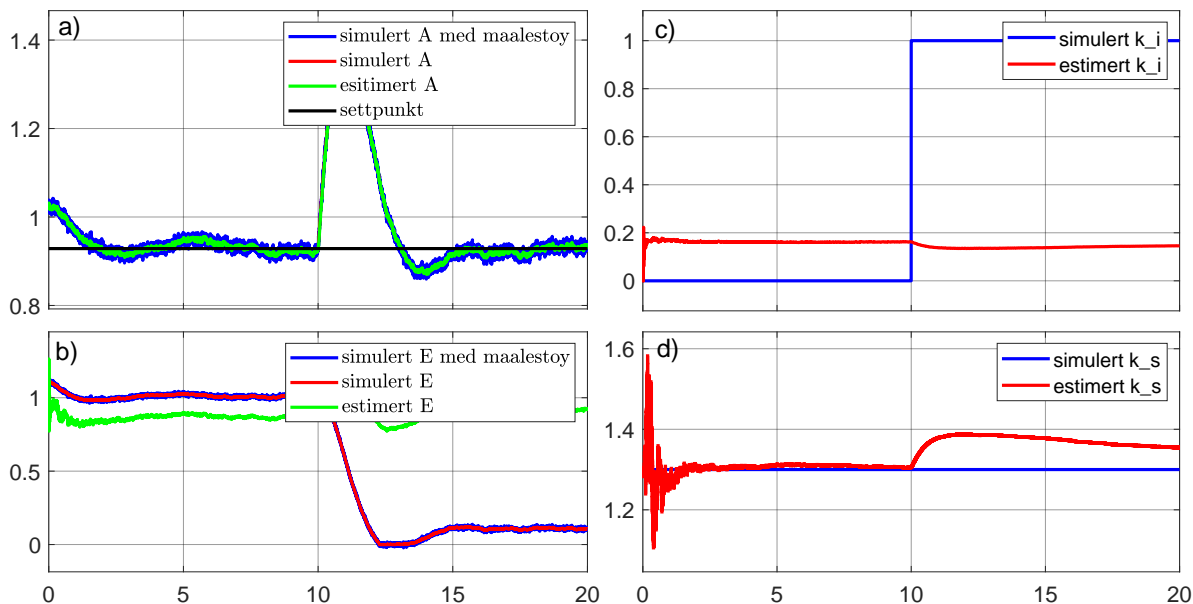
Figur 4.4: En simulering av lineært kontrollmotiv: versjon 3.

Panel a), b) og c) viser altså de tre tilstandene som skal estimeres for versjon 3, og her ser man at estimeringene klarer å følge de simulerte responsene. Tabell 4.1 viser at versjon 3 fikk full rang på observerbarhetsmatrisen, så det visuelle stemmer overens med utregningene også her.

4.5.4 Versjon 4 - Resultater

Simuleringen av den siste lineære versjonen er vist i figur 4.5. Nå er både k_i og k_s modellert som tilstander, og det er ikke lenger noe pådrag inn til filteret. I figur 4.5 ser man at det kun er estimeringen av A , i panel a), som klarer å følge den simulerte responsen. Dette stemmer også overens med utregningene for observerbarhetsmatrisen, da tabell 4.1 viser at den ikke har full rang for versjon 4.

4.5 Resultater lineær modell



Figur 4.5: En simulering av lineært kontrollmotiv: versjon 4.

I artikkelen om strukturell identifiserbarhet ble det funnet at E aldri var observerbar ved måling av A , men for versjon 1 og 3 er den det. Dette er fordi for de lineære modellene er nesten alle parametrene kjent for Kalmanfilteret, og det er også mye færre variabler som skal estimeres. For versjon 1 kjenner Kalmanfilteret til alle parametrene bortsett fra E og det er kun to tilstander som skal estimeres. I versjon 2 vet filteret om A , k_s , k_c , k_o og k_d , og det er tre tilstander som skal estimeres. For versjon 3 vet filteret om nesten de samme parametrene som for versjon 2, bare at k_s er byttet ut med k_i . I den siste versjonen vet Kalmanfilteret bare om A , k_c , k_o og k_d , og det er fire tilstander som skal estimeres.

En forklaring på hvorfor versjon 2 og 4 ikke klarer å estimere alle tilstandene kan finnes i rateligningene for A og E , ligning (4.1) og (4.2). Rateligningen til E inneholder parametrene k_s , k_d og A , og for versjon 2 er alle disse parametrene kjent for Kalmanfilteret. Men rateligningen for A inneholder parametrene k_c , E , k_i , k_o og A , og av disse er hverken E eller k_i kjent for filteret. Dermed klarer ikke filteret å løse ligningene for E eller k_i og de blir ikke estimert. Det samme gjelder for versjon 4 hvor både E og k_i er ukjente fra rateligningen til A , og k_s er ukjent fra rateligningen til E .

Kapittel 5

Ulineær modell

Oversikten over de ulike versjonene i figur 4.1 deler først versjonene inn i lineært og ulineært kontrollmotiv, og dette kapitlet tar for seg versjone med ulineært kontrollmotiv, versjon 5 til 14, hvor $f(E) = E(t)$. Her er det like mange tilstander i alle versjonene, men det varieres hvilke to parametre som modelleres som måling. Målet med dette er å undersøke hvordan valget av måling påvirker observerbarheten, og kunne sammenligne det med resultatene fra artikkelen om strukturell identifiserbarhet [7]. Resultatene fra den artikkelen er oppsummert i figur 3.4, og i figuren er de ulike versjonene delt inn i panel A til panel J. I figur 4.1 svarer versjon 5-14 til panel A-J, og ut dette kapitlet brukes heller panelnavnene på de ulike versjonene.

I underkapittel 3.1 og 3.2 ble det beskrevet to ulike metoder for å inkludere en fluks i en modell. For de versjonene som skal måle en fluks, altså panel B, C, D, F, G, I og J, ble begge metodene testet. I de to neste underkapitlene blir modellligningene gjennomgått for begge metodene.

5.1 Ligninger metode 1

Metode 1 innebærer å legge til en fluks som en egen tilstand i tilstandsrommodellen. De to fluksene som ble brukt som målinger i identifiserbarhetsartikkelen var j_d og d_i . For å legge til j_d som en tilstand må man snu om på rateligningen dens, slik at den deriverte av j_d ikke lenger er avhengig av k_d . Hvordan j_d er modellert for den ulineære versjonen av kontrollmotivet er gjengitt i ligning (5.1), og kan skrives om som i ligning (5.2).

$$j_d(t) = k_d \cdot A(t) \cdot E(t) \quad (5.1)$$

$$k_d = \frac{j_d}{A(t) \cdot E(t)} \quad (5.2)$$

Ved å ta den deriverte av ligning (5.1) og sette inn ligning (5.2) for k_d og rateligningene for A og

5.1 Ligninger metode 1

E , finner man den endelige rateligningen for j_d , som i ligning (5.3).

$$\begin{aligned}\frac{dj_d}{dt} &= k_d \cdot (A(t) \cdot \frac{dE(t)}{dt} + E(t) \cdot \frac{dA(t)}{dt}) \\ &= \frac{j_d}{A(t) \cdot E(t)} (A(t) \cdot \dot{E}(t) + E(t) \cdot \dot{A}(t)) \\ &= j_d \frac{\dot{E}(t)}{E(t)} + j_d \frac{\dot{A}(t)}{A(t)}\end{aligned}\tag{5.3}$$

Fra ligning (5.3) ser man at k_d er borte fra uttrykket, tilsvarende til k_c i illustreringen av metode 1 i underkapittel 3.1.

Den andre fluksen som blir tatt inn som måling, d_i , er modellert som i ligning (5.4). Siden fluksen er direkte lik k_i , som er en konstant, blir rateligningen for d_i lik null, og det vil dermed ikke være noen forskjell på metode 1 og 2 for denne fluksen.

$$d_i = k_i\tag{5.4}$$

Når Kalmanfilteret er augmentert med alle parametrene, og begge fluksene tas inn som tilstander, blir tilstandsvektoren som i ligning (5.5).

$$x(t) = \begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \\ x_3(t) \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \\ x_7(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A(t) \\ E(t) \\ d_i(t) \\ k_c \\ k_o \\ k_s \\ j_d(t) \end{bmatrix}\tag{5.5}$$

Modelligningene for den ulineære modellen er vist i ligning (5.6), (5.7), (5.8) og (5.9).

$$\begin{aligned}x_1(t) &= j_c(t) + d_i(t) - d_o(t) \\ &= k_c \cdot E(t) + d_i - k_o \cdot A(t) \\ &= x_4 \cdot x_2(t) + x_3 - x_5 \cdot x_1(t)\end{aligned}\tag{5.6}$$

$$\begin{aligned}x_2(t) &= j_s(t) - j_d(t) \\ &= k_s - j_d(t) \\ &= x_6 - x_7(t)\end{aligned}\tag{5.7}$$

$$x_3(t) = x_4 = x_5 = x_6 = 0\tag{5.8}$$

5.1 Ligninger metode 1

$$\begin{aligned}
 \dot{x}_7(t) &= j_d \frac{k_s - j_d(t)}{E(t)} + j_d \frac{k_c \cdot E(t) + d_i - k_o \cdot A(t)}{A(t)} \\
 &= x_7(t) \frac{x_6 - x_7(t)}{x_2(t)} + x_7(t) \frac{x_4 \cdot x_2(t) + x_3 - x_5 \cdot x_1(t)}{x_1(t)}
 \end{aligned} \tag{5.9}$$

For å sette opp tilstandsrommodellen må modellen lineariseres og diskretiseres. Som for den lineære modellen brukes Eulers forovermetode for å diskretisere modellen, mens lineariseringen for tilstandsvektoren blir gjort som i ligning (5.10).

$$\begin{aligned}
 \Delta x(k+1) &= \frac{\partial f}{\partial x} \Delta x(k) + \frac{\partial f}{\partial v} \Delta v(k) \\
 &= \Phi \Delta x(k) + \Omega \Delta v(k)
 \end{aligned} \tag{5.10}$$

Resulterende transmisjonsmatrise er vist i ligning (5.11).

$$\Phi(k) = \begin{bmatrix}
 1 - Tx_5 & Tx_4 & T & Tx_2 & -Tx_1 & 0 & 0 \\
 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & T & -T \\
 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
 -Tx_7 \left(\frac{x_3 - x_1 \cdot x_5 + x_2 \cdot x_4}{x_1^2} + \frac{x_5}{x_1} \right) & Tx_7 \left(\frac{x_4}{x_1} - \frac{x_6 - x_7}{x_2^2} \right) & \frac{Tx_7}{x_1} & \frac{Tx_2 \cdot x_7}{x_1} & -Tx_7 & \frac{Tx_7}{x_2} & T \left(\frac{x_3 - x_1 \cdot x_5 + x_2 \cdot x_4}{x_1} - \frac{x_7}{x_2} + \frac{x_6 - x_7}{x_2} \right) + 1
 \end{bmatrix} \tag{5.11}$$

Prosesstøymatrisen er vist i ligning (5.12).

$$\Omega(k) = \begin{bmatrix}
 T & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & T & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & T & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & T & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & T & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & T & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & T
 \end{bmatrix} \tag{5.12}$$

Når det kommer til måleligningen i tilstandsrommodellen er det forskjellig hva som måles i de ulike versjonene, som man ser i figur 4.1. Hva målingene er og hva den tilhørende målematrisen blir for alle versjonene der det måles en fluks er oppsummert i tabell 5.1.

Med matrisene fra ligning (5.11), ligning (5.12) og tabell 5.1 er tilstandsrommodellen som vist i ligning (5.13) og (5.14).

$$x(k+1) = \Phi x(k) + \Omega v(k) \tag{5.13}$$

$$y(k) = Dx(k) + w(k) \tag{5.14}$$

Versjon	Panel	Måling	Målematrise
6	B	$y = \begin{bmatrix} A \\ j_d \end{bmatrix}$	$D = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$
7	C	$y = \begin{bmatrix} d_i \\ E \end{bmatrix}$	$D = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$
8	D	$y = \begin{bmatrix} d_i \\ j_d \end{bmatrix}$	$D = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$
10	F	$y = d_i$	$D = [0 \ 0 \ 1 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0]$
11	G	$y = \begin{bmatrix} A \\ d_i \end{bmatrix}$	$D = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$
13	I	$y = j_d$	$D = [0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 1]$
14	J	$y = \begin{bmatrix} E \\ j_d \end{bmatrix}$	$D = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$

Tabell 5.1: Oversikt over målematrisene, for panelene som tar inn en fluks som måling, med metode 1.

5.2 Ligninger metode 2

Metode 2 tar ikke inn fluksene som egne tilstander, men inkluderer heller ligningen for fluksen direkte i måleligningen. Kalmanfilteret er igjen augmentert til sju tilstander, og tilstandsvektoren er vist i ligning (5.15).

$$x(t) = \begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \\ x_7 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A(t) \\ E(t) \\ k_i \\ k_c \\ k_o \\ k_s \\ k_d \end{bmatrix} \quad (5.15)$$

Med tilstandene fra ligning (5.15) og modelligningene for A og E er rateligningene vist i ligning (5.16), (5.17) og (5.18).

$$\dot{x}_1(t) = x_4 \cdot x_2 + x_3 - x_5 \cdot x_1 \quad (5.16)$$

$$\dot{x}_2 = x_6 - x_7 \cdot x_1 \cdot x_2 \quad (5.17)$$

$$\dot{x}_3 = \dot{x}_4 = \dot{x}_5 = \dot{x}_6 = \dot{x}_7 = 0 \quad (5.18)$$

Igjen blir ligning (5.10) brukt for å linearisere og Eulers forovermetode for å diskretisere, og tilstandsrommodellen blir som vist i ligning (5.19) og (5.20), med målematrisen D fra tabell 5.2.

$$x(k+1) = \begin{bmatrix} 1 - Tx_5 & Tx_4 & T & Tx_2 & -Tx_1 & 0 & 0 \\ -Tx_7x_2 & 1 - Tx_7x_1 & 0 & 0 & 0 & T & -Tx_1x_2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} x(k) + \begin{bmatrix} T & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & T & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & T & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & T & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & T & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & T & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & T \end{bmatrix} v(k) \quad (5.19)$$

$$= \Phi x(k) + \Omega v(k)$$

$$y(k) = Dx(k) + w(k) \quad (5.20)$$

5.3 Resultater ulineær modell

Versjon	Panel	Måling	Målematrise
6	B	$y = \begin{bmatrix} A \\ j_d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A \\ k_d \cdot A \cdot E \end{bmatrix}$	$D = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x_7x_2 & x_7x_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & x_1x_2 \end{bmatrix}$
7	C	$y = \begin{bmatrix} d_i \\ E \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k_i \\ E \end{bmatrix}$	$D = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$
8	D	$y = \begin{bmatrix} d_i \\ j_d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k_i \\ k_d \cdot A \cdot E \end{bmatrix}$	$D = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x_7x_2 & x_7x_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & x_1x_2 \end{bmatrix}$
10	F	$y = d_i = k_i$	$D = [0 \ 0 \ 1 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0]$
11	G	$y = \begin{bmatrix} A \\ d_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A \\ k_i \end{bmatrix}$	$D = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$
13	I	$y = j_d = k_d \cdot A \cdot E$	$D = [x_7x_2 \ x_7x_1 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ x_1x_2]$
14	J	$y = \begin{bmatrix} E \\ j_d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E \\ k_d \cdot A \cdot E \end{bmatrix}$	$D = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x_7x_2 & x_7x_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & x_1x_2 \end{bmatrix}$

Tabell 5.2: Oversikt over målematrisene, for panelene som tar inn en fluks som måling, med metode 2.

Når hvert panel ble simulert ble initialverdien til A og E i kontrollmotivet satt bort fra arbeidspunktet med 30%, for at de skulle ha noe liv i seg i simuleringen. I tillegg ble initialverdien i Kalmanfilteret for de estimerte tilstandene som *ikke* ble målt satt 10% bort fra arbeidspunktet, for å se om estimeringen klarer å hente seg inn. Initialverdien for tilstandene som ble målt ble satt til riktig startverdi, fordi Kalmanfilteret uansett får vite verdiene gjennom målingene.

5.3 Resultater ulineær modell

For å regne på observerbarhet for ulineære systemer må man bruke Lie-deriverte, se underkapittel 2.1.2. Dette ble gjort for hver av de ulineære modellene, med både metode 1 og metode 2 for de modellene som måler en fluks. Resulterende rang er vist i tabell 5.3. Alle de ulineære modellene har en systemorden lik sju, så for at de skal være observerbare må rangen på observerbarhetsmatrisen være lik sju. En rang mindre enn sju betyr at systemet ikke er observerbart, men det tilsvarer ikke nødvendigvis at det ikke er mulig å estimere noen av tilstandene i systemet. Kolonnevis fra venstre

5.3 Resultater ulineær modell

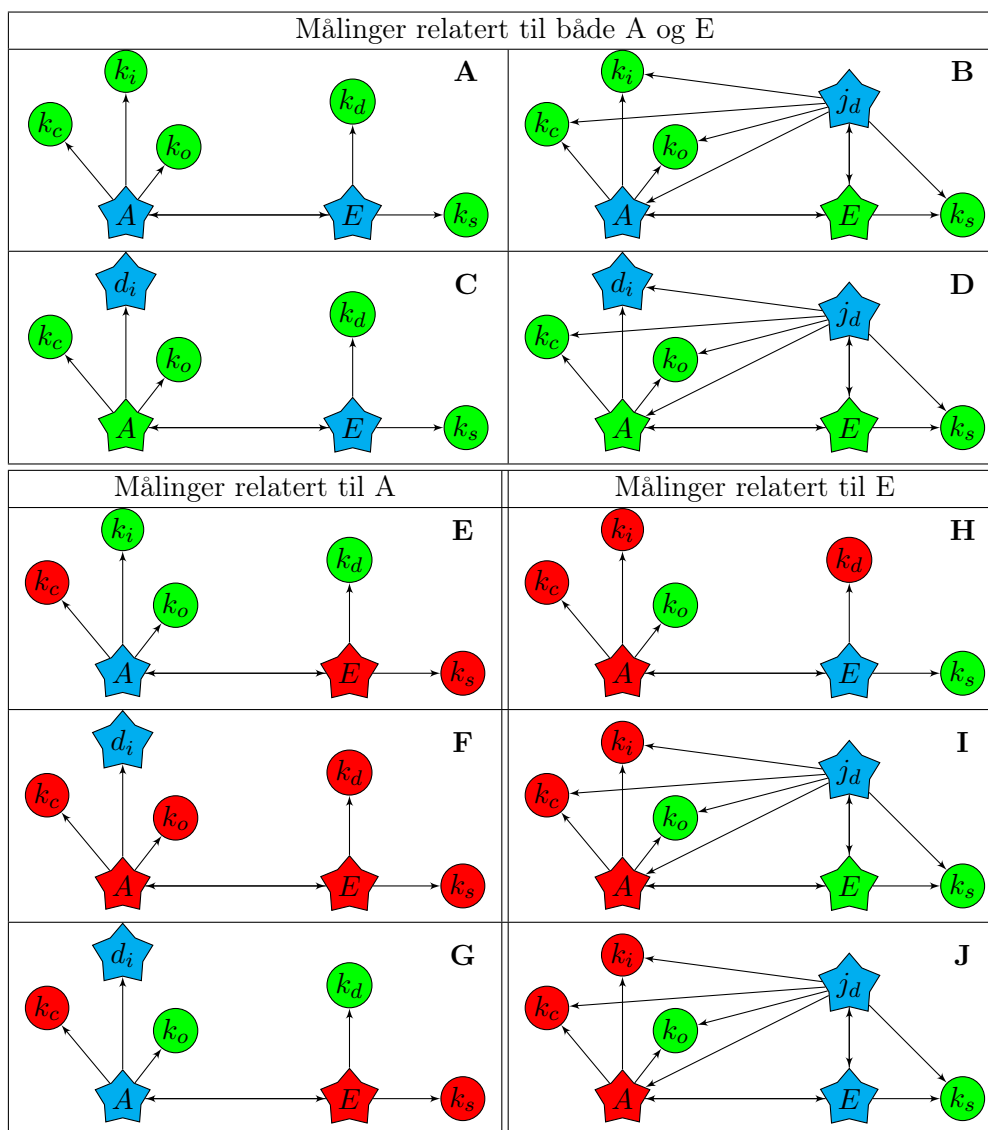
til høyre viser tabellen hvilken versjon det er i figur 4.1, hvilket panel det tilsvarer i figur 3.4, hvilken metode som er brukt for å inkludere fluks, hva rangen til observerbarhetsmatrisen er og hvor mange parametre som ble identifiserbare for samme panel i [7].

Versjon	Panel	Metode	$rank(\mathcal{O}^{NL})$	Antall parametre identifiserbare i [7]
5	A	1	7	7
6	B	1	7	7
		2	7	
7	C	1	7	7
		2	7	
8	D	1	7	7
		2	7	
9	E	2	6	4
10	F	1	1	1
		2	1	
11	G	1	6	4
		2	6	
12	H	2	6	3
13	I	1	6	4
		2	6	
14	J	1	6	4
		2	6	

Tabell 5.3: Utregnet rang på observerbarhetsmatrisen for hver av de ulineære Kalmanfilterversjonene. For de versjonene som bruker en fluks som måling er rangen regnet ut for begge metodene.

Tabellen viser at de eneste versjonene som er forventet å kunne estimere alle tilstandene er panel A-D. Dette stemmer overens med resultatene fra [7], som står i høyre kolonne i tabellen, da panel A-D fant 7 identifiserbare parametre. Panel E-J fikk ikke full rang, og dette stemmer også med resultatene fra [7], da ingen av de panelene klarte å estimere alle sju tilstandene.

Som for det lineære kontrollmotivet ble det også her gjort en visuell analyse av de ulike versjonene, og det er vist i de neste underkapitlene. Først er det en sammenligning for metode 1 og metode 2 på panel B, som er det første panelet som bruker en fluks som måling. I artikkelen om strukturell identifiserbarhet ble det antatt at det er perfekte målinger, så for å kunne sammenligne med resultatene derfra må versjonene simuleres uten prosess- og målestøy. Resultatene for strukturell identifiserbarhet er vist igjen i figur 5.1 og etter sammenligningen av metode 1 og metode 2 vises resultatene for panel A-J uten støy. Til slutt vises resultatene for panel A-J med prosess- og målestøy.



Figur 5.1: Figurer av utvalgte kombinasjoner av motiv 1 scenario B8. Figurene viser sammenhengen mellom tilstander (stjerner) og systemparametere (sirkler). En pil fra node X til node Y indikerer at Y er i ligningen av X. Målinger er markert i blått, identifiserbare parametere/tilstander er markert i grønt og uidentifiserbare parametere/tilstander er markert i rødt. Figuren er hentet fra [7].

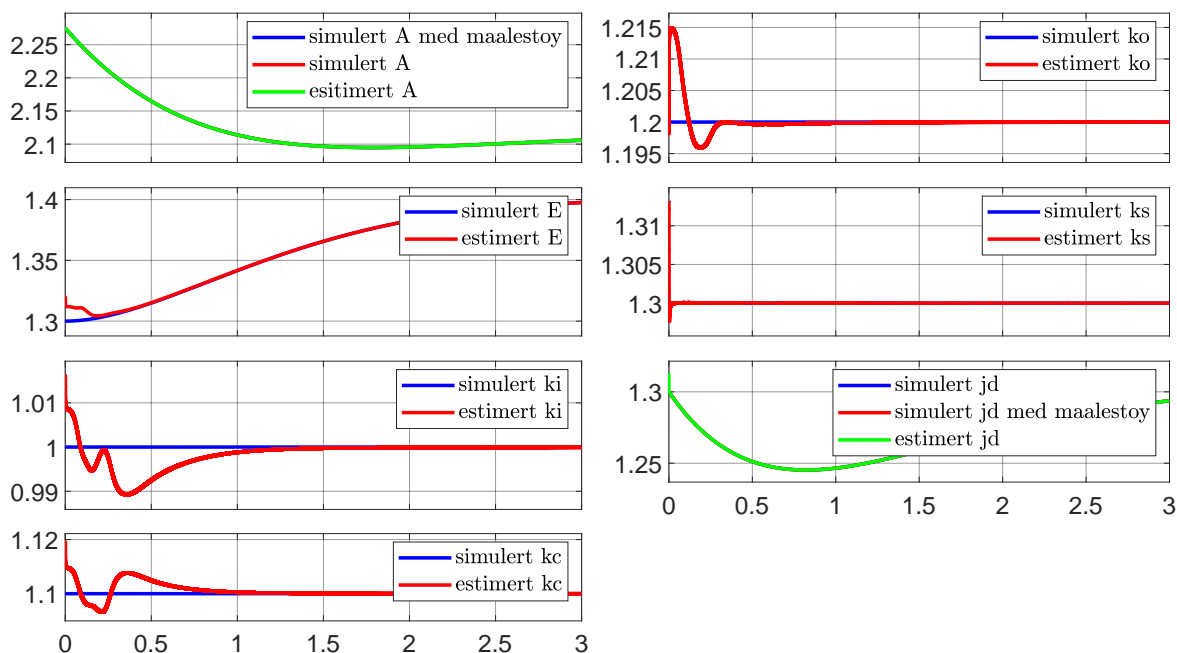
5.3.1 Metode 1 kontra metode 2

For å sammenligne de to metodene er panel B blitt brukt som et eksempel, i og med at det er det første panelet som tar inn en fluks som måling. Fluksen som blir målt er degradasjonsfluksen til E , j_d , og den andre målingen er av konsentrasjonen av A . I sammenligningen mellom de to metodene er det ikke lagt på hverken prosess- eller målestøy i modellen.

5.3 Resultater ulineær modell

Metode 1 - uten støy

Metode 1 går ut på å utvide modellen med fluksen lagt til som en egen tilstand. Hvordan dette gjøres for fluksen j_d er vist i underkapittel 5.1. Simuleringen med metode 1 er vist i figur 5.2. Her er altså j_d den syvende tilstanden mens k_d ikke lenger er en tilstand. Figur 5.2 viser at Kalmanfilteret klarer å estimere alle syv tilstandene med metode 1.

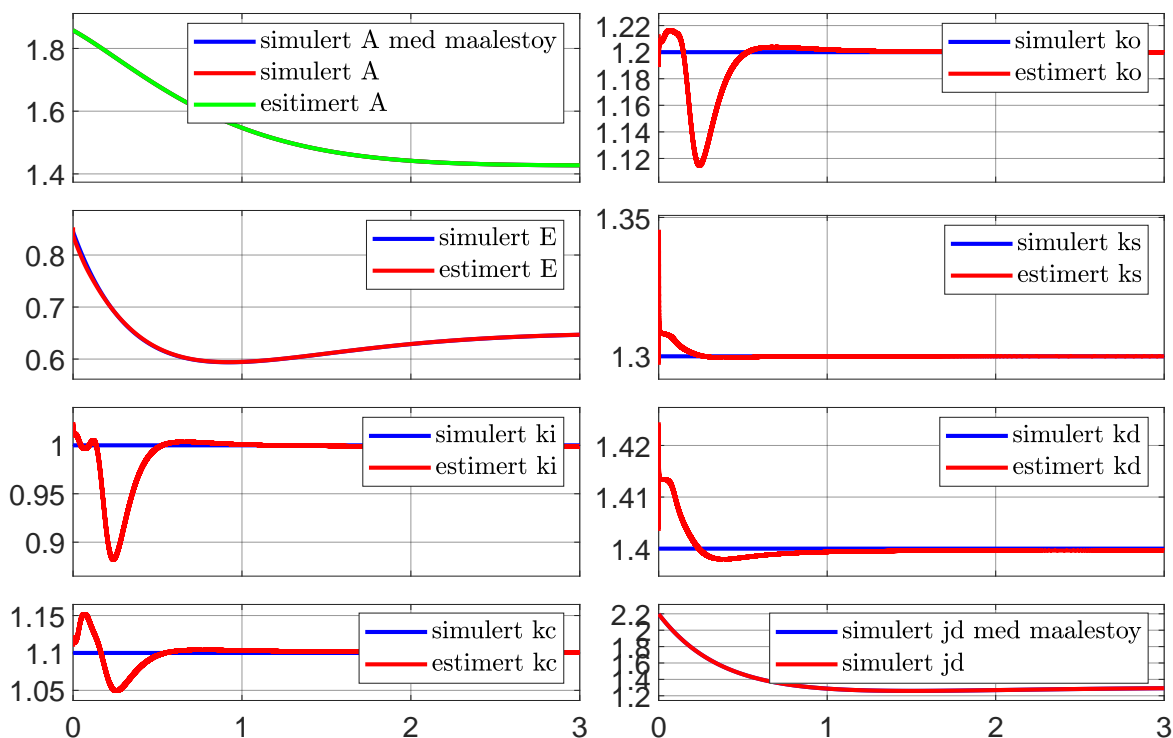


Figur 5.2: Simulering av panel B, med metode 1. Uten målestøy og prosessstøy.

Metode 2 - uten støy

Figur 5.3 viser simuleringen for panel B, med bruk av metode 2. Metode 2 tar ikke inn fluksen som en egen tilstand, men bruker heller ligningen for den direkte i måleligningen. j_d er altså ikke en tilstand her, men er lagt til i det siste panelet i figuren. Man ser at også her klarer Kalmanfilteret å estimere alle de syv tilstandene.

5.3 Resultater ulineær modell



Figur 5.3: Simulering av panel B, med metode 2. Uten målestøy og prosessstøy.

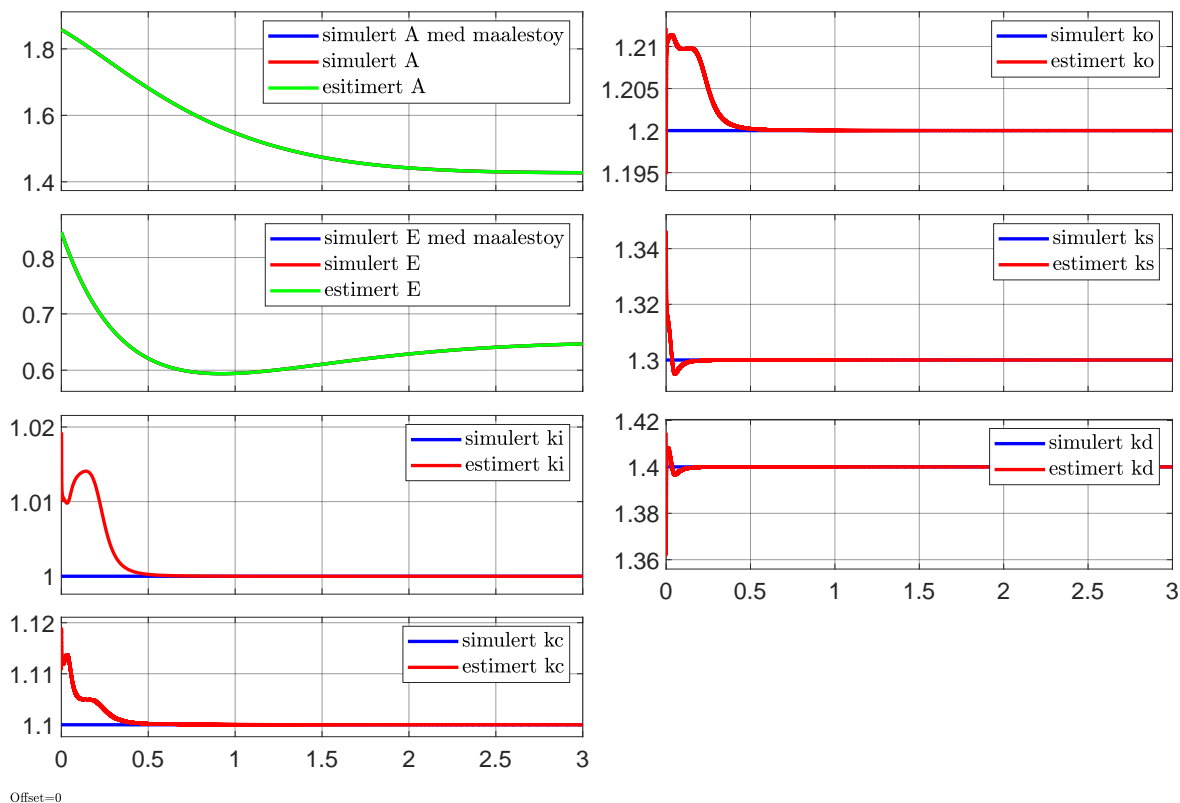
Resultatet ble altså likt for metode 1 og metode 2 i panel B. Det samme ble testet for alle panelene som tar inn en fluks som måling, og det var de samme parametrene som ble estimert for begge metodene hver gang. Eneste forskjell var selvfølgelig at med metode 1 blir d_i og/eller j_d tatt inn som en tilstand og da er det de som blir estimert, mens for metode 2 er det de originale parametrene k_i og k_d som blir estimert. Siden resultatene ble likt er det kun metode 2 som er vist og diskutert i resten av rapporten.

5.3.2 Visuell analyse panel A-J, uten støy

De fire første versjonene for det ulineære kontrollmotivet har det til felles at de måler både en parameter relatert til A og en parameter relatert til E . I figur 5.1 ser man at ved disse målingene var alle parametrene strukturelt identifiserbare, og tabell 5.3 viser at observerbarhetsmatrisen fikk full rang for alle fire versjonene. Teoretisk sett skal altså alle tilstandene være observerbare for disse fire versjonene. Panel E-J har ikke full rang på observerbarhetsmatrisen, se tabell 5.3, og alle parametrene var heller ikke identifiserbare, se figur 5.1. Så for disse panelene forventer vi ikke å kunne estimere alle tilstandene korrekt. Resultatet for alle versjonene er vist i figur 5.7, og figur 5.4, 5.5 og 5.6 viser simuleringer av tre ulike panel for å vise hvordan de er blitt tolket.

5.3 Resultater ulineær modell

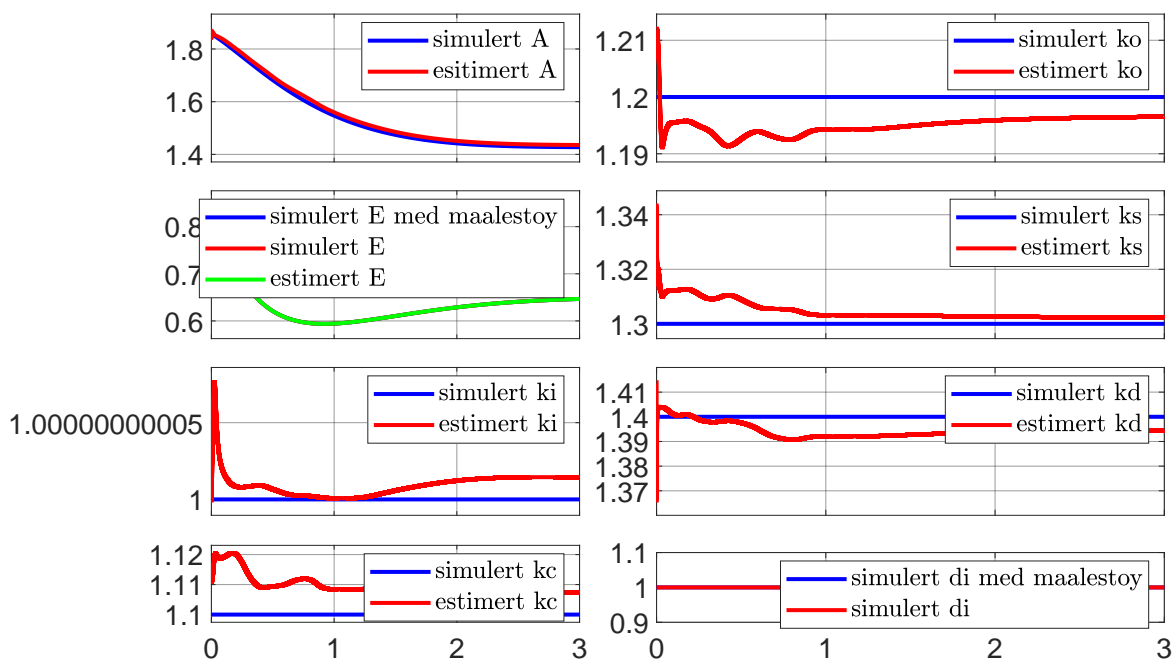
Figur 5.4 viser simuleringen av panel A. I panel A er det mengden A og mengden E som blir målt, og man ser i figuren at Kalmanfilteret klarer å estimere alle parametrene. Dette stemmer overens både med identifiserbarhetsresultatene og tabell 5.3.



Figur 5.4: Simulering av panel A, uten støy.

Simuleringen av panel C er vist i figur 5.5. Panel C måler mengden E og fluksen d_i , og som man ser i figuren er det kun k_i Kalmanfilteret klarer å estimere her. Det ser også ved første øyekast ut som filteret estimerer A korrekt, men det er fordi filteret har informasjon om hvordan A oppfører seg så derfor er formen på kurven lik, men det klarer ikke å hente inn det avviket som blir satt som initialverdi fra start.

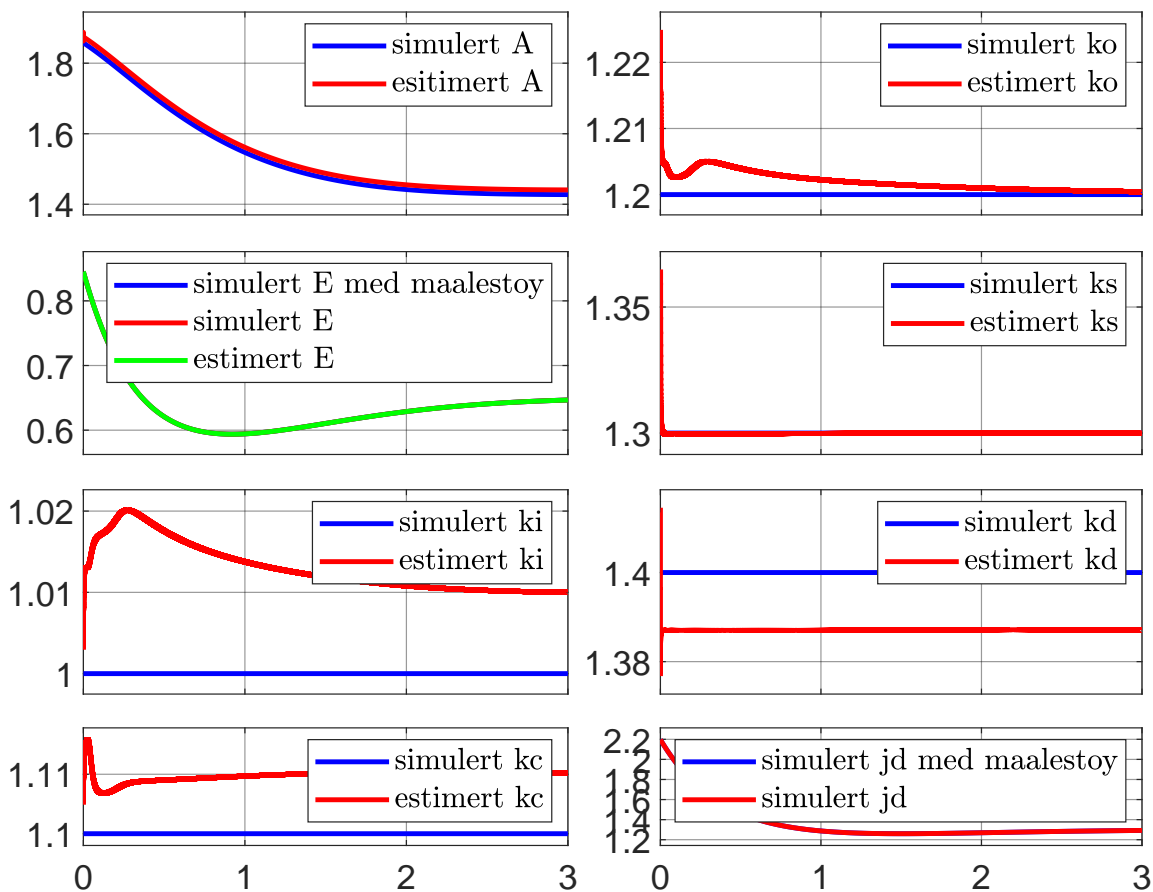
5.3 Resultater ulineær modell



Figur 5.5: Simulering av panel C, uten støy.

Panel E-J bruker kun målinger relatert til enten A eller E , og figur 5.6 viser simuleringen av panel J. Panel J måler mengden E og fluksen j_d , og i figuren ser man at Kalmanfilteret klarer å estimere k_o og k_s . Dette stemmer både overens med figur 5.1, hvor de samme parametrene ble funnet til å være identifiserbare, og tabell 5.3 hvor rangen til observerbarhetsmatrisen ble funnet til 6, som tilsvarer at ikke hele systemet er observerbart.

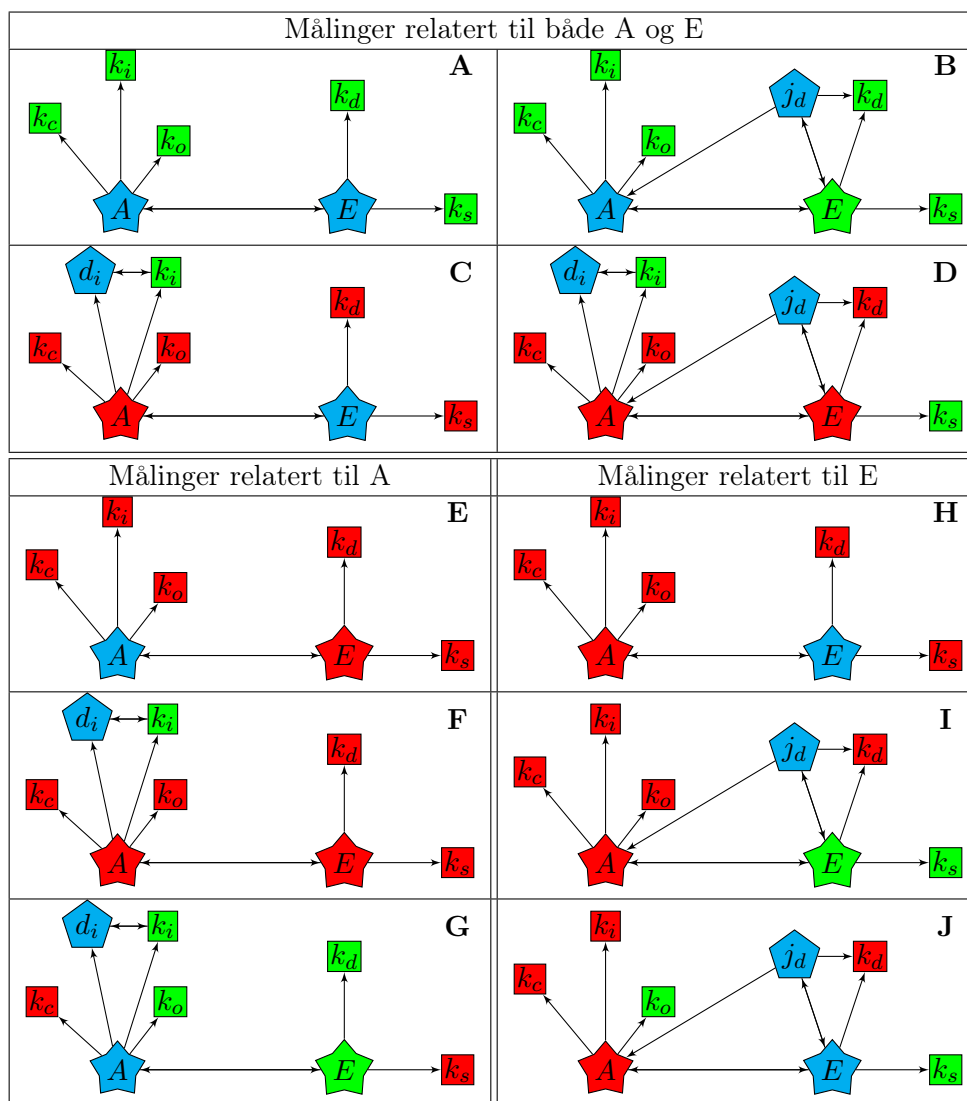
5.3 Resultater ulineær modell



Figur 5.6: Simulering av panel J, uten støy

Resultatene for simulering av alle panelene uten støy er vist i figur 5.7. Det er metode 2 som er brukt for å inkludere flukser i måleligningen, og det er illustrert i figuren ved at fluksene er formet som femkanter. De to originale tilstandene, A og E , er formet som stjerner og de fem andre tilstandene er firkanter. En pil fra node X til node Y , indikerer at Y er i ligningen til X . Tilstandene som blir målt er blå, de som er observerbare er grønne og de som ikke er observerbare er røde.

5.3 Resultater ulineær modell



Figur 5.7: Figuren viser sammenhengen mellom de faste tilstandene (stjerne), parametre som tilstand (firkant) og fluks som måling (femkant). Blå indikerer måling, grønn indikerer at tilstanden er observerbar og rød indikerer at tilstanden ikke er observerbar. Dette er for simuleringer uten prosess- og målestøy.

En sammenligning av figur 5.1 og 5.7 viser at panel A, B, F og J gir samme resultat for hvilke parametre som kan estimeres. En annen observasjon er at ingen av panelene som kun har måling relatert til enten A eller E klarer å estimere alle parametrene. Dette stemmer overens med funnene i [7], hvor det ble konkludert med at måling relatert til begge stoffene var nødvendig for strukturell identifiserbarhet.

Alle panelene hvor d_i blir målt (panel C, D, F og G), gjør det generelt ikke veldig bra. En grunn til det kan være at d_i i praksis bare er en konstant, så selv om Kalmanfilteret får inn en måling av den direkte sier den ikke så mye om hva som skjer i resten av systemet. Dette kan også være grunnen til at selv om panel C og D har målinger relatert til både A og E så klarer ikke filteret å estimere alle

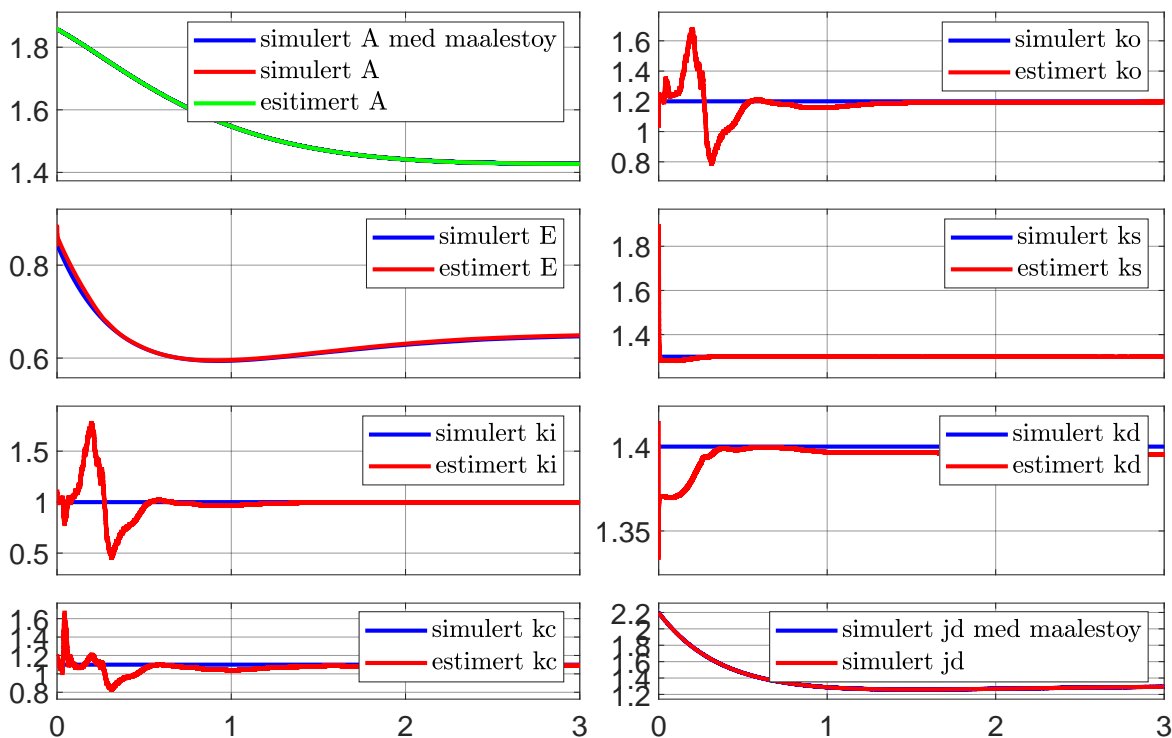
5.3 Resultater ulineær modell

tilstandene. En annen observasjon er at ved målinger bare relatert til E er det ikke mulig å estimere A , k_c , k_i eller k_d .

5.3.3 Visuell analyse panel A-J, med støy

Under eksperimentering ble det funnet at støy har stor innvirkning på resultatene. For å illustrere dette vises tre panel med støy i figur 5.8, 5.9 og 5.10. Figurer med de resterende simuleringene kan finnes i vedlegg B. For alle panelene ble målestøyen satt til å ha en effekt spektraltetthet på $1 \cdot 10^{-11}$ og prosesstøyen har en effekt spektraltetthet på $1 \cdot 10^{-7}$.

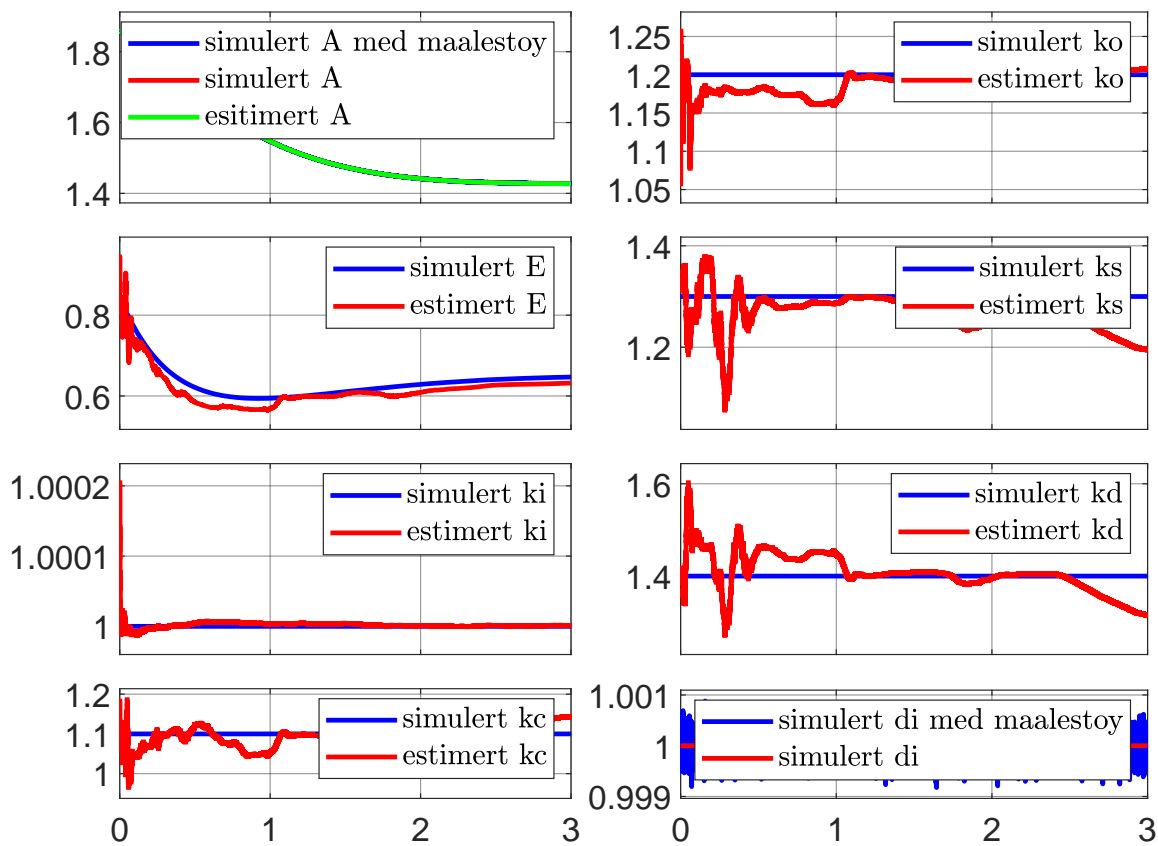
Figur 5.8 viser panel B med prosess og målestøy. Uten støy ble alle parametrene estimert korrekt for dette panelet, men figur 5.8 viser at k_d ikke lenger estimeres korrekt. Det er likevell ikke veldig stor forskjell fra simuleringen uten støy, da panel A og B generelt ser ut til å være mer robust for støy enn de andre panelene.



Figur 5.8: Simulering av panel B, med prosess- og målestøy.

Figur 5.9 viser simuleringen av panel G med støy, og her er det større forskjell fra simuleringen uten støy. Uten støy klarte panel G å estimere k_i , k_o , E og k_d , men figur 5.9 viser at med støy er det kun k_i som blir estimert korrekt.

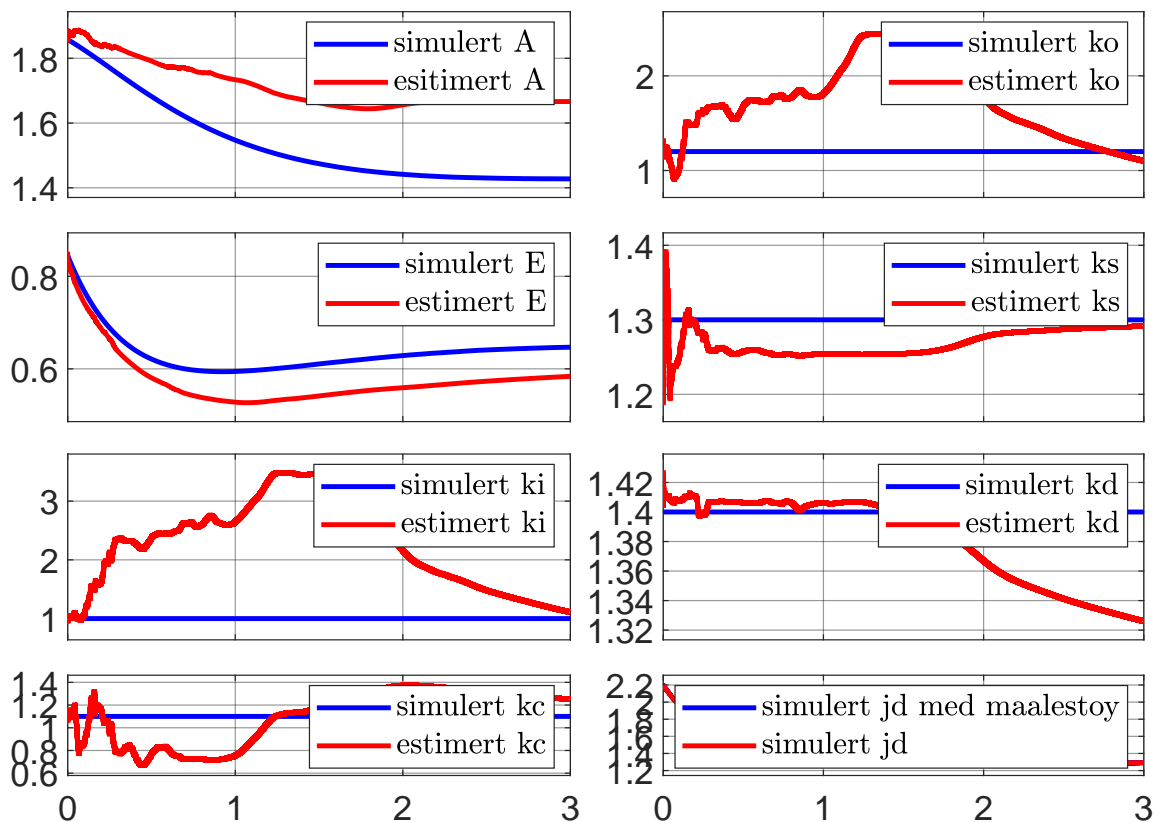
5.3 Resultater ulineær modell



Figur 5.9: Simulering av panel G, med prosess- og målestøy.

For å også vise et panel som har måling relatert til E er også panel I vist i figur 5.10. Her er det j_d som blir målt og uten støy klarte filteret å estimere E og k_s . Med støy er ikke lenger noen av parametrene estimerbare, som man kan se i figur 5.10.

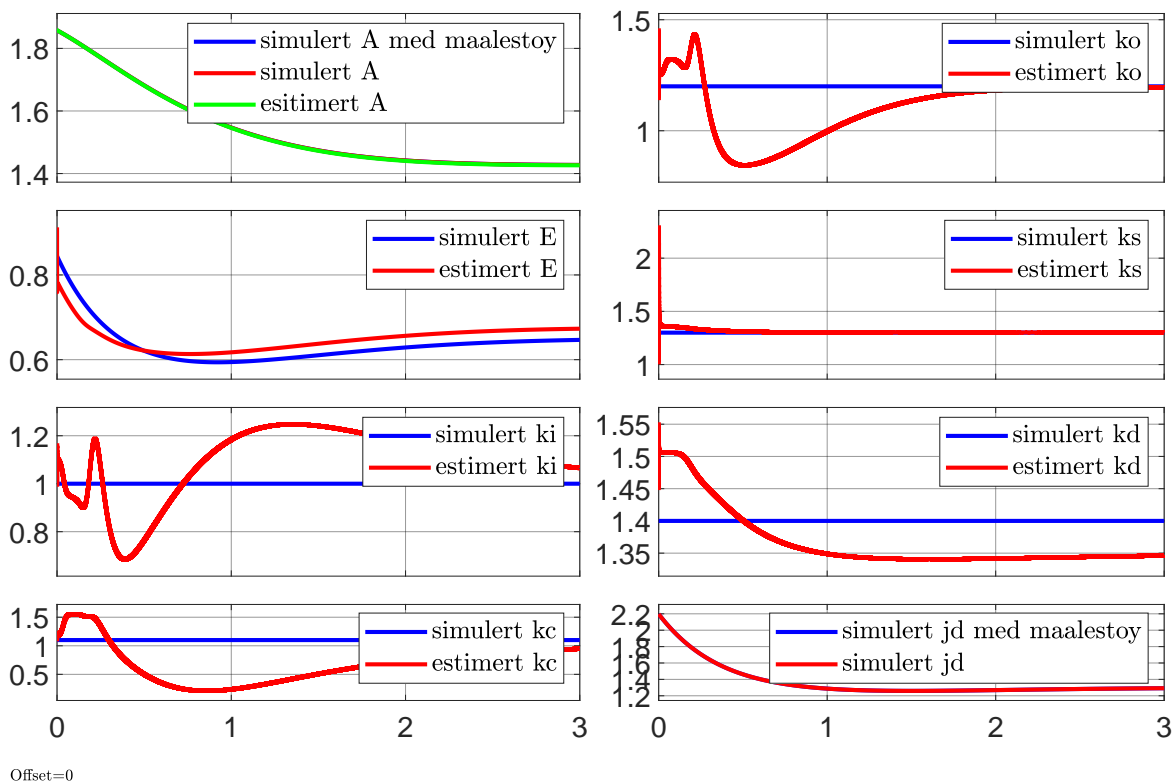
5.3 Resultater ulineær modell



Figur 5.10: Simulering av panel I, med prosess- og målestøy.

Støyen har altså ganske stor innvirkning på estimeringen. Selv for panel A og B, som virker ganske stabile, vil en stor nok målestøy føre til at tilstandene ikke lenger estimeres korrekt. En annen faktor som under testing viste seg å ha innvirkning på estimeringen var initialverdiene på tilstandene. Jo lengre unna arbeidspunktet initialverdiene ble satt, jo dårligere ser det ut til at Kalmanfilteret klarer å estimere tilstandene. Dette er vist i figur 5.11, med en simulering av panel B uten støy, og med avviket fra arbeidspunktet til initialverdi for tilstandene økt fra 1% til 8%. Man ser i figuren at panel B, som tidligere estimerte alle tilstandene korrekt, nå bare estimerer parametrene k_o og k_s .

5.3 Resultater ulineær modell



Figur 5.11: Panel B simulert uten støy, med initialverdi på tilstandene satt 8% unna arbeidspunktet.

Kapittel 6

Diskusjon og konklusjon

Dette kapittelet går igjennom en diskusjon av oppgaven. Dette inkluderer forbedringsforslag til oppgaven og en konklusjon om hvordan oppgaven er løst.

6.1 Forbedringsforslag

Det største og kanskje viktigste forbedringspotensialet som kunne blitt gjort med tanke på undersøkelse av observerbarheten til modellen, er å undersøke i mer detalj hvordan den blir påvirket av støy. Noen av versjonene ser ut til å reagere mer på økt støy enn andre og dette burde blitt undersøkt nærmere for hver versjon. Testingen av støyen kan også med fordel skille mellom å legge på prosessstøy, å legge på målestøy og begge typene støy sammen.

Det andre som burde blitt testet nøyere er valg av initialverdi i Kalmanfilteret. Her kunne det med fordel blitt gjort tester på alle versjonene hvor initialverdiene til tilstandene legges gradvis lenger unna arbeidspunktet. Her hadde det vært lurt å starte i arbeidspunktet å deretter gå lenger og lenger unna, og observere når Kalmanfilteret ikke lenger klarer å estimere korrekt.

Resultatene for både den lineære og den ulineære modellen er nå basert hovedsakelig på visuell tolkning av simuleringene. En bedre måte hadde gjerne vært å regne ut et parameterfeilmål for hver parameter, for å få et kvantitativt mål på hvor bra estimeringen er. For en simulering som går over ti sekunder med tidsskritt $T = 0.0002$, kunne da parameterfeilmålet for parameter k_n blitt regnet ut som i ligning (6.1):

$$\Delta e_n = \frac{1}{5000} \sum_{i=45000}^{50000} |k_{n,prosess}(i) - k_{n,est}(i)| \quad (6.1)$$

hvor $k_{n,prosess}$ er den simulerte verdien av parameteren, og $k_{n,est}$ er den simulerte verdien av parameteren. Parameterfeilmålet er altså et gjennomsnitt av differansen mellom simulert og estimert

verdi, de siste 5000 tidsskrittene av simuleringen.

6.2 Konklusjon

Hovedmålet for oppgaven var å sammenligne observerbarheten for kontrollmotiv 1 med identifiserbarheten som ble undersøkt i [7]. Delmålene på veien dit var å først implementere Kalmanfilter for en lineær versjon av systemet, og deretter augmentere Kalmanfilteret med flere parametre som tilstander. Gjennom analysen av de forskjellige modellene ble det observert hvordan variabler som støy og initialverdier påvirker estimatene. Det ble funnet at økt målestøy har en betydelig innvirkning på nøyaktigheten av tilstandenes estimer, noe som fører til at flere tilstander ikke lenger kan estimeres korrekt. Dette gjelder for alle panelene, A-J, med ulineært kontrollmotiv. For det lineære kontrollmotivet ble to av versjonene funnet til å være observerbare, mens for de to andre var det for mange ukjente parametre i rateligningene til at Kalmanfilteret klarte å estimere alle tilstandene. Hovedfunnene indikerer at det er avgjørende å minimere målestøy og nøye velge initialverdier for å sikre nøyaktige estimer i observerbare systemer.

Bibliografi

- [1] E. Bartocci and P. Lió. Formal analysis, and tools for systems biology. *PLoS Computational Biology*, 2016.
- [2] R. Bellman and K.J. Åström. On structural identifiability. *Mathematical Biosciences*, 1970.
- [3] Diabetesforbundet. Blodsukker og måling. diabetes, 2023. URL [På nett; åpnet mai-2024].
- [4] T. Drengstig, I. W. Jolma, X. Y. Ni, K. Thorsen, X. M. Xu, and P. Ruoff. A basic set of homeostatic controller motifs. *Biophysical Journal*, 2012.
- [5] T. Drengstig, I. W. Jolma, K. Thorsen, and P. Ruoff. Fysiologiske reguleringsmekanismer. *Naturen*, 2013.
- [6] Finn Haugen. *Regulering av dynamiske systemer*. Tapir, 1 edition, 2001.
- [7] Eivind S. Haus, Tormod Drengstig, and Kristian Thorsen. Structural identifiability of biomolecular controller motifs with and without flow measurements as model output. *PLoS Comput Biol*, 2023.
- [8] B. Ingalls. *Mathematical modeling in systems biology: an introduction*. MIT Press, 2013.
- [9] J. Liepe, S. Filippi, M. Komorowski, and MPH. Stumpf. Maximizing the information content of experiments in systems biology. *PLoS Computational Biology*, 2013.
- [10] S. Motta and F. Pappalardo. *Mathematical modeling of biological systems. Briefings in Bioinformatics*, 2013.
- [11] A. Raue, C. Kreutz, T. Maiwald, U. Klingmüller, and J. Timmer. Addressing parameter identifiability by modelbased experimentation. *IET Systems Biology*, 2011.
- [12] Svein H. Stokka, Kim A. Jakobsen, Kristian Thorsen, and Tormod Drengstig. Physiological based modeling and control of an industrial tank process. *SIMS*, 2017.
- [13] Kristian Thorsen, Peter Ruoff, and Tormod Drengstig. Control theoretic properties of physiological controller motifs. *ICSSE*, 2013.
- [14] Alejandro F. Villaverde. Observability and structural identifiability of nonlinear biological systems. *Hindawi*, 2019.

Vedlegg A

Programlisting

Matlab filene for alle versjonene kan bli lastet ned her.

Vedlegg B

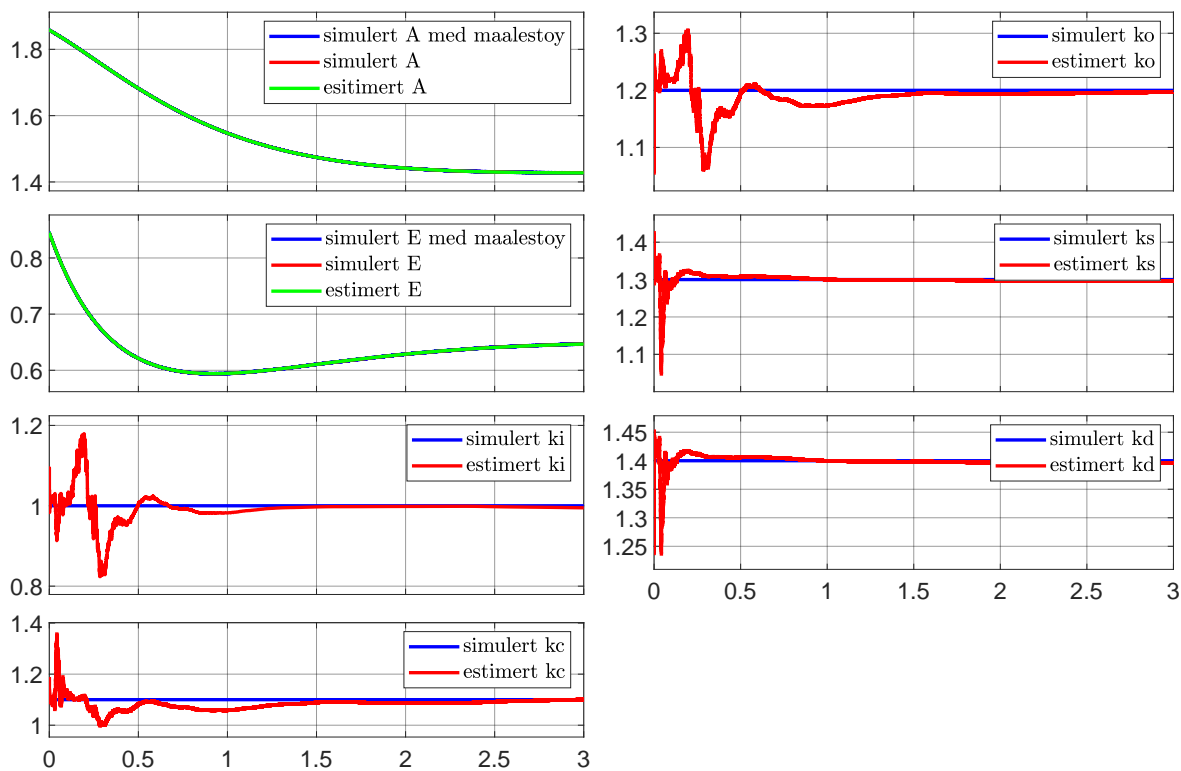
Simuleringer ulineært kontrollmotiv

I dette vedlegget er simuleringer av alle panelene med prosess- og målestøy vist. Det er lagt på prosessstøy med en effekt spektraltetthet på $1 \cdot 10^{-7}$, og målestøyen har en effekt spektraltetthet på $1 \cdot 10^{-11}$. I kontrollmotivet starter A og E 30% unna arbeidspunktet, og i Kalmanfilteret er initialverdiene til tilstandene 1% unna arbeidspunktet.

B.1 Versjon 5-8/Panel A-D: Målinger relatert til både A og E

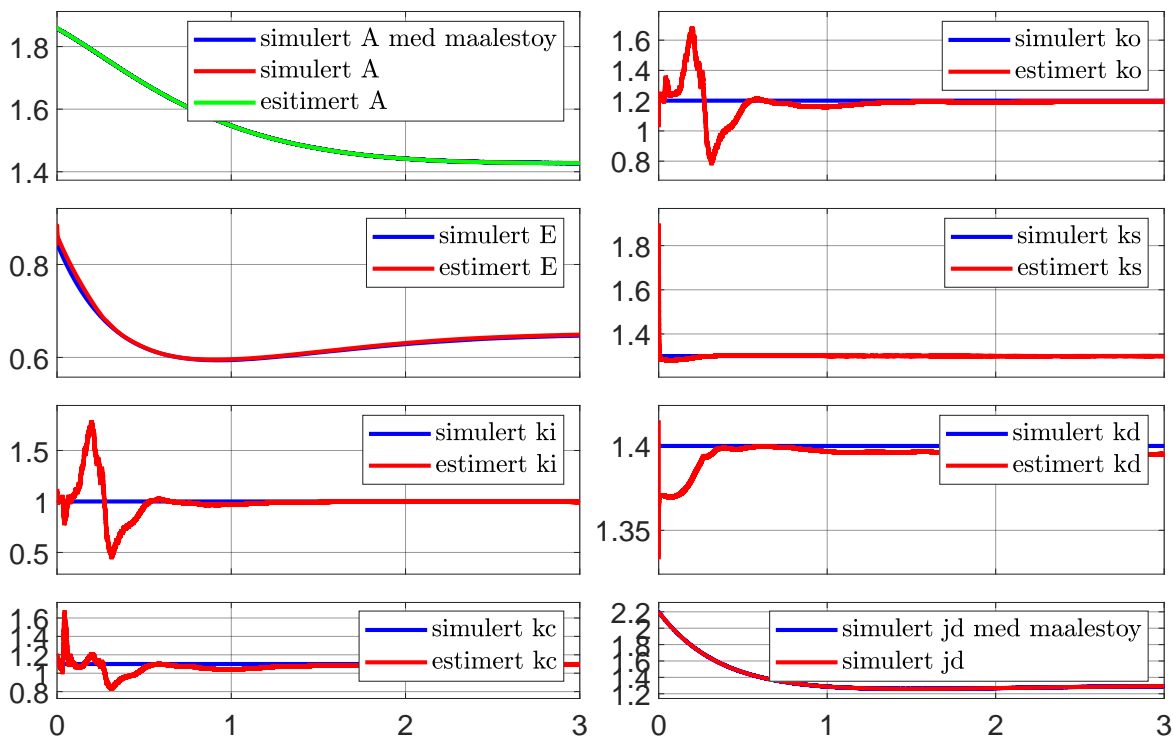
De fire første versjonene for det ulineære kontrollmotivet, versjon 5-8 i figur 4.1, har alle fire en måling relatert til A og en måling relatert til E . Figur B.1 viser en simulering av versjon 5. Der er det mengden A og mengden E som blir målt. Figuren viser at Kalmanfilteret klarer å estimere alle sju tilstandene. Estimeringene ligger et stykke unna de simulerte responsene fra start, men ved $t = 2$ har alle justert seg inn og ligger stabilt på de riktige verdiene. Dette stemmer også overens med resultatet fra tabell 5.3, hvor observerbarhetsmatrisen til systemet fikk full rang, som tilsvarer at systemet er observerbart.

B.1 Versjon 5-8/Panel A-D: Målinger relatert til både A og E



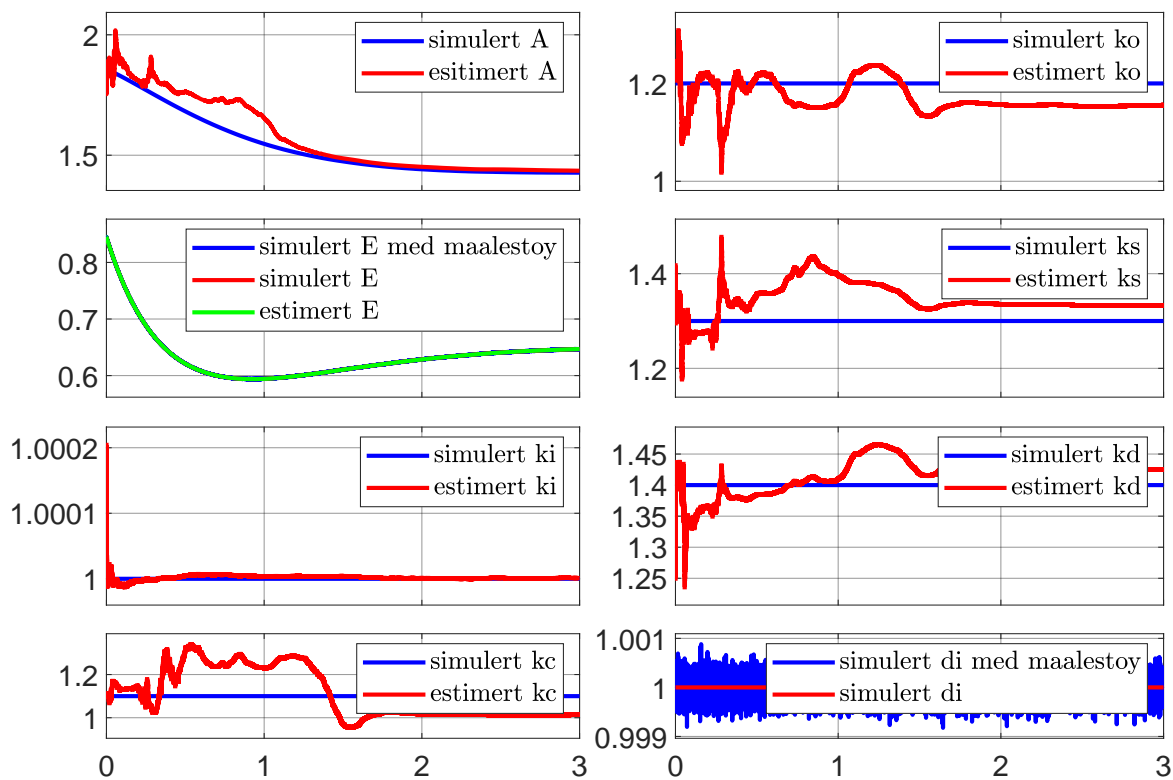
Figur B.1: Simulering av versjon 5, med metode 2. Med målestøy og prosesstøy.

Figur B.2 viser simuleringen av versjon 6, hvor A og j_d blir målt. Her greier Kalmanfilteret å estimere seks av sju tilstander, alle utenom k_d .



Figur B.2: Simulering av versjon 6, med metode 2. Med målestøy og prosesstøy.

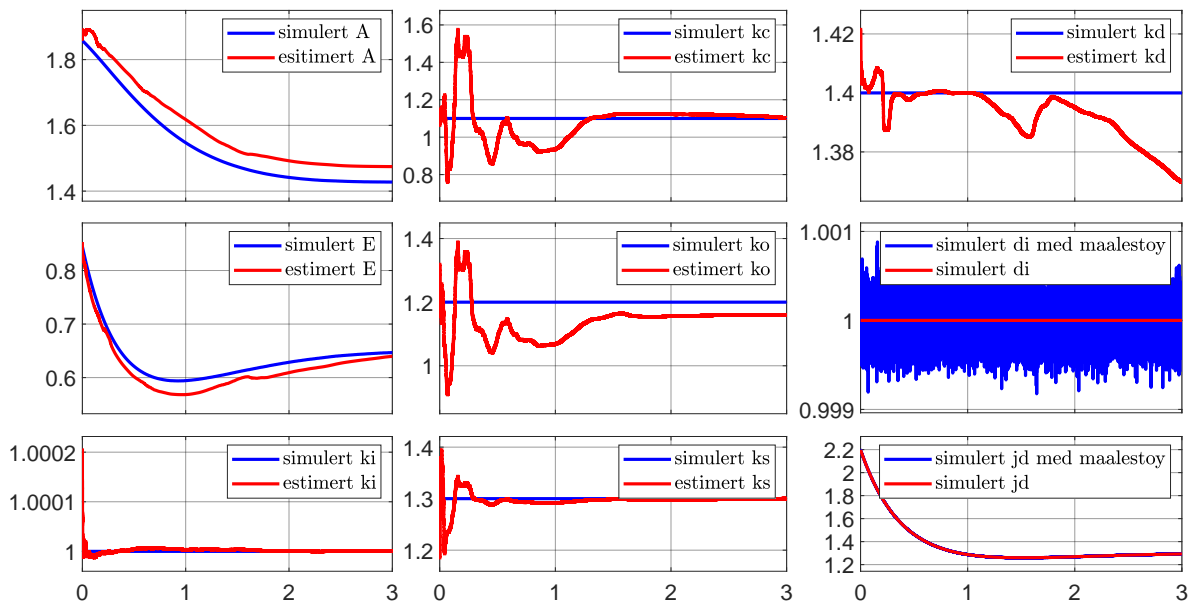
Simuleringen av versjon 7 er vist i figur B.3, hvor d_i og E blir målt. Her er det kun k_i som blir estimert korrekt.



Figur B.3: Simulering av versjon 7, med metode 2. Med målestøy og prosesstøy.

Figur B.4 viser simuleringen av versjon 8, hvor d_i og j_d blir målt. Her er det bare k_i , k_c og k_s som blir estimert korrekt.

B.2 Versjon 9-11/Panel E-G: Målinger relatert til A

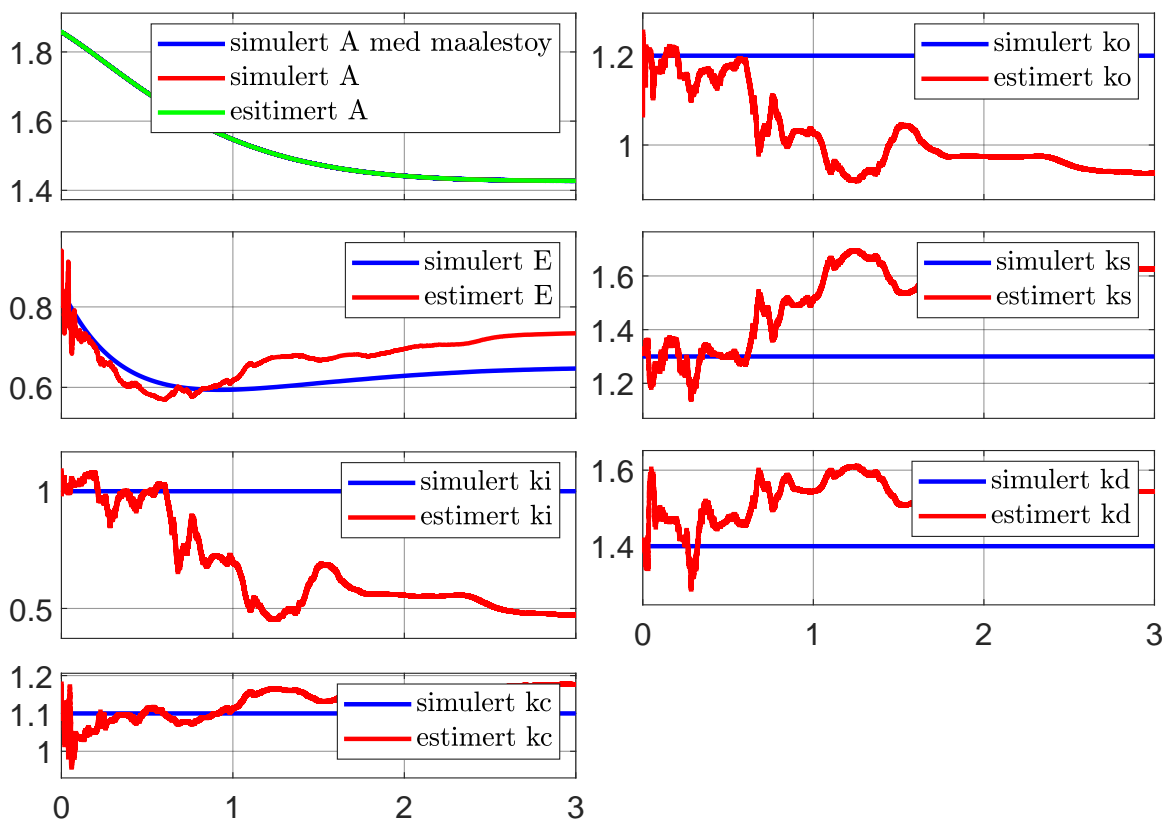


Figur B.4: Simulering av versjon 8, med metode 2. Med målestøy og prosesstøy.

B.2 Versjon 9-11/Panel E-G: Målinger relatert til A

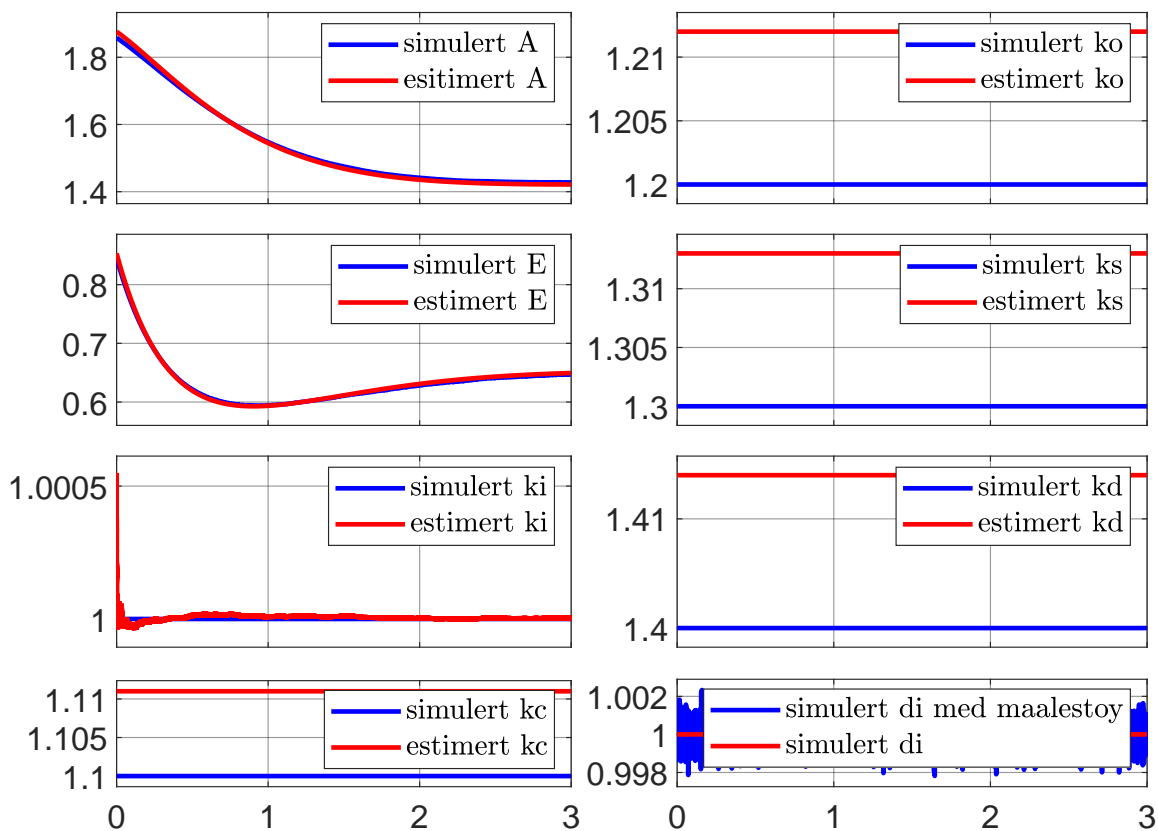
De tre neste versjonene bruker kun målinger som er relatert til stoffet A , altså enten mengden av A , synteseefluksen til A , d_i , eller begge.

Versjon 9 måler bare mengden av stoffet A , og simuleringen er vist i figur B.5. Figuren viser at med støy og måling av A klarer ikke Kalmanfilteret å estimere noen av tilstandene korrekt.



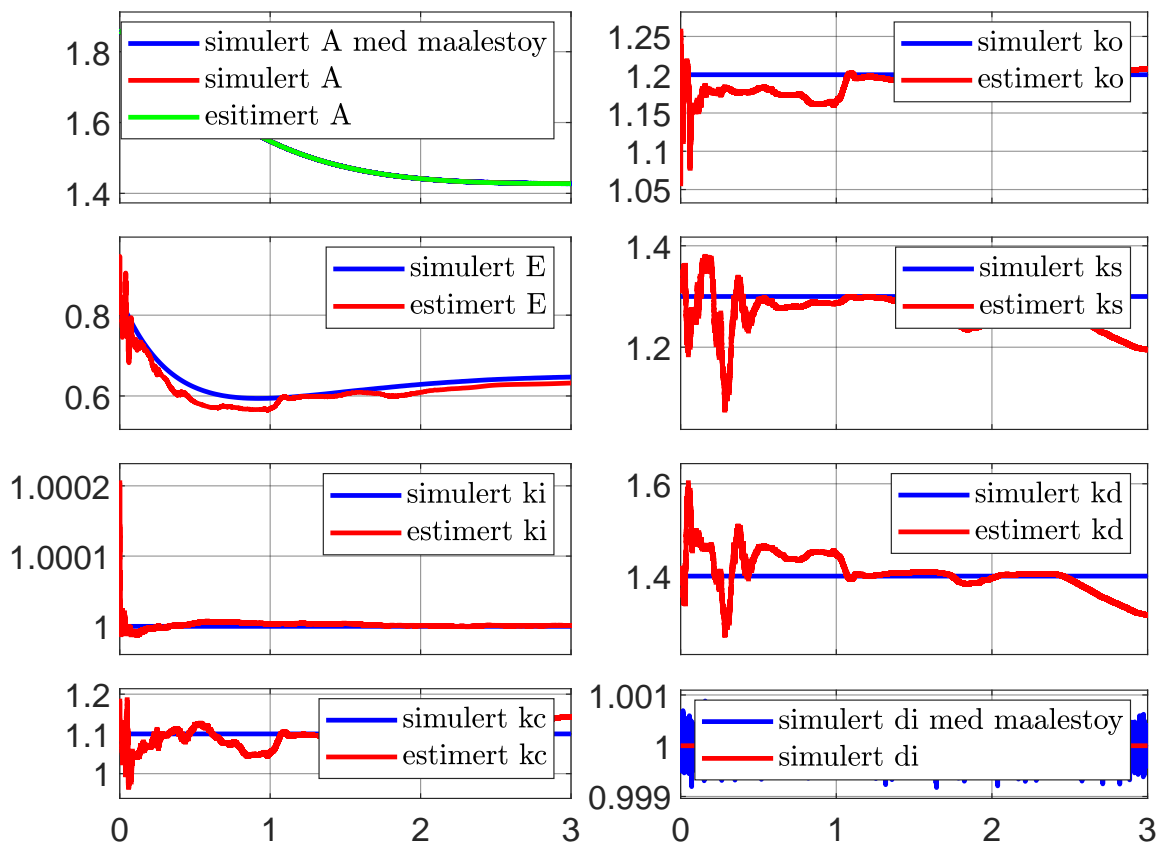
Figur B.5: Simulering av versjon 9, med metode 2. Med målestøy og prosesstøy.

Figur B.6 viser simuleringen av Kalmanfilteret for versjon 10. Det er nå fluksen d_i som blir målt og figuren viser at Kalmanfilteret bare klarer å estimere k_i .



Figur B.6: Simulering av versjon 10, med metode 2. Med målestøy og prosessstøy.

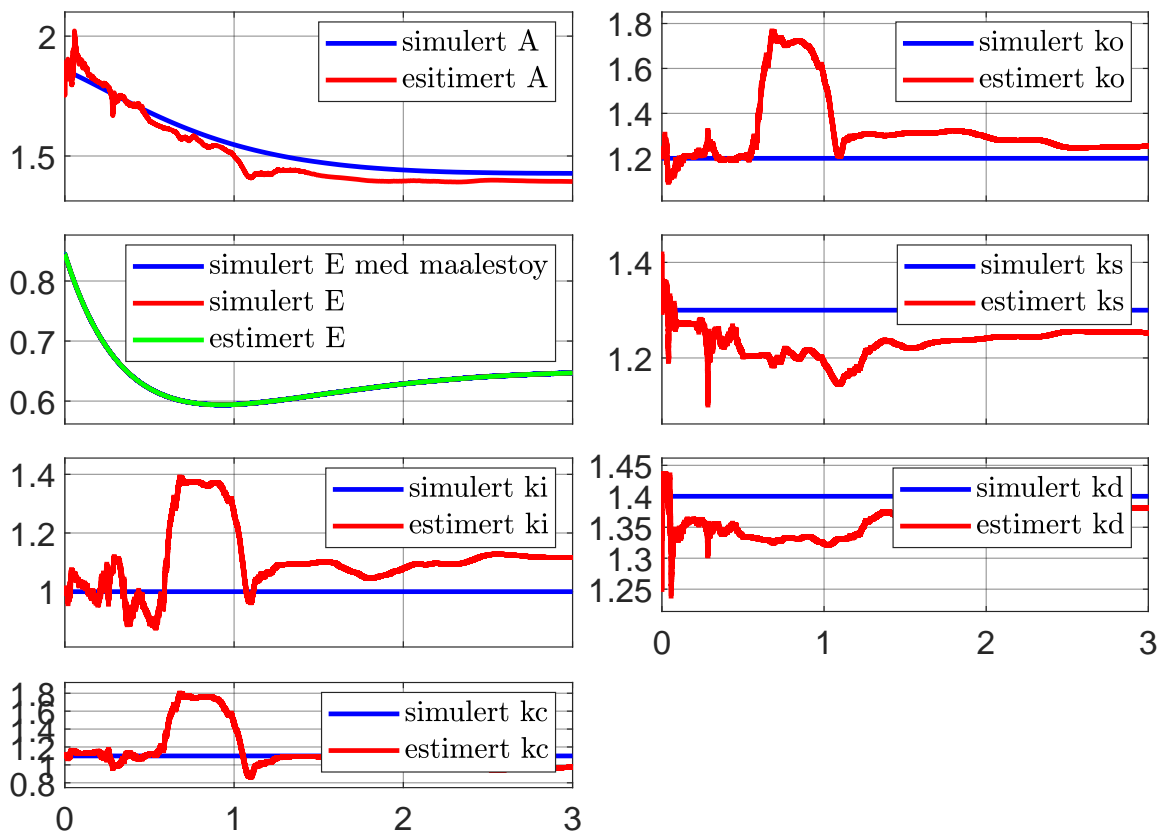
Simuleringen av versjon 11 er vist i figur B.7. Her er det mengden av stoffet A og syntesefluksen d_i som blir målt. Figur B.7 viser at Kalmanfilteret kun klarer å estimere k_i .



Figur B.7: Simulering av versjon 11, med metode 2. Med målestøy og prosesstøy.

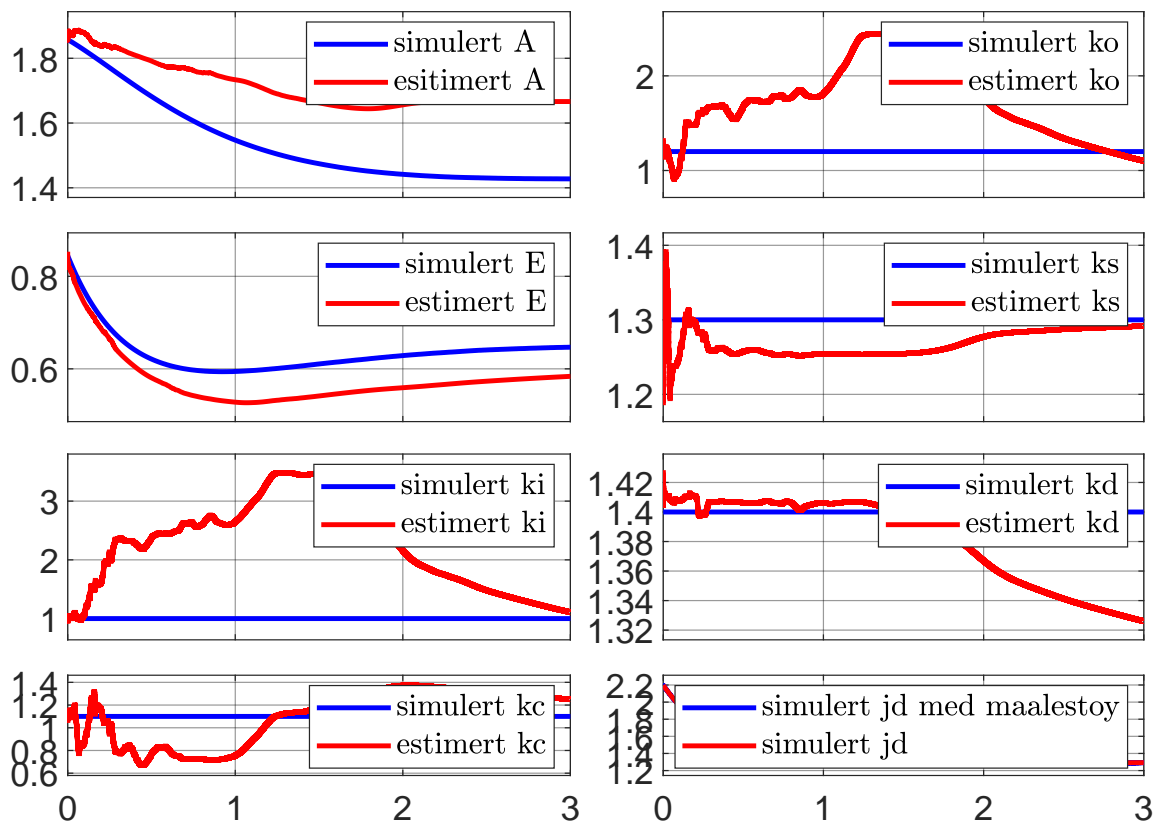
B.3 Versjon 12-14/Panel H-J: Målinger relatert til E

De tre siste versjonene bruker bare målinger som er relatert til stoffet E , altså mengden E , degradasjonsfluksen j_d eller begge sammen. Simuleringen av versjon 12 er vist i figur B.8, og her er det mengden E som blir målt. Figuren viser at ingen av parametrene er estimerbare med støy.



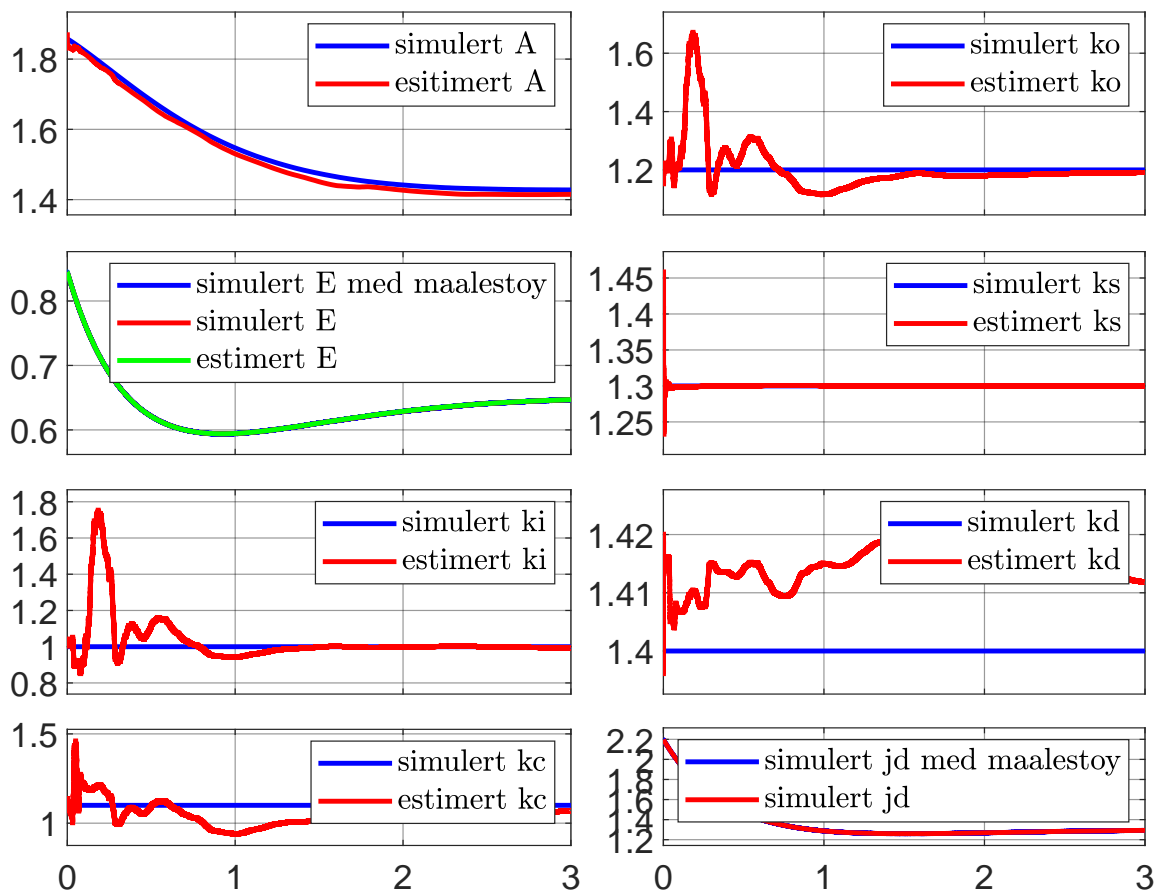
Figur B.8: Simulering av versjon 12, med metode 2. Med målestøy og prosessstøy.

Figur B.9 viser simuleringen av versjon 13, hvor fluksen j_d blir målt. Kalmanfilteret klarer ikke å estimere noen av tilstandene for denne versjonen.



Figur B.9: Simulering av versjon 13, med metode 2. Med målestøy og prosessstøy.

Den siste versjonen bruker både mengden av stoffet E og degradasjonsfluksen j_d som målinger. Figur B.10 viser at k_i , k_o og k_s ble estimert korrekt for versjon 14.



Figur B.10: Simulering av versjon 14, med metode 2. Med målestøy og prosesstøy.