Kapitel 4

Ermittlung von Abbildungen aus Zeitreihen

Wie in Kapitel 1 deutlich geworden ist, besteht ein Hauptproblem bei der Behandlung nichtlinearer Dynamik im Auffinden von effektiven Modellen. Falls die Dynamik nicht schon als Differentialgleichung vorliegt, ist es zweckmäßiger, den Umweg über die kontinuierliche Darstellung zu vermeiden und stattdessen zu versuchen, eine Abbildung direkt aus den gemessenen Daten zu erhalten.

In Kapitel 2 wurde bereits erläutert, daß Abbildungen in der Regel effektiver zur Vorhersage oder Steuerung genutzt werden können als Differentialgleichungen.

Die Bestimmung von unbekannten Parametern eines Modells erfolgt grundsätzlich in zwei Schritten. Zunächst überlegt man sich, wie man die Güte eines Modells als Funktion der unbekannten Parameter mathematisch fassen kann. Danach sucht man dasjenige Modell mit der maximalen Güte. Letztendlich muß also ein Optimierungsproblem gelöst werden.

4.1 Ermittlung geeigneter Qualitätsfunktionen

Die grundlegende Idee, die den Verfahren zur Ermittlung niederdimensionaler Modelle aus experimentellen Datensätzen zugrundeliegt, ist die Aufteilung der komplexen Dynamik der Meßwerte in einen deterministischen Anteil und einen stochastischen. Letzterer soll die Einflüsse von zufälligen Meßfehlern („Meßrauschen“) und nicht ganz versklavten Freiheitsgraden des Systems („Systemrauschen“) aufnehmen und es damit ermöglichen, daß der deterministische Anteil nicht zu kompliziert wird.

Gegeben sei eine große Zahl N von Meßwerten $\vec{x}_i, i = 1, \ldots, N$ einer Zeitreihe. Dabei seien die $\vec{x}_i$ entweder stroboskopisch ($t_i = i \cdot T$) oder im Sinne einer Poincaré-

Abbildung geeignet getriggert aufgenommen. Durch ein Verfahren sind diejenigen Parameter $\vec{p}$ und $\vec{q}$ eines Modells

$$\vec{x}_{i+1} = \vec{f}(\vec{x}_i, \vec{p}) + \vec{\hat{R}}(\vec{q}) \tag{4.1}$$

so zu bestimmen, daß diese Funktion ein optimales Modell für die Dynamik von $\vec{x}$ ist. Dabei stellt die Funktion $\vec{f}$ den deterministischen Anteil der Modelldynamik dar. $\vec{\hat{R}}(\vec{q})$ ist der Rauschanteil, der mit den Zahlen $q_1, q_2, \ldots, q_r$ beschrieben werden soll.

4.1.1 Least-Square-Fit

Wenn vor allem der Aspekt der Steuerung im Vordergrund steht, erhält man ohne Berücksichtigung der Natur des Rauschens die Forderung [CKHJ90]:

$$-Q_l = \sum_{i=1}^{N-1} \|\vec{f}(x_i, \vec{p}) - \vec{x}_{i+1}\|^2 \rightarrow \text{Min !} \tag{4.2}$$

Daraus ergeben sich die optimalen Parameter $\vec{p}$. Diese Wahl der Qualitätsfunktion Q_l liefert einen sog. Least-Square-Fit. Diese Methode sagt weder etwas über die Natur des Rauschanteils aus, noch ist sie geeignet, sichere Aussagen über das Langzeitverhalten der Dynamik zu machen, weil die Parameter, die vor allem die Langzeitdynamik charakterisieren (z.B. Dämpfungsparameter) mit dieser Methode im allgemeinen nur sehr ungenau ermittelt werden können [Kun91].

4.1.2 Langzeitvorhersagen

Die Forderung, daß das Modell (4.1) auch für eine Vorhersage über längere Zeiten gut sein soll, kann man im Sinne eines Least-Square-Fits folgendermaßen formulieren:

$$\sum_{i=1}^{N-r} \|\vec{f}^r(x_i, \vec{p}) - \vec{x}_{i+r}\|^2 \rightarrow \text{Min !} \tag{4.3}$$

Hier wird das Modell für den r-fachen Zeitschritt optimiert ($f^2(x_i, \vec{p}) := f(f(x_i, \vec{p}), \vec{p})$ usw.).

Als Ansatz für die Funktion f bietet sich zum Beispiel ein Euler-Schritt einer Modell-Differentialgleichung der Dynamik mit unbestimmten Koeffizienten $\vec{p}$ an. Eine kompakte Darstellung von f^r für große r erhält man durch analytische Berechnung der stroboskopischen Abbildung (vgl. Kapitel 2.2, Beispiel in Kapitel 6).

Um eine Gütefunktion zu erhalten, die ein auf mehreren Zeitskalen gutes Modell liefert, addiert man mehrere Terme der Form (4.3) für verschiedene r.

Die Frage ist, wie man die Terme für die unterschiedlichen Zeitschritte wichten soll. Bei chaotischen Systemen ist es einleuchtend, daß längere Korrelationen nicht berücksichtigt werden können. Andererseits ist man bei periodischen Systemen gerade am Langzeitverhalten interessiert. Im Stadium der Modellbildung läßt sich aber — vor allem bei relativ hohem Rauschanteil — die Frage schlecht entscheiden, ob das System chaotisch ist oder nicht.

Eine Möglichkeit besteht darin, den größten Lyapunov-Exponenten abzuschätzen, etwa mit der Methode von [BBA90]. Einen allgemeineren Zugang erhält man jedoch durch die konsequente Anwendung statistischer Methoden.

4.1.3 Die Maximum-Likelihood-Methode ohne Langzeitterme

Wird die Dynamik von vornherein als statistischer Prozeß mit deterministischem Anteil aufgefaßt, besteht die Modellierung aus der Angabe einer Übergangswahrscheinlichkeit von einem Zustand $\vec{x}_i$ zu einem Zustand $\vec{x}_{i+1}$:

$$\Theta(\vec{x}_i, \vec{x}_{i+1}, \vec{p}, \vec{q}) = R(\vec{f}(\vec{x}_i, \vec{p}) - \vec{x}_{i+1}, \vec{q}) = R(\vec{\varepsilon}_i, \vec{q}) \tag{4.4}$$

Dabei wurde die Abkürzung $\vec{\varepsilon}_i := \vec{f}(\vec{x}_i, \vec{p}) - \vec{x}_{i+1}$ für den Differenzvektor zwischen der Vorhersage des $i+1$-ten Werts aus dem i-ten, und dem wirklichen $i+1$-ten Meßwert eingeführt. Für das Beispiel normalverteilten Rauschens hat $R(\vec{\varepsilon}_i, \vec{q})$ mit $q_j = 1/\sigma_j$ die Form:

$$R_g(\vec{\varepsilon}_i, \vec{q}) = \frac{1}{N(\vec{q})} \exp\left(\|\vec{\varepsilon}_i \cdot \vec{q}\|^2\right) \tag{4.5}$$

$N(\vec{q})$ muß wie üblich so gewählt werden, daß das Integral über alle möglichen Werte $\vec{\varepsilon}_i$ eins ergibt. R_g ist offensichtlich eine auf mehrere Dimensionen verallgemeinerte Gauß'sche Glockenkurve.

Aus dem Modellansatz für die Übergangswahrscheinlichkeit und den Meßdaten bildet man die Likelihoodfunktion L:

$$L = \prod_{i=1}^{N-1} T(\vec{x}_i, \vec{x}_{i+1}, \vec{p}, \vec{q}) \tag{4.6}$$

Das Maximum von L bestimmt die optimalen Parameter $\vec{p}$ und $\vec{q}$. Dieser Ansatz hat gegenüber anderen Methoden (z.B. Momentenmethode) einige entscheidende Vorteile: Maximum-Likelihood-Methoden haben unter allen asymptotisch normalverteilten Schätzungen die größte Wirksamkeit [BS89, Kap. 5.2.2.2]. Das bedeutet, daß die in den Meßdaten enthaltenen Informationen von der Maximum-Likelihood-Methode optimal verwertet werden.

Dieses Verfahren ist sehr allgemein, wobei man sich jedoch in der Praxis normalerweise auf Funktionen R der Form

$$R(\vec{\varepsilon}_i, \vec{q}) = \frac{1}{N(\vec{q})} \exp\left(-P(\vec{\varepsilon}_i, \vec{q})\right) \tag{4.7}$$

beschränkt, in denen $P(\vec{\varepsilon}_i, \vec{q})$ ein positives Polynom niedrigen Grades ist. Statt dem Maximum von L kann man nämlich auch das von $\ln L$ suchen und erhält dann folgende Bedingung:

$$(N-1) \cdot \ln N(\vec{q}) + \sum_{i=1}^{N-1} P(\vec{y}_i, \vec{q}) \rightarrow \text{Min !} \tag{4.8}$$

Offensichtlich reduziert sich hier das Optimierungsproblem auf die Suche des Minimums von Polynomen. Im Falle einer Gaußverteilung ist P vom Grad 2; damit ist (4.8) äquivalent zu (4.2), dem Least-Square-Fit.

4.1.4 Die Maximum-Likelihood-Methode mit Langzeittermen

Interessanter wird die Anwendung der Likelihood-Funktion bei der Hinzunahme von Langzeittermen, die sich formal so schreiben lassen:

$$\Theta^r(\vec{x}_i, \vec{x}_{i+r}, \vec{p}, \vec{q}) = \int_{\vec{a}}^{\vec{b}} \Theta^{r-1}(\vec{x}_i, \vec{z}, \vec{p}, \vec{q}) \cdot \Theta^1(\vec{z}, \vec{x}_{i+r}, \vec{p}, \vec{q}) dz_1 dz_2 \ldots dz_m \tag{4.9}$$

mit $\Theta^1(\vec{z}, \vec{x}_{i+r}, \vec{p}, \vec{q}) = \Theta(\vec{z}, \vec{x}_{i+r}, \vec{p}, \vec{q})$. $\vec{a}, \vec{b}$ sind die Grenzen des physikalisch relevanten Gebietes.

Es wird über alle m Komponenten aller möglichen Zwischenzustände $\vec{z}$ integriert. Θ^r beschreibt die Beziehung zwischen den Meßwerten x_i und x_{i+r}.

Wir betrachten nur Übergangswahrscheinlichkeiten Θ, die als Polynom in allen Variablen und Parametern darstellbar sind. Die Integrationen über die Zwischenzustände lassen sich dann immer analytisch ausführen.

Die zu maximierende Likelihoodfunktion ist:

$$L = \prod_{i=1}^{N-r_{\max}} \prod_{r=1}^{r_{\max}} \Theta^r(\vec{x}_i, \vec{x}_{i+r}, \vec{p}, \vec{q}) \to \text{Max!} \tag{4.10}$$

Zur Suche des Maximums von L verwendet man am besten das Verfahren aus Kapitel 4.2.1.

Die Langzeitterme werden bei dieser Methode automatisch richtig gewichtet. Für chaotische Systeme liefern die Faktoren für große r keine falschen Ergebnisse, sind aber unwichtig, da sie keinen scharfen Peak haben. Bei periodischen Systemen wird aber durch diese Methode die Langzeitinformation der Dynamik für der Modellbildung genutzt.

Die Methode ist deshalb so wertvoll, weil man im Stadium der Modellbildung bei verrauschten Systemen noch gar nicht weiß, ob die Dynamik periodisch oder chaotisch ist.

4.2 Neue Verfahren zur nichtlinearen Optimierung

Die Ermittlung optimaler Modelle führt letztendlich auf das Problem der Suche des Maximums der Qualitätsfunktion. Die Lage des Maximums bestimmt die unbekannten Modellparameter. In der Regel sind mehrere Parameter zu bestimmen, die im allgemeinen nichtlinear in die Gütefunktion eingehen.

Es sollen hier zwei neue Verfahren zu diesem Problem der nichtlinearen Optimierung erläutert werden, die interessante Vorteile gegenüber Konkurrenzverfahren bieten. Beide Verfahren sind im momentanen Stand auf Polynome anwendbar, wobei eine Verallgemeinerung auf andere Funktionenklassen denkbar ist. Die zugehörigen Programme finden sich im Anhang B.

4.2.1 Suche des absoluten Minimums oder Maximums eines Polynoms durch algebraische Bisektion

Das Problem besteht in der Suche des absoluten Maximums eines Polynoms in n Variablen:

$$P(x_1, x_2, \ldots, x_n) := \sum_{i_1=0}^{r_1} \sum_{i_2=0}^{r_2} \cdots \sum_{i_n=0}^{r_n} c_{i_1,i_2,\ldots,i_n} {x_1}^{i_1} \cdot {x_2}^{i_2} \cdot \ldots \cdot {x_n}^{i_n} \tag{4.11}$$

im Intervall $x_1 \in I_1 = [a_1; b_1], x_2 \in I_1 = [a_2; b_2], \ldots, x_n \in I_n = [a_n, b_n]$, oder kürzer:

$$P(\vec{x}) := \sum_{\vec{i}=\vec{0}}^{\vec{r}} c_{\vec{i}} \prod_{j=1}^{n} {x_j}^{i_j} \tag{4.12}$$

mit $x_i \in I_i = [a_i; b_i]\ \forall i = 1, \ldots, n$.

Das Maximum des Polynoms läßt sich mit folgendem Algorithmus finden [TEH+90]:

1. Teile das Intervall bezüglich einer Variablen x_i in b Teilbereiche. Schätze eine Untergrenze $L(P(\vec{x}))$ und eine Obergrenze $U(P(\vec{x}))$ des Polynoms in jedem Teilbereich. Eine günstige Wahl ist $b = 4$.
2. Wenn die Obergrenze des Polynoms in einem bestimmten Teilbereich kleiner ist als die Untergrenze des Polynoms in irgendeinem anderen Teilbereich, kann ersterer Teilbereich das Maximum nicht enthalten und braucht deshalb nicht weiter berücksichtigt zu werden.
3. Schätze Unter- und Obergrenzen für die Ableitungen $\frac{\partial P(\vec{x})}{\partial x_i}$ in jedem noch zu behandelnden Teilbereich.
4. Wenn in einem Teilbereich gilt: $U(\frac{\partial P(\vec{x})}{\partial x_i}) < 0$, kann dieser das Maximum nicht enthalten, es sei denn, die linke Teilintervallgrenze fällt mit der linken Grenze des Gesamtgebiets zusammen (bezogen auf die ausgewählte Variable).
5. Analog kann ein Teilbereich das Maximum nicht enthalten, wenn gilt: $L(\frac{\partial P(x)}{\partial x}) > 0$, es sei denn, der Teilbereich liegt am rechten Rand.
6. Für jeden Teilbereich, den man nicht durch (2., 4., 5.) ausschließen konnte, muß die Prozedur bei (1.) startend für eine weitere Variable x_i wiederholt werden, bis die gewünschte Genauigkeit in jeder Variable erreicht ist.

Oft können alle Teilbereiche ausgeschlossen werden, außer dem, der das Maximum enthält. Wenn mehrere Maxima mit gleichem Funktionswert in verschiedenen Teilbereichen existieren sollten, werden alle diese Teilbereiche erhalten bleiben. Der Algorithmus erkennt auch Maxima am Rand des Definitionsgebiets.

Abschätzung einer Ober- und Untergrenze eines Polynoms in einem gegebenen Intervall

Gegeben sei das Polynom $P(\vec{x}) := \sum_{\vec{i}=\vec{0}}^{\vec{r}} c_{\vec{i}} \prod_{j=1}^{n} {x_j}^{i_j}$ im Intervall $\left[\vec{a}, \vec{b}\right]$.

Durch die Koordinatentransformation

$$x_i = (b_i - a_i)\hat{x}_i + a_i \quad \forall i = 1, \ldots, n \tag{4.13}$$

wird das gegebene Intervall auf das Einheitsintervall $\left[\vec{0}, \vec{1}\right]$ transformiert, wodurch sich neue Koeffizienten $\hat{c}_i$ ergeben. Eine weitere simple Transformation $\hat{P} = P - \hat{c}_{\vec{0}}$ sichert: $\hat{P}(\vec{\hat{x}} = \vec{0}) = 0$.

Die Summe kann dann aufgespalten werden in einen Teil $u(\hat{P}(\vec{\hat{x}}))$ mit lauter positiven Koeffizienten und einen Teil $\ell(\hat{P}(\vec{\hat{x}}))$ mit lauter negativen Koeffizienten. Offensichtlich ist der erste Teil streng monoton steigend und der zweite streng monoton fallend. Außerdem gilt für $\vec{\hat{x}} \in \left[\vec{0}, \vec{1}\right]$: $\ell(\hat{P}(\vec{\hat{x}})) < \hat{P}(\vec{\hat{x}}) < u(\hat{P}(\vec{\hat{x}}))$.

$$\hat{P}(\vec{\hat{x}}) := \underbrace{\sum_{\vec{i}=\vec{0}, \hat{c}_{\vec{i}}>0}^{\vec{r}} \hat{c}_{\vec{i}} \prod_{j=1}^{n} x_j{}^{i_j}}_{u(\hat{P}(\vec{\hat{x}}))} + \underbrace{\sum_{\vec{i}=\vec{0}, \hat{c}_{\vec{i}}<0}^{\vec{r}} \hat{c}_{\vec{i}} \prod_{j=1}^{n} x_j{}^{i_j}}_{\ell(\hat{P}(\vec{\hat{x}}))} \tag{4.14}$$

Eine grobe Abschätzung der oberen Grenze $U(\hat{P}(\vec{\hat{x}}))$ ist demnach

$$U(\hat{P}(\vec{\hat{x}})) = u(\hat{P}(\vec{1})) = \sum_{\vec{i}=\vec{0}, \hat{c}_{\vec{i}}>0}^{\vec{r}} \hat{c}_{\vec{i}} \tag{4.15}$$

Analog ergibt sich die untere Grenze zu

$$L(\hat{P}(\vec{\hat{x}})) = \ell(\hat{P}(\vec{1})) = \sum_{\vec{i}=\vec{0}, \hat{c}_{\vec{i}}<0}^{\vec{r}} \hat{c}_{\vec{i}} \tag{4.16}$$

Verbesserte Abschätzungen der Ober- und Untergrenzen

Das schlichte Addieren der positiven bzw. negativen Koeffizienten eines Polynoms führt zu einer recht groben Abschätzung der Ober- bzw. Untergrenze. Im folgenden wird ein verbesserter Algorithmus für die Berechnung der Obergrenze gezeigt. Die Untergrenze erhält man dann leicht mit:

$$L(P(\vec{x})) = -U(-P(\vec{x})) \tag{4.17}$$

Die genauere Abschätzung ergibt sich unter Verwendung der Relation

$$-x^{\alpha} > -x^{\beta} \quad \text{für} \quad x \in [0, 1] \quad \text{und} \quad \alpha > \beta \tag{4.18}$$

Ein negativer Term, z.B. $a_{\vec{i}} \prod_{j=1}^{n} x_j{}^{i_j}$, kann damit ersetzt werden durch den sicher größeren Term $a_{\vec{i}} \prod_{j=1}^{n} x_j{}^{k_j}$, mit $k_j \geq i_j$ für alle $j = 1, \ldots, n$.

Beispiel für ein eindimensionales Polynom:

$$P(x) = -x + 3x^2 + 2x^4 - 6x^5 + 4x^7$$

dessen grob abgeschätzte Obergrenze sich zu $U(x) = 9$ ergibt.

Durch Ersetzung aller x^i mit negativen Koeffizienten durch x^k, mit $k \geq i$, erhält man ein neues Polynom $P^*(x) > P(x)$. Im Beisipiel: $P^*(x) = -x^2+3x^2+2x^4-6x^7+4x^7 = 2x^2 + 2x^4 - 2x^7$. Der Ersetzungsprozeß kann mit folgendem Schema veranschaulicht werden:

x^1	x^2	x^3	x^4	x^5	x^6	x^7
-1	3	0	2	-6	0	4

Die Exponenten wachsen von links nach rechts. Demnach ist das Verschieben eines Koeffizienten von links nach rechts äquivalent zur oben erklärten Substitution. Nach dem Verschieben der negativen Koeffizienten kann man sie mit den positiven verrechnen. Die übrigbleibenden Koeffizienten bilden das neue Polynom $P^*(x)$.

Anwendung von (4.15) auf das neue Polynom $P^*(x)$ liefert $U(x) = 4$, eine wesentlich bessere Abschätzung für die Obergrenze des Polynoms.

Das Verfahren läßt sich leicht auf mehrere Dimensionen übertragen. Ein zweidimensionales Beispiel:

$$\begin{aligned} P(x) &= -3x_1 + 6{x_1}^2 + 3{x_1}^3 - 8x_2 + 2x_1x_2 - 5{x_1}^3x_2 + x_1{x_2}^2 \\ &\quad -8{x_1}^2{x_2}^2 + {x_2}^3 + 4x_1{x_2}^3 + 3{x_1}^2{x_2}^3 + 6{x_1}^3{x_2}^3 \end{aligned}$$

Die nach (4.15) grob berechnete Obergrenze ergibt sich zu $U(x) = 26$.

Die Koeffizienten lassen sich wieder in ein Schema eintragen, wobei diesmal die Exponenten von links nach rechts und von oben nach unten zunehmen:

	${x_1}^0$	${x_1}^1$	${x_1}^2$	${x_1}^3$
${x_2}^0$	0	-3	6	3
${x_2}^1$	-8	2	0	-5
${x_2}^2$	0	1	-8	0
${x_2}^3$	1	4	3	6

Negative Koeffizienten darf man deshalb sowohl nach unten als auch nach rechts verschieben. Optimale Anwendung dieser Möglichkeiten liefert als neues Polynom $P^*(x) \geq P(x)$:

$$P^*(x) = 3{x_1}^2 + 3{x_1}^3 - 4{x_1}^3{x_2}^3$$

Anwendung von (4.15) auf $P^*(x)$ liefert $U(x) = 6$ als wesentlich besseren Wert für die Obergrenze.

Komplexität und Rechenzeit

Die nichtlineare Optimierung gehört zu den sog. NP-harten Problemen, d.h. die Komplexität des Algorithmus, also die Anzahl der durchzuführenden Rechenoperationen wächst schneller als polynomial (Nicht Polynomial) mit der Komplexität des Problems. Im Falle der Optimierung von Polynomen wächst die Komplexität des Problems mit der Zahl der Variablen, mit dem Grad des Polynoms und mit der gewünschten Genauigkeit.

Die Komplexitätstheorie der Informatik zeigt, daß alle NP-harten Probleme zueinander gleichwertig sind [HU90, S.353],[Kar86]. Diese Aussagen beziehen sich stets auf allgemeine Probleme, d.h. es gibt keinen Algorithmus, der *alle* nichtlinearen Polynome in polynomialer Zeit optimieren kann. Über kleinere Klassen von Polynomen macht die Komplexitätstheorie keine Aussage, insbesondere wenn es um die mathematisch schwer definierbare Klasse der physikalisch relevanten Polynome geht. Die Aussagen der Komplexitätstheorie lassen sich deshalb nur beschränkt zur Entwicklung besserer Algorithmen nutzen [Zen92].

Der oben beschriebene Algorithmus ist eine neue Methode, mit der man *in praxi* das Problem der nichtlinearen Optimierung angehen kann. Er ergänzt andere Methoden, indem er für eine andere Teilklasse von Problemen geeignet scheint als bisher bekannte Verfahren.

Das Problem bei der nichtlinearen Optimierung liegt darin, daß man nicht jede „Ecke" des Definitionsgebietes untersuchen kann, weil es einfach in einem hochdimensionalen Raum zuviele davon gibt. Wollte man sich rein numerisch einen Überblick über den Verlauf einer Funktion mit 100 Variablen verschaffen, indem man pro Variable an 4 Stützstellen den Funktionswert bestimmt, so müßte man 4^{100} Funktionswerte berechnen, was auf einer CRAY Y-MP etwa 10^{33} Jahre brauchen würde [Ebe89].

Die eine Strategie, um ohne die Beleuchtung jedes Winkels auszukommen, ist die Verwendung stochastischer Algorithmen (Simulated Annealing, Genetische Algorithmen), die allerdings aufgrund ihrer Natur nicht immer das Optimum finden.

Der oben beschriebene Algorithmus umgeht das Problem dadurch, daß analytisch berechnete Unter- und Obergrenzen es ermöglichen, ganze Teilintervalle von der weiteren Untersuchung auszuschließen. In jedem Teilschritt werden nur absolut sichere Aussagen erzielt.

Die Rechenzeit wächst im allgemeinen bei weiterer Verfeinerung des Gitters kaum an, da die Zahl der zu untersuchenden Teilintervalle ungefähr konstant bleibt. Das Anwachsen ist auf die länger werdenden rationalen Zahlen zurückzuführen, die durch ihre „unendliche Genauigkeit" numerische Probleme ausschließen.

Ein Testlauf für ein Problem mit 100 Variablen benötigte auf einer SUN 3/50 drei

Tage, verschwindend kurz im Vergleich zu 10^{33} Jahren!

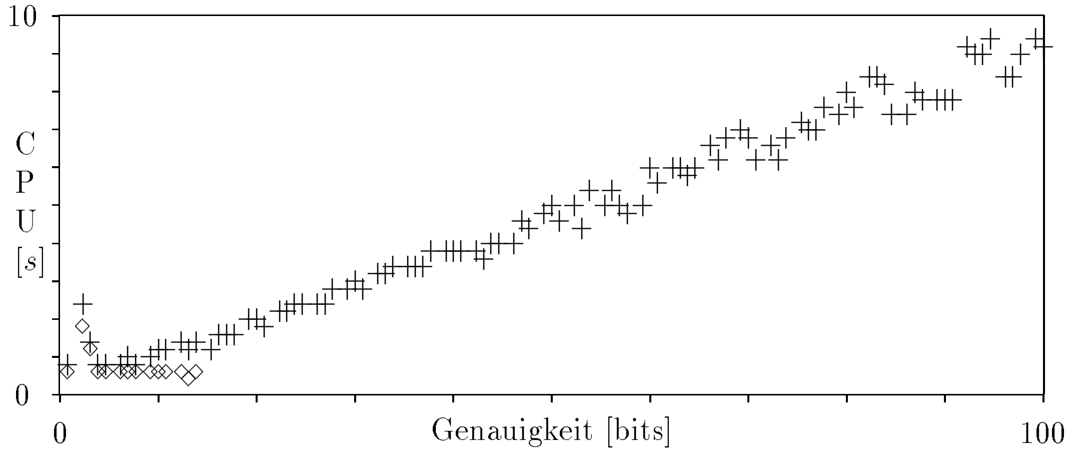

Abbildung 4.1: Rechenzeit pro Iteration bei der Maximumsuche von $f(x) = x^2 - x^4 + \frac{x}{100}$, $x \in [-1, 1]$ bei Verwendung von rationalen Zahlen (+) und Gleitkomma-Arithmetik ($\diamond$) (aus: [TEH91]). Da sich die beiden Maxima nur sehr wenig voneinander unterscheiden und die Maxima recht flach sind, läßt sich unter Verwendung von Gleitkomma-Zahlen keine höhere Genauigkeit als ca. 14 bit erreichen.

Während der ersten Iterationen können normalerweise nicht alle Intervalle bis auf eines eliminiert werden. Dadurch wächst die benötigte Rechenzeit pro Iteration zunächst an. Jedoch verbessert sich die Güte der Abschätzungen, wenn die Intervalle kleiner werden, so daß in den folgenden Iterationen die Zahl der Intervallkandidaten wieder drastisch sinkt. Die Rechenzeit bleibt dann nahezu konstant, wenn Gleitkomma-Arithmetik verwendet wird. Bei Verwendung von rationaler (exakter) Arithmetik steigt die Rechenzeit etwa linear mit der Zahl der zur Darstellung der Intervallgrenzen benötigten Ziffern (vgl. Abb. 4.1).

4.2.2 Analytischer Fit des Maximums einer positiven Funktion

Die Suche des absoluten Maximums nichtlinearer Funktionen wird unter anderem dadurch erschwert, daß verschiedene lokale Maxima sich nur unwesentlich in ihrem Funktionswert unterscheiden. Es ist aber bekannt, daß der Unterschied größer wird, wenn man statt der Funktion selbst das Quadrat oder eine noch größere Potenz der Funktion betrachtet. Im Extremfall überragt dann das eine größte Maximum alle anderen um Größenordnungen.

In diesem Fall kann man das Maximum einfach erhalten, indem man innerhalb des zu durchsuchenden Intervalls eine Parabel an die potenzierte Funktion anpaßt. Die

Anpassung und die Bestimmung des Scheitels der Parabel kann analytisch geschehen, so daß das Maximum als Funktion eines Kontrollparameters erhalten wird.

Als Gütefunktion dient dabei die quadratische Abweichung $\left(f(x)^{m_p} - (ax^2 + bx + c)\right)^2$, multipliziert mit einer Gewichtsfunktion $f(x)^{m_w}$, die gewährleistet, daß Abweichungen nur in der Nähe des Maximums gewertet werden. Um den Rechenaufwand in Grenzen zu halten, wählt man $m_p \in \{8, 10, 12\}$ und $m_w \in \{2, 4\}$.

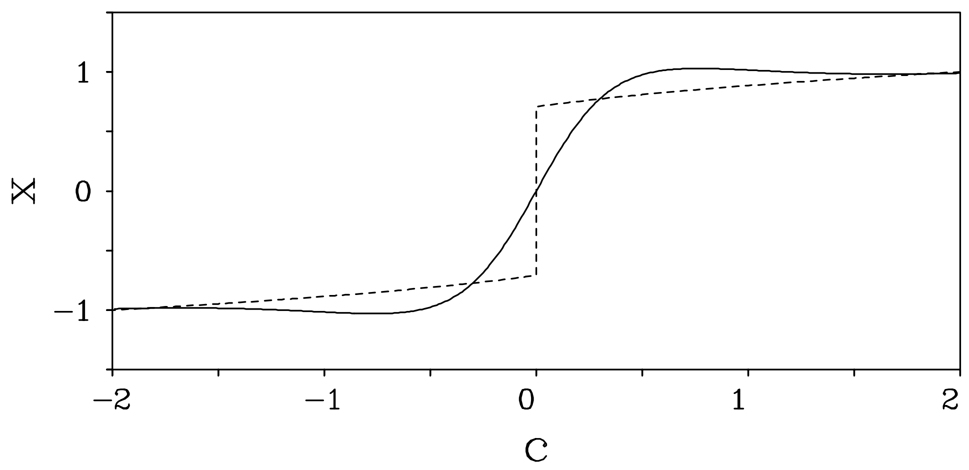

Abbildung 4.2: Lage des Maximums des Polynoms $P(x) = 10 - x^4 + x^2 + cx$ (gestrichelt) und Lage des Scheitels der angepaßten Parabel (durchgezogen) als Funktion des Parameters c. Für diesen Plot wurde $m_p = 10$ und $m_w = 2$ gewählt. Das Suchintervall ist $[-1.5, 1.5]$.