

Zur Lösung nichtlinearer Ausgleichungsprobleme bei der Bestimmung von Frequenzen in Zeitreihen

vorgelegt von
Diplom-Ingenieur
Rainer Mautz

Vom Fachbereich 9 - Bauingenieurwesen und Angewandte Geowissenschaften
der Technischen Universität Berlin
zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor der Ingenieurwissenschaften
- Dr. Ing. -
genehmigte Dissertation

Promotionsausschuss:

Vorsitzender: Prof. Dr. rer. nat. Hans Jürgen Burkhardt

Gutachter: Prof. Dr.-Ing. Dieter Lelgemann

Gutachter: Prof. Dr.-Ing. Lothar Gründig

Gutachter: Prof. Dr.-Ing. Erik W. Grafarend

Tag der wissenschaftlichen Aussprache: 08.12.2000

Berlin 2001

D83

Kurzfassung

Im Hinblick auf die Geodäsie werden Lösungsverfahren für nichtlineare Ausgleichsprobleme vorgestellt. Die zu verwendenden Verfahren lassen sich, den Problemklassen entsprechend, in die beiden Gruppen der lokalen und globalen Optimierung einteilen. Bei vielen geodätischen Ausgleichsproblemen lassen sich gute Näherungswerte finden, so daß der Einsatz eines lokalen Verfahrens, wie beispielsweise das Gauß-Newton-Verfahren, gerechtfertigt ist. Steht jedoch keine ausreichende Näherungslösung zur Verfügung und ist die Zielfunktion multimodal, so muß eine globale Minimumsuche durchgeführt werden. Die Anwendung eines globalen Optimierungsverfahrens liefert lediglich eine probabilistische Lösung; das Auffinden des globalen Minimums ist nicht garantiert. Es läßt sich jedoch zeigen, daß in Kombination von lokaler und globaler Optimierung und unter Einbringung aller verfügbaren a priori-Informationen ein globales Optimierungssystem aufgebaut werden kann, daß für eine sehr große Problemklasse brauchbare Resultate liefert. Mit steigender Leistungsfähigkeit der Rechner erhöht sich auch die Effizienz der rechenintensiven, globalen Verfahren.

Ein Beispiel für eine globale Optimierungsaufgabe ist die Spektralanalyse von Zeitreihen für unbekannte Frequenzen. Im Gegensatz zum klassischen Fouriermodell werden die Frequenzen nicht von vorne herein festgelegt, so daß sich ein nichtlineares, multimodales Minimierungsproblem ergibt. Das Verfahren zur Spektralanalyse mit beliebigen Frequenzen erfolgt mit Hilfe von heuristischen Konstruktions- und Ersetzungsoperatoren, wobei die Bestimmung der Amplituden und Perioden als lineares Problem abgespalten wird. Das Modell mit unbekanntem Frequenzen wurde auf Daten einer Altimetermessung angewendet. Die Vorteile gegenüber einer Fourierreihe sind Stabilität bei Datenlücken und physikalische Interpretierbarkeit der Schwingungen. Ferner kann mit Hilfe des neuen Modells die Anzahl der Modellparameter reduziert werden.

Abstract

With regard to geodesy optimizing procedures for nonlinear adjustment problems are presented. The procedures can be divided into local and global optimization techniques according to the type of the problem. If good initial values are given, the usage of local optimization techniques, (e.g., the Gauß-Newton procedure) is justified. If this is not the case, and the minimizing function has various local minimums, a global strategy must be implemented. Applying global optimization techniques one will not yield the global solution with certainty; only a probabilistic solution will be obtained. Nevertheless, combining local and global strategy and inclusion of all available a priori-information, a global optimizing system can be established that yields practical results for a wide area of problems. With the increase of the capacity of modern computers the efficiency of global optimization algorithms comes along.

One example of a global optimization problem is the spectral analysis of a time series with the frequencies as unknowns. In contrast to the classic Fourier series, the frequencies are not given a priori. This results a nonlinear, multimodal optimization problem. The technique of spectral analysis for unknown frequencies applies heuristic operators of construction and replacement, whereas the determination of the amplitudes and phase shifts can easily be solved as a linear problem detached from the heuristic algorithm. The model function with frequencies as unknowns has been taken as a basis to model data from an altimeter satellite. In comparison to the Fourier series, the solutions are physically interpretable and numerically stable in the event of data gaps and allow the description of data with fewer parameters.

1	Einleitung	7
1.1	Motivation	7
1.2	Abriß der Arbeit	7
2	Optimierungsprobleme in der Geodäsie	9
2.1	Parameterschätzung durch Minimierung einer Norm	9
2.2	Optimierungsaufgabe mit Nebenbedingung	11
2.3	Betrachtung der Zielfunktion	11
2.4	Abgrenzung der linearen Probleme	13
2.5	Geschlossene Lösungen	14
	Wege zur geschlossen Lösung eines Normalgleichungssystems	16
	Wege zur geschlossen Lösung mit Hilfe der Computeralgebra	16
2.6	Iterationsverfahren	17
3	Lokale Optimierung, Gradientenverfahren	19
3.1	Das klassische Gradientenverfahren	20
3.2	Das Newton-Raphson-Verfahren	21
3.3	Das modifizierte Newton-Raphson-Verfahren	22
3.4	Das Gauß-Newton-Verfahren	23
3.5	Direkte Optimierungsverfahren	27
3.6	Verfahren mit Intervallschachtelung	27
3.7	Das Downhill-Simplex-Verfahren	28
4	Globale Optimierung	30
4.1	Grundlagen der globalen Optimierung	30
	Heuristiken	30
	Algorithmenbegriff	30
	Praktikabilität	31
	Eigenschaften des Lösungsraumes im Hinblick auf die globale Optimierung	31
	Lösungsmengen des globalen Optimierungsproblems	32
	Attraktionsgebiet eines Minimums	32
	Teure und billige Zielfunktionen	33
	Spezialisierung der Problemklasse durch Vorinformationen	33
	Globale und lokale Strategie eines Optimierungsverfahrens	34
	Strategien globaler Optimierungsverfahren	34
4.2	Überdeckungsverfahren	34
	Sequentielle Überdeckungsverfahren	35
4.3	Stichprobenverfahren	36
	Vorteile der Stichprobenverfahren	36
	Erzeugung von Zufallszahlen	36
	Erzeugung von normalverteilten Zufallszahlen	37
	Klassifikation der heuristischen Verfahren	37
	Allgemeine Vorgehensweise bei direkten, globalen Optimierungsverfahren	38
4.4	Nicht adaptive Verfahren, Monte-Carlo-Methoden	38
4.5	Markov-Verfahren	39
4.6	Hill Climbing	40
4.7	Sintflut Algorithmus	41
4.8	Threshold Accepting	41
4.9	Simulated Annealing	41
	Konvergenz des Verfahrens	43
	Asymptotische Konvergenz des homogenen Simulated Annealing	43
	Asymptotische Konvergenz des inhomogenen Simulated Annealing	43
	Konvergenz für zeitlich begrenztes Simulated Annealing	44
4.10	Verfahren, die mehrere Funktionswerte speichern	44
4.11	Generationelle Verfahren	44
	Initialisierung	45
	Paarung	45
	Mutation	45
	Selektion	45
	Konvergenz und Abbruchbedingung	46
4.12	Bestrafungsverfahren	46

4.13 Neuronale Netze	46
5 Spektralanalyse mit beliebigen Frequenzen als Modellunbekannte	47
5.1 Funktionales Modell und Problemstellung	47
5.2 Abspaltung exakt lösbarer Probleme	48
5.3 Einbringung verfügbarer Vorinformationen	50
5.4 Rechentechnische Vereinfachungen	51
Sonderfall Frequenzen im ganzzahligen Verhältnis	51
Sonderfall gleichabständige Beobachtungen	52
Sonderfall eine Frequenz	53
5.5 Grundsätzlicher Aufbau der heuristischen Frequenzanalyse	53
Initialisierung	53
Iterationsvorgang	53
Abbruchkriterium	54
Strategien bei Konstruktion des Unbekanntenvektors	54
5.6 Erweiterung des funktionalen Modells durch Polynome	54
5.7 Kombination des heuristischen Verfahrens mit Gradientenmethoden	55
5.8 Fehlerschätzung	56
6 Heuristische Optimierung der Frequenzen an Testdaten	58
6.1 Vergleich verschiedener Strategien	58
Zeitreihe 1	58
Fourieranalyse	58
Lokales Optimierungsverfahren	59
Vergleich verschiedener heuristischer Strategien	60
6.2 Behandlung von Datenlücken	61
6.3 Ergebnisse der heuristischen Optimierung	63
Zeitreihe 2	64
Minimierung der Anzahl Modellparameter	64
Bestimmung der Modellparameter und Bewertung der Ergebnisse	65
Power und Spektrale Energie	65
7 Anwendung der heuristischen Spektralanalyse bei der Trennung geodätisch-geophysikalischer Signale in Altimeterdaten	67
7.1 Einleitung zur Altimetermessung	67
7.2 Verwendete ERS-1 Altimeterdaten	67
7.3 Ergebnisse der heuristischen Optimierung (Alongtrack-Schritt)	68
Vergleich verschiedener funktionaler Modelle	69
Identifikation einzelner Frequenzen im Powerspektrum	72
Ergebnisse bei großen Datenlücken	72
Identifikation einzelner Frequenzen	73
Spektrale Energie	75
7.4 Ergebnisse der heuristischen Optimierung (Zeitreihenschritt)	76
8 Zusammenfassung	79
Ausblick	80
Literaturverzeichnis	81
Symbolverzeichnis	83
Anhang	85
Lebenslauf	87
Danksagung	87

1 Einleitung

1.1 Motivation

Die Geodäsie ist ständig mit nichtlinearen Aufgabenstellungen konfrontiert. Dem Auftreten nichtlinearer Probleme entgegnet man, falls eine Berechnung nicht geschlossen möglich ist, mit der Verwendung von iterativen Verfahren. Hinter dem Begriff „Ausgleichung“ verbirgt sich meist das iterative Gauß-Newton-Verfahren, dessen schematisierter Einsatz die Unzulänglichkeiten in den Hintergrund gedrängt hat. Versagt das Verfahren, beispielsweise bei nicht ausreichend genau vorgegebenen Näherungswerten, sind Alternativen nicht immer vorhanden.

Allzu oft sind die verwendeten Modellfunktionen nicht an die physikalischen Gegebenheiten, sondern im Hinblick auf die Schematisierbarkeit der Berechnung angepaßt worden. Insbesondere auf dem Gebiet der Zeitreihenanalyse lassen sich viele Beispiele für mathematische Modelle finden, die der Natur nicht entsprechen. Die Folge sind große Residuenanteile oder eine unnötig hohe Anzahl an Parametern.

Erst seit einigen Jahren sind vermehrt geodätische Arbeiten über nichtlineare Modelle veröffentlicht worden. TEUNISSEN (1990) diskutierte die theoretischen Hintergründe einiger Iterationsverfahren und deren Konvergenzkriterien. GRAFAREND, SCHAFFRIN (1990) und LOHSE (1994) untersuchten nichtlineare Modelle am Beispiel des Bogenschnittes. Darüber hinaus erläuterte LOHSE (1994, S. 41 - 60) die Gradientenmethoden im Rahmen der lokalen Optimierung. Ein Überblick der Arbeiten auf diesem Themengebiet bietet CASPARY et al. (1991). SINGER (1995, S. 60 - 64) stellt die nichtlineare Ausgleichsrechnung zusammenhängend dar. Für viele Autoren steht das Herleiten einer geschlossenen Lösung im Vordergrund.

Läßt sich jedoch keine geschlossene Lösung finden und sind die Gradientenmethoden wegen fehlender Näherungswerte unzulänglich, muß auf andere Methoden zurückgegriffen werden. Die globalen, bzw. heuristischen¹ Optimierungsverfahren schließen hier eine methodische Lücke. Das zunehmend an Bedeutung gewinnende Gebiet der globalen Optimierung könnte auch ein fester Bestandteil der Geodäsie werden. In den Fachgebieten Mathematik (NOLTE 1997), Informatik (LAARHOVEN & AARTS 1988), (TÖRN & ŽILINSKAS 1988), (SCHWEHM 1996), (UMLAND 1996), Chemie (KRUEL 1992), Physik (GUSE 1996, Kap. 2), Bionik (RECHENBERG 1989) und Elektrotechnik haben sich globale Berechnungsmethoden schon seit einigen Jahren etabliert. Mit steigender Leistungsfähigkeit der Rechner erhöht sich auch die Effizienz der rechenintensiven, globalen Verfahren. Selbst große Datenmengen, wie sie in der Geodäsie anfallen, ließen sich in endlicher Rechenzeit bewältigen.

Im Rahmen dieser Arbeit soll der Zugang zur globalen Optimierung geebnet werden. Häufig werden heuristische Verfahren als „unsauber“ oder „unschön“ abgetan, weil das Resultat nicht aus einer geschlossenen Formel besteht. Bisher wurde jedoch nicht beachtet, daß die globale Optimierung den Vorteil völliger Freiheit bei der Modellbildung bietet. Die Linearität der Unbekannten im Modell spielt keine entscheidende Rolle mehr. Die Parameterschätzung von neuen funktionalen Zusammenhängen, die bisher nur schwer zugänglich waren, läßt sich auf alle bekannten Normen anwenden.

An einem Beispiel, das in der Zeitreihenanalyse geodätischer Daten von Bedeutung ist, wird die Unzulänglichkeit des klassischen Modells offenbart und die Nützlichkeit eines neuen, nichtlinearen Modells aufgezeigt. Es handelt sich um die Spektralanalyse von Datenreihen. Die heutigen Zeitreihenanalytiker stehen vor dem ungelösten Problem, überlagerte Periodizitäten zu entschlüsseln (SCHLITGEN & STREITBERG 1984), (XU 1992), (STUBENVOLL 2000). Einerseits sind in der Regel keine Näherungswerte vorhanden, andererseits ergibt sich durch trigonometrische Funktionen ein nichtlineares Problem. Das klassische Fouriermodell mit vorgegebenen Frequenzen ist nur bedingt zur Beschreibung harmonischer Schwingungen geeignet. Mit Hilfe von Fourierfrequenzen lassen sich kaum Rückschlüsse auf die physikalischen Ursachen der überlagerten Periodizitäten ziehen. In dieser Arbeit wird ein Modell eingeführt, in dem die Frequenzen als Unbekannte beliebige Werte annehmen können. Einzelne harmonische Schwingungen werden in ihrer Frequenz, Phasenlage und Amplitude identifiziert. Die Berechnung des Modells erfolgt mit Hilfe heuristischer Strategien. Es wird ein Verfahren vorgestellt, daß robust ist gegenüber großen Datenlücken, geringer Datenkonsistenz und Überlagerung von Schwingungen.

1.2 Abriß der Arbeit

In **Kapitel 2** wird verdeutlicht, daß jede geodätische Parameterschätzung ein Optimierungsproblem darstellt. Es läßt sich stets eine Zielfunktion formulieren, deren globales Minimum gesucht ist. Die Eigenschaften der Zielfunktion entscheiden darüber, welches Lösungsverfahren zu verwenden ist. Zunächst werden alle geschlossen lösbaren

¹ leitet sich aus dem griechischen „heuriskein“ ab und bedeutet „erfinderisch sein“

Probleme abgegrenzt, wie beispielsweise lineare Zielfunktionen, da geschlossene Formeln allen anderen Lösungsstrategien vorzuziehen sind.

Im **Kapitel 3** wird ein Überblick auf die lokale Optimierung gegeben. Ziel ist es, die in der Geodäsie beliebten Gradientenverfahren auf eine bestimmte Problemklasse abzugrenzen. Deutlich wird, daß der Erfolg eines lokalen Verfahrens von vorhandenen Startwerten abhängt. Der Einsatz lokaler Verfahren beschränkt sich daher auf Probleme, bei denen die „Lösung“ praktisch schon bekannt ist. Mit anderen Worten: die Näherungswerte müssen im Attraktionsgebiet des globalen Minimums liegen. Aber selbst in diesem Fall ist die Konvergenz nicht immer garantiert. Nur für einfache Aufgaben kann Konvergenz nachgewiesen werden.

Das **Kapitel 4** legt die Grundlagen der globalen Optimierung. Das Minimierungsproblem einer multimodalen Zielfunktion wird vorgestellt. Ein solches globales Optimierungsproblem erfordert Lösungsverfahren, die als „heuristisch“ bezeichnet werden, denn die systematische Durchsuchung des Lösungsraumes scheitert oft mangels Effizienz. Unter der Vielfalt heuristischer Optimierungsstrategien werden die gängigsten vorgestellt. Entscheidend ist nicht die Verwendung einer speziellen heuristischen Strategie, sondern das Einbringen von a priori-Informationen, die Abspaltung linearer Teilprobleme und die Umsetzung rechentechnischer Vereinfachungen.

Kapitel 5 bildet den Kern dieser Arbeit. Es folgt eine Spezialisierung der globalen Optimierung auf ein nichtlineares Problem. Sich überlagernde harmonische Schwingungen einer Zeitreihe sollen identifiziert werden. Dabei sollen die Frequenzen beliebige Werte annehmen können. Das entsprechende funktionale Modell wird eingeführt und im Hinblick auf die Anwendung eines globalen Verfahrens umgeformt. Es erfolgt der Aufbau eines Optimierungsverfahrens gemäß der im vorangegangenen Kapitel beschriebenen Vorgehensweise. Dabei wird insbesondere Wert auf die Abspaltung linearer Teilprobleme gelegt. Die Integration einer lokal optimierenden Gradientenmethode ist dabei für das globale Optimierungssystem von entscheidender Bedeutung.

Im **Kapitel 6** wird anhand künstlich generierter Testdaten die Leistungsfähigkeit des neuen Modells demonstriert. Es werden verschiedene heuristische Strategien und die Fourieranalyse nach ihrer Praktikabilität getestet und miteinander verglichen. Die Ergebnisse des Fouriermodells werden einer kritischen Betrachtung unterzogen. Dabei werden offensichtliche Unzulänglichkeiten aufgedeckt.

Im **Kapitel 7** wird gezeigt, daß die heuristische Frequenzanalyse auf reales Datenmaterial erfolgversprechend angewendet werden kann. Die Alongtrackdaten eines ERS-1 Satellitenaltimeters werden auf langwellige Bahnfehler hin untersucht. Das Modell mit beliebigen Frequenzen ermöglicht die Identifizierung einzelner harmonischer Schwingungen einschließlich ihrer mittleren Abweichungen. Einige Epochen enthalten besonders große Datenlücken. Während die Fourieranalyse dort numerische Instabilitäten aufweist, zeigt sich die Robustheit des alternativen Modells.

2 Optimierungsprobleme in der Geodäsie

2.1 Parameterschätzung durch Minimierung einer Norm

Die Aufgabe der Geodäsie, die physikalische Realität zu beschreiben, kann in der Regel nicht direkt vollzogen werden. Vielmehr stehen die Zielgrößen \mathbf{u} mit den direkten Beobachtungen \mathbf{y} in einen funktionalen Zusammenhang, dem Hypothesen über die Physik und die Geometrie des Beobachtungsaufbaus zu Grunde liegen. Man nennt den mathematischen Zusammenhang f funktionales Modell. Wäre das Modell vollständig und existierten weder grobe noch zufällige Fehler in den Daten, würde gelten:

$$\mathbf{y} = f(\mathbf{x}, \mathbf{u}). \quad (1)$$

Hierbei seien \mathbf{x} und \mathbf{y} Beobachtungspaare, also feste und lediglich vom Meßexperiment abhängige Größen, wobei \mathbf{x} als fehlerfrei betrachtet wird. Mit \mathbf{u} werden die unbekannt, noch zu schätzenden Parameter bezeichnet. Über den funktionalen Zusammenhang f können die Modelleigenschaften gezielt modifiziert werden. Für weitere Betrachtungen soll das funktionale Modell f um ein stochastisches Modell erweitert werden, womit zufälligen Fehlern im Datenmaterial Rechnung getragen wird. Die Modellbildung schreibt sich in folgender Form

$$\mathbf{y} = f(\mathbf{x}, \mathbf{u}) + \mathbf{v}. \quad (2)$$

Darin bezeichnet $\mathbf{y} \in \mathfrak{R}^n$ einen Vektor mit beobachteten Werten, $\mathbf{v} \in \mathfrak{R}^n$ einen Vektor mit Residuen in Form zufälliger Fehler, $\mathbf{u} \in \mathfrak{R}^m$ einen Vektor von unbekannt Parametern². In der Regel sind nicht alle physikalischen und geometrischen Hintergründe vollständig durch das Modell beschrieben, die Widersprüche eines unvollständigen Modells sind dann keinesfalls zufällig, wodurch die Residuen \mathbf{v} in (2) nicht mehr als zufällig betrachtet werden können. Um \mathbf{v} frei von Systematiken zu halten, muß das Modell um nicht zufällige, systematische Einflüsse \mathbf{s} ergänzt werden:

$$\mathbf{y} = f(\mathbf{x}, \mathbf{u}) + \mathbf{s} + \mathbf{v}. \quad (3)$$

Hierbei sei erwähnt, daß grobe Fehler, die in einzelnen Beobachtungen auftreten, keine Systematik aufweisen. In statistischen Tests von Hypothesen zeichnen sich grob fehlerhafte Meßwerte durch eine hohe Signifikanzzahl α aus und können meistens durch geeignete Ausreißertests eliminiert werden. Daher soll auf grobe Fehler nicht weiter eingegangen werden. Weiterhin wird vorausgesetzt, daß die Modellbildung bis auf die zufälligen Fehler im Datenmaterial vollständig ist. Im folgenden wird von dem vollständigen Modell (2) ausgegangen.

Das Ziel, nämlich die Bestimmung der unbekannt Parameter, kann aus der Menge der Vektoren \mathbf{u} erfolgen, für die alle n Beobachtungsgleichungen (2) erfüllt sind. Für jede numerische Schätzung von $\mathbf{u} \in \mathfrak{R}^m$ existiert ein bestimmter Vektor $\mathbf{v} \in \mathfrak{R}^n$. Nicht jede beliebige Schätzung ist jedoch sinnvoll. Für \mathbf{v} können zusätzliche Bedingungen eingeführt werden, die der Natur möglichst nahe kommen. Diese Bedingungen begrenzen die Anzahl der Lösungen. Sinnvoll ist es, Bedingungen einzuführen, so daß die Residuen \mathbf{v} in einem bestimmten Sinn „in ihrer Gesamtheit klein“ werden. Minimierungsvorschriften, im allgemeinen Normminimierungen genannt, laufen also darauf hinaus, ein Minimum, bzw. allgemein ein Optimum zu finden. Durch eine Norm wird die Metrik des Lösungsraumes festgelegt. Um als Norm $\|f\|$ akzeptiert zu werden, sollte ein funktionales Modell nach FRIEDRICH (1999) folgende Eigenschaften besitzen:

$$\|f\| \geq 0 \quad (4)$$

$$\|\alpha f\| = |\alpha| \cdot \|f\| \quad (5)$$

$$\|f_1 + f_2\| = \|f_1\| + \|f_2\| \quad (6)$$

$$\|f\| = 0, \text{ wenn } f = 0. \quad (7)$$

² n = Anzahl der Beobachtungen, m = Anzahl der Unbekannt. Strenggenommen müßte an Stelle von \mathbf{u} immer u_j stehen, um anzuzeigen, daß \mathbf{u} nicht nur eine Unbekannte, sondern ein Vektor mit $1, \dots, m$ Unbekannt darstellt. Zwecks Übersichtlichkeit soll jedoch darauf verzichtet werden.

Der Abstand zwischen zwei Elementen des Raums kann damit definiert werden. Die bekannten Normen sind die L_∞ -, L_1 - und die L_2 -Norm. $L_\infty \rightarrow \min$. bedeutet, daß der Betrag des Maximalwertes aus allen Residuen minimal wird,

$$L_\infty\text{-Norm: } \|\mathbf{v}\|_\infty = |v_{\max}| \rightarrow \min. \quad (8)$$

Während mit $L_1 \rightarrow \min$ die Betragssumme des Residuenvektors \mathbf{v} minimiert wird,

$$L_1\text{-Norm: } \|\mathbf{v}\|_1 = \sum_{i=1}^n |v_i| \rightarrow \min. \quad (9)$$

soll bei der von C. F. GAUß (1809) vorgeschlagenen Minimierung der Summe der Residuenquadrate (gleichbedeutend mit Minimierung der L_2 -Norm oder der Euklidischen Norm) der Betrag des Vektors \mathbf{v} minimiert werden:

$$L_2\text{-Norm: } \|\mathbf{v}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n v_i^2} \rightarrow \min.. \quad (10)$$

Sind die Beobachtungen unterschiedlicher Güte, mißt man den einzelnen Meßwerten verschiedene Bedeutung zu. In diesem Fall wird die gewichtete Summe der Residuenquadrate $\sum \rho_i v_i$ ($\rho_i \in \mathfrak{R}^n$) minimiert. Jede Normenbedingung bildet eine, von allen Residuen abhängige Zielfunktion (auch Qualitätsfunktion Q), dessen absolutes Minimum gesucht ist:

$$Q = F(v_i) \rightarrow \min, \text{ wobei } v_i = y_i - f_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \quad (11)$$

Hiermit wird deutlich, daß sich das Problem der Parameterschätzung (auch Parameteroptimierung) als Minimierungsaufgabe formulieren läßt. Allgemein kann von einem Optimierungsproblem gesprochen werden, denn jedes Maximierungsproblem geht durch einfache Substitution von Q durch $-Q$ in ein Minimierungsproblem über. Es genügt daher, von der Suche des globalen Minimums $\bar{\mathbf{u}}$ zu sprechen.

Die jeweilige Lösungsstrategie ist vom Charakter der Zielfunktion abhängig. Da Zielfunktionen in der Geodäsie an Komplexität, Dimensionalität und Art der darin enthaltenen Funktionen sehr verschieden sind, erklärt sich die Vielfalt der Lösungsansätze. Die Leistungsfähigkeit der Lösungsstrategien hängt von der Komplexität des Problems ab. Die Klassifikation der Lösungsstrategien soll daher in dieser Arbeit anwenderbezogen sein, d.h. die Verfahren werden vorrangig danach eingeteilt, welche Art von Probleme sie lösen können. Zweitrangig werden sie nach den Methoden klassifiziert, auf denen sie basieren.

Die Lösungsstrategien sind normabhängig. Die meisten Strategien basieren auf der L_2 -Norm. Auch in dieser Arbeit wird die Minimierung der L_2 -Norm zugrunde gelegt. Zunächst soll begründet werden, weshalb die Methode der kleinsten Quadrate eine wichtige Bedeutung hat.

Zur Bestimmung einer physikalischen Größe u liegen die Werte y_i vor. Die wahren Fehlerwerte Δ_i ergeben sich aus $\Delta_i = y_i - u$ und seien in ihrer Gesamtheit unabhängig und normalverteilt mit den Erwartungswerten $E(\Delta_i) = 0$ und $E(\Delta_i^2) = \sigma^2$, d.h. $\Delta_i \in \mathcal{N}(0, \sigma)$. $E(\Delta_i^2) = \sigma^2$ besagt, daß alle Messungen die gleiche Genauigkeit σ besitzen. $E(\Delta_i) = 0$ ist gleichbedeutend mit einer symmetrischen Verteilung. Soll aufgrund der Beobachtungen \mathbf{y} ein Schätzwert für die physikalische Größe u angegeben werden, so ist das mit der Aufgabe identisch, einen Parameter u auf Grund einer Stichprobe zu schätzen. Dies wiederum ermöglicht die Anwendung der Maximum-Likelihood-Methode (LINNİK 1961, S. 81). Die Likelihood-Funktion hat die Form

$$L(y_1, y_2, \dots, y_n, \mathbf{u}) = \sqrt{2\pi}^{-n} \sigma^{-n} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (y_i - f(\mathbf{u}))^2\right). \quad (12)$$

Die Maximum-Likelihood-Methode besagt, daß bei vorgegebenem σ die Schätzung so zu wählen ist, daß L ein Maximum erreicht. Wie aus (12) ersichtlich, ist diese Methode gleichbedeutend mit der L_2 -Norm wegen

$$Q = \sum_{i=1}^n (y_i - f(\mathbf{u}))^2 = \sum_{i=1}^n v_i^2 \rightarrow \min. \quad (13)$$

Die Minimierung der Funktion Q (13) ist identisch mit der Maximierung der Likelihood-Funktion, so daß die Lösung der L_2 -Norm-Minimierung auch als die wahrscheinlichste Lösung bezeichnet werden kann. Bei Minimierung der L_∞ und L_1 -Norm ist das nicht der Fall. Die L_1 -Norm wird häufig zum Auffinden von groben Fehlern verwendet, da sich Ausreißer durch ihre niedrige Gewichtung in den Residuen wiederfinden.

2.2 Optimierungsaufgabe mit Nebenbedingung

Optimierungsprobleme können einen unbeschränkten Lösungsraum oder aber einen durch Nebenbedingungen beschränkten Lösungsraum besitzen. Strenggenommen ist nur ein Problem mit $\mathbf{u} \in \mathfrak{R}^m$ unbeschränkt, da ja bereits die gebräuchlichen Bedingungen $\mathbf{u} \in \mathbb{N}^m$ oder $\mathbf{u} \in [a_1; b_1] \times [a_2; b_2] \times \dots \times [a_m; b_m]$ den Lösungsraum einschränken. Im letzteren Fall besteht der Lösungsraum aus einem Hyperrechteck. Man bezeichnet einen solchen Lösungsraum als „essentiell unbeschränkt“, wenn davon ausgegangen werden kann, daß sich das globale Optimum innerhalb des Hyperkörpers befindet. Die Nebenbedingungen haben in diesem Fall für die Suche nach dem Optimum keine einschränkende Bedeutung. Die Nebenbedingungen können aber auch kompliziertere Funktionen mit mehreren Parametern sein, wie beispielsweise bei Ausgleichungsproblemen mit bedingten Beobachtungen. Theoretisch lassen sich Aufgaben mit Nebenbedingungen durch das Auflösen der Bedingungsgleichungen und anschließendem Einsetzen in die Zielfunktion wieder zu einem Optimierungsproblem mit Gleichungen ohne Nebenbedingungen zurückführen. Allerdings entstehen durch die Transformation unter Umständen sehr komplizierte Zielfunktionen. Das transformierte Problem ist genauso zu behandeln, wie ein Optimierungsproblem ohne Nebenbedingungen. Da die Transformation in der Regel gelingt, soll im folgenden auf eine Betrachtung von Zielfunktionen mit zusätzlichen Bedingungen verzichtet werden.

2.3 Betrachtung der Zielfunktion

Wenn im Zusammenhang mit einer Zielfunktion von einem „Punkt“ bzw. einem „Lösungspunkt“ gesprochen wird, so ist darunter ein mit Werten innerhalb des Definitionsbereiches belegter Parametervektor $\mathbf{u} \in \mathfrak{R}^m$ zu verstehen. Die Zielfunktion bildet die Domäne, d.h. den Definitionsbereich, in eine eindimensionale Codomäne (Funktionswerte) ab, so daß $\mathfrak{R}^m \rightarrow \mathfrak{R}^1$ gilt. Da die Dimension des Definitionsbereiches der Qualitätsfunktion durch die Anzahl der unbekannt Parameter m festgelegt ist, liegt jeder Punkt der Zielfunktion auf einer m -dimensionalen Hyperfläche in einem $(m + 1)$ -dimensionalen Raum. Leicht vorstellbar ist lediglich der eindimensionale (Abb. 1) und zwei-dimensionale Fall (Abb. 2).

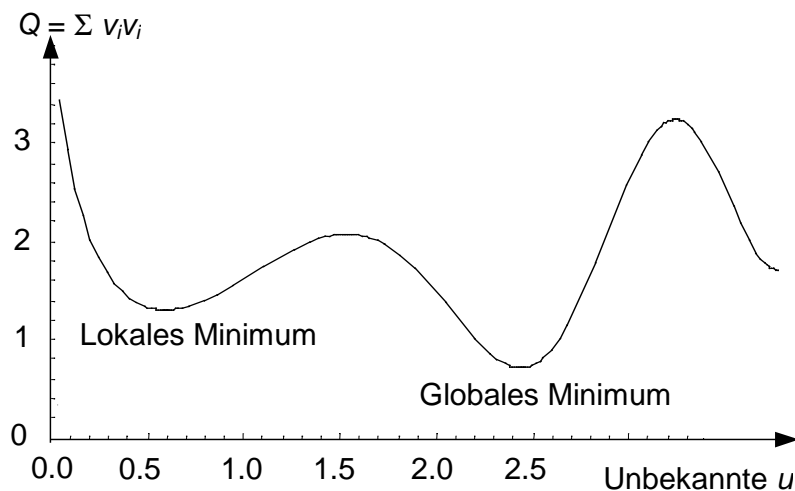


Abb. 1: Nichtlineare Zielfunktion mit einem Parameter

Für jeden Punkt, d.h. für jeden Vektor mit Unbekannten, läßt sich ein Funktionswert der Zielfunktion berechnen. Da der Funktionswert ein wichtiges Kriterium für die Güte eines Punktes ist, wird dieser Wert oft Qualität oder Fitneß bezeichnet. Ist der Funktionswert eines Punktes im Vergleich mit Punkten aus dessen lokaler Umgebung größer (bzw. kleiner) so spricht man von einem lokalen Optimum. Sind alle Funktionswerte des Definitionsbereiches ohne Ausnahme weniger optimal, so nennt man diesen Ort globales Optimum.

Im Hinblick auf die globale Optimierung ist die wichtigste Eigenschaft einer Zielfunktion die Anzahl ihrer lokalen Optima. Wenn gezeigt werden kann, daß ein Problem nur ein lokales Extremum besitzt, d.h. wenn das Problem unimodal ist, dann liefert bereits die lokale Optimierung das globale Optimum. Befinden sich beispielsweise alle

Unbekannten in allen Beobachtungsgleichungen in linearer Abhängigkeit und wird die L_2 -Norm zu Grunde gelegt, so ist die Zielfunktion immer konvex (quadratisch) und das Minimum eindeutig bestimmbar. Ein simples, ein-dimensionales Beispiel ist das arithmetische Mittel. Sollen die drei Meßwerte ($y_1 = 1, y_2 = 1, y_3 = 4$) gemittelt werden, so ist das Problem identisch mit der Lösung der Aufgabe $Q = 3u^2 - 12u + 18 \rightarrow$ Minimum, also der Suche nach dem tiefsten Punkt einer Parabel. Für diese Aufgabe sind die Zielfunktionen zur Minimierung der L_1 - und L_∞ -Norm als lineare Betragsfunktionen ebenfalls unimodal (Abb. 3).

Nichtlineare Abhängigkeiten liefern in der Regel jedoch Zielfunktionen, die mehrere lokale Minima und Maxima besitzen. Hier spricht man von einem multimodalen Problem. Für die multimodalen Probleme ist eine globale Optimierung erforderlich. Als Lösung des Minimierungsproblems kann nur das globale Minimum bezeichnet werden (Abb. 1). Häufig werden in der Literatur auch lokale Extrema als „Lösungen“ bezeichnet. Das ist darauf zurückzuführen, daß mit einer Vielzahl von lokalen Optimierungsverfahren nicht mehr als ein einziger stationärer Punkt gefunden werden kann. In Wirklichkeit ist aber nur das globale Optimum von praktischer Bedeutung, während lokale Extrema lediglich mögliche Kandidaten für das globale Minimum sind.

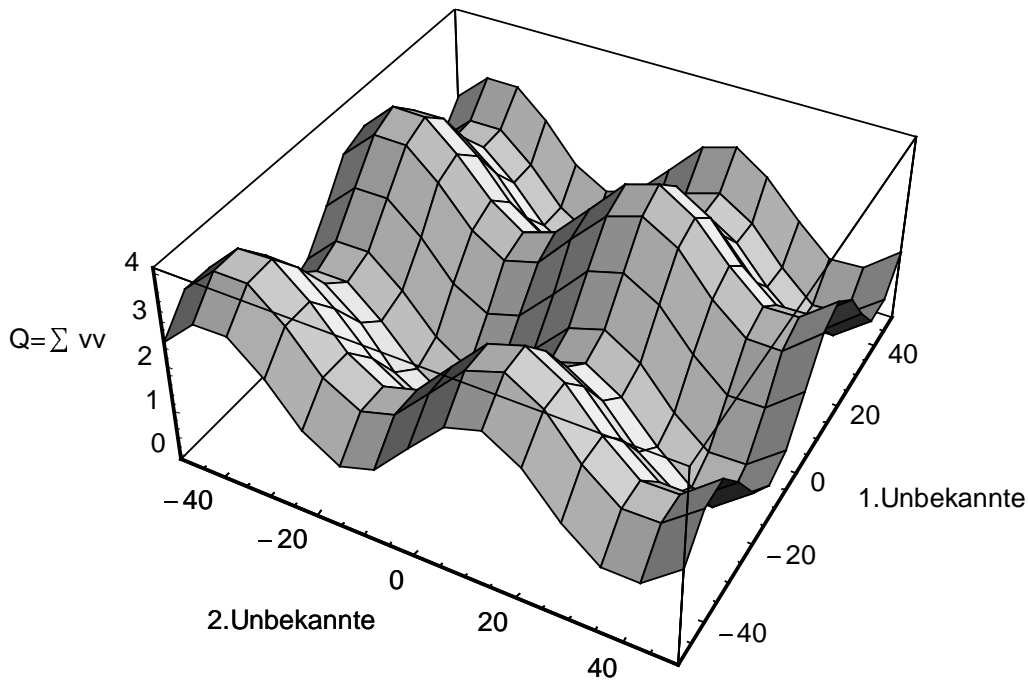


Abb. 2: Qualitätsgebirge eines nichtlinearen Zusammenhangs zweier Parameter

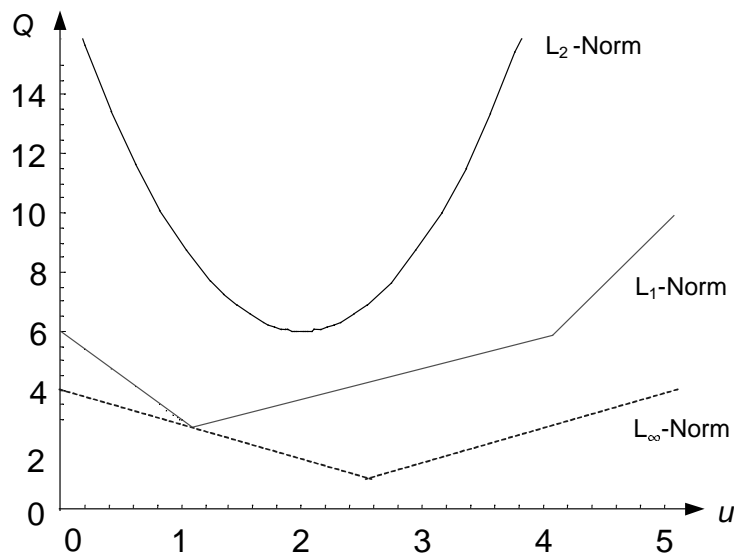


Abb. 3: Zielfunktionen der Mittelwertbildung von $y_1 = 1, y_2 = 1, y_3 = 4$ nach verschiedenen Normen

An dieser Stelle soll daraufhin gewiesen werden, daß ein Minimierungsproblem auch zwei, mehrere oder unendlich viele Lösungen haben kann, wenn zwei, mehrere oder unendlich viele Punkte die gleiche, beste Qualität ergeben. Doppeldeutige Beispiele in der Geodäsie sind der Bogenschnitt oder ein 2D Richtungs- und Streckennetz mit zwei Festpunkten ohne Richtungsanschluß. Es handelt sich um zwei Minima mit entfernt liegenden Punkten. Die Lösungsmenge der Aufgabe $\sin(u) \rightarrow \min.$ besitzt mehrere Punkte $u \in [a; b]$ oder gar unendlich viele Lösungspunkte $u \in \mathfrak{R}$, die jeweils um 2π voneinander entfernt sind. Die Mehrdeutigkeit kann nur durch Zusatzinformationen eliminiert werden. Auch numerisch instabile Probleme können eine unendliche Lösungsmenge besitzen. Nach LOUIS (1989, S. 8) heißt ein Problem „ill-posed“ oder „schlecht gestellt“, wenn keine eindeutige Lösung existiert oder keine stetige Abhängigkeit der Lösung von den Daten vorliegt. Die letzte Bedingung besagt, daß die Inverse nicht stetig ist. Geometrisch veranschaulicht, liegt im Minimalpunkt keine eindeutige, konvexe Krümmung vor, sondern dieser Bereich geht in eine Ebene über, so daß Änderungen von \mathbf{u} keine erkennbare Erhöhung der Qualität bewirken. Ein klassisches, geodätisches Beispiel ist der Rückwärtsschnitt, wenn sowohl alle Anschlußpunkte, als auch der Standpunkt auf einem Kreis, dem sogenannten „gefährlichen Kreis“ zu liegen kommen. Die unbekannt Standpunktkoordinaten bleiben dann entlang des Kreises unbestimmt.

Das globale Minimum nach der Methode der kleinsten Quadrate ist immer positiv oder nimmt den Wert 0 an. Wenn $Q_{\min} = 0$ erreicht wird, kann das zweierlei Ursachen haben: Entweder es liegen keine Überbestimmungen vor, d.h. die Anzahl der Beobachtungen n ist gleich der Anzahl der Unbekannten m oder im Falle von $n > m$ sind die Beobachtungen fehlerfrei. Letzteres ist für praktische Messungen unrealistisch, spielt aber eine bedeutende Rolle bei Experimenten mit künstlich erzeugten, fehlerfreien Daten, denn nur Punkte mit $Q = 0$ und sonst keine anderen gehören immer, ohne zu erbringenden Nachweis, zur Menge der globalen Minima.

Einen tiefen Einblick in die Geometrie der L_2 -Norm bietet GRAFAREND und SCHAFFRIN (1990). Gegenstand der Untersuchung war die geometrische Betrachtung der Erwartungswertfläche des zweidimensionalen Bogenschnittes.

Die Struktur der Qualitätsfunktion kann, wie oben schon erwähnt, sehr verschiedene Formen annehmen. Sind, im einfachsten Fall, alle Unbekannte von der Modellfunktion linear abhängig, ergibt sich nach Anwendung der Methode der kleinsten Quadrate (10) eine quadratische Zielfunktion. Die Besonderheit einer quadratischen Zielfunktion ist von zentraler Bedeutung, weil die Lösung eines solchen Systems sowohl eindeutig, als auch schematisch berechenbar ist. Hier soll das Schema ausführlich hergeleitet werden, weil zur Lösung komplizierterer Probleme später immer wieder darauf zurückgegriffen werden muß.

2.4 Abgrenzung der linearen Probleme

Sind u_j unbekannte Parameter, \mathbf{x} Konstanten, \mathbf{y} die Beobachtungen, f eine Modellfunktion der Beobachtungsanordnung und \mathbf{v} zufällige Fehler, so kann für jede einzelne Beobachtung die Gleichung $y_i + v_i = f(u_j, x_i)$ aufgestellt werden, wobei $j = 1, \dots, m$ und m sei Anzahl der unbekannt Parameter. Es sei $i = 1, \dots, n$ und n die Anzahl der Beobachtungen wobei $n \geq m$ gelte.

In jeder linearen Gleichung treten die Unbekannten nur in der ersten Potenz auf. So läßt sich jede lineare Gleichung mit den Gleichungsvariablen $u_j \in \mathfrak{R}$ demnach in der Form $\sum a_j u_j$ schreiben ($a_j \neq 0$), wobei $a_j u_j$ als lineares Glied bezeichnet wird. Lineare Beobachtungsgleichungen müssen der Form

$$v_i = \sum_{j=1}^m u_j f_j(x_i) - y_i \quad (14)$$

genügen. $f(x_i)$ entspricht dem linearen Koeffizienten a und ist unabhängig von den Unbekannten u_j . Unter Verwendung der L_2 -Norm (10) lassen sich die Beobachtungsgleichungen (14) einsetzen und es folgt

$$\sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=1}^m u_j f_j(x_i) - y_i \right)^2 \rightarrow \min.. \quad (15)$$

Zum Auffinden von stationären Punkten³ müssen alle partiellen Ableitungen $\partial / \partial u_k$ für $k = 1, \dots, m$ gleich Null sein, man erhält

³ Beschreibung der Bedingung für stationäre Punkte im folgenden Abschnitt

$$2 \sum_{i=1}^n \left[\left(\sum_{j=1}^m u_j f_j(x_i) - y_i \right) f_k(x_i) \right] = 0. \quad (16)$$

Umgeformt ergibt sich für die k -te Normalgleichung

$$\sum_{j=1}^m u_j \sum_{i=1}^n f_j(x_i) f_k(x_i) - \sum_{i=1}^n y_i f_k(x_i) = 0. \quad (17)$$

Führt man die Abkürzungen

$$a_{jk} = \sum_{i=1}^n f_j(x_i) f_k(x_i) \quad \text{und} \quad b_k = \sum_{i=1}^n y_i f_k(x_i) \quad (18)$$

ein, erhält man die gängige Schreibweise der linearen Normalgleichungen

$$\sum_{j=1}^m a_{jk} u_j - b_k = 0 \quad \text{mit} \quad k = 1, \dots, m. \quad (19)$$

Es entsteht ein lineares Gleichungssystem mit m Gleichungen und m Unbekannten u_j in ausgeschriebener Form

$$\begin{aligned} u_1 a_{11} + u_2 a_{12} + \dots + u_k a_{1k} - b_1 &= 0 \\ u_1 a_{21} + u_2 a_{22} + \dots + u_k a_{2k} - b_2 &= 0 \\ \dots & \\ u_1 a_{k1} + u_2 a_{k2} + \dots + u_k a_{kk} - b_k &= 0 \end{aligned} \quad (20)$$

Zur Lösung eines solchen Gleichungssystems verwendet man oft den Gauß-Algorithmus. Häufig bedient man sich der Matizenschreibweise, indem man die Koeffizienten a_{jk} in einer \mathbf{N} -Matrix, der sogenannten Normalgleichungsmatrix, die u_k in einem \mathbf{x} -Vektor und die b_k in einem \mathbf{b} -Vektor zusammenfaßt: $\mathbf{N} \mathbf{x} = \mathbf{b}$, bzw. $\mathbf{x} = \mathbf{N}^{-1} \mathbf{b}$. Unter der Voraussetzung, daß alle Normalgleichungen voneinander linear unabhängig sind, existiert eine eindeutige Lösung, die gleichzeitig das absolute Minimum der L_2 -Norm darstellt. Unter der Voraussetzung, daß es sich um eine vollbesetzte Matrix handelt, wächst der Rechenaufwand des Gauß-Algorithmus mit m^3 . Damit wächst die Rechenzeit für große Probleme mit vielen Unbekannten unverhältnismäßig stark an.

2.5 Geschlossene Lösungen

Aufgrund des im vorangegangenen Abschnitt beschriebenen Lösungsweges für lineare Probleme, werden von nun an nur noch die nichtlinearen Aufgabenstellungen behandelt. Die Nichtlinearität eines Problems der Ausgleichsrechnung bedeutet keineswegs, daß die Aufgabe nicht geschlossen lösbar ist. Von einer geschlossenen Lösung ist die Rede, wenn die Lösungsmenge mit Hilfe von Elementarfunktionen ermittelt werden kann, wie beispielsweise bei einer polynomialen Gleichung bis zum Grade vier.

Eine Möglichkeit zur Bestimmung des globalen Minimums besteht darin, alle lokalen Extremstellen zu finden, denn, wie oben schon erwähnt, muß das globale Minimum ein Element der Menge der lokalen Minima sein. Die Zielfunktion $Q: F \in \mathfrak{R}^m \rightarrow \mathfrak{R}$ soll zunächst auf lokale Extrema untersucht werden. Die Funktion besitzt an der Stelle $\bar{\mathbf{u}}$ ein lokales Minimum, wenn für alle Elemente \mathbf{u} einer geeigneten Umgebung stets $F(\mathbf{u}) \geq F(\bar{\mathbf{u}})$ gilt. Ist die Funktion darüber hinaus nach allen Variablen partiell differenzierbar, so wird der Gradient ∇F notwendigerweise identisch Null. Ist also $\nabla F(\bar{\mathbf{u}}) = 0$, so heißt $\bar{\mathbf{u}}$ kritischer oder stationärer Punkt von F .

Durch partielle Differentiation der Zielfunktion erhält man die Komponenten des Gradienten. Für einen Gradienten identisch Null müssen alle Komponenten zu Null werden, es lassen sich dementsprechend genauso viele Stationaritätsbedingungen, auch Normalgleichungen genannt, aufstellen, wie Unbekannte vorhanden sind. Die Normalgleichungen lauten

$$\frac{\partial f(\mathbf{u})}{\partial u_k} = 0, \quad \text{mit} \quad k = 1, \dots, m. \quad (21)$$

Bei spezieller Betrachtung der Residuenquadrateminimierung, ergibt sich für eine Gradientenkomponente k ,

$$\frac{\partial}{\partial u_k} \left(\sum_{i=1}^n v_i^2 \right) = \frac{\partial}{\partial u_k} \left(\sum_{i=1}^n (y_i - f_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}))^2 \right) = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - f_i(\mathbf{x}, \mathbf{u})) \frac{\partial}{\partial u_k} f_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \quad (22)$$

und es folgen die nichtlinearen Normalgleichungen

$$\sum_{i=1}^n \left[(y_i - f_i(\mathbf{x}, \mathbf{u})) \frac{\partial}{\partial u_k} (f_i(\mathbf{x}, \mathbf{u})) \right] = 0, \quad \text{mit } k = 1, \dots, m. \quad (23)$$

Nicht jedes lokale Extremum muß notwendigerweise ein stationärer Punkt sein, denn für stationäre Punkte wird die Existenz des Gradienten vorausgesetzt. Ein Beispiel dafür bietet die Funktion $f(\mathbf{u}) = |\mathbf{u}|$, die zwar am Punkt $\mathbf{u} = 0$ ein lokales Minimum besitzt, deren Ableitung f' jedoch nicht existiert. Generell müssen Randextrema bei den folgenden Betrachtungen ausgeschlossen werden, sie befinden sich an den Grenzen des Definitionsbereiches und zeichnen sich nicht immer durch besondere differentialgeometrische Eigenschaften aus. Eine gesonderte Randwertbetrachtung ist durchzuführen. Auch sollte die Wahl des Definitionsbereiches für alle Unbekannten auf geometrischen oder physikalischen Sinnzusammenhang überprüft werden.

Stationäre Punkte können Minima, Maxima oder Sattelpunkte sein, d.h. nicht jeder stationärer Punkt, der (23) erfüllt, ist notwendigerweise ein Minimum. Lösungen der Normalgleichungen sind also nur notwendige, aber nicht hinreichende Bedingungen für lokale Minima. Erst durch eine positiv definite 2. Ableitung kann auf ein Minimum geschlossen werden. Im höherdimensionalen Fall bei mehr als einer Unbekannten ist die sogenannte Hessesche Matrix \mathbf{H}

$$H(i, j) = \frac{\partial^2 f(\mathbf{u})}{\partial u_i \partial u_j}, \quad \text{mit } i = 1, \dots, m, j = 1, \dots, m \quad (24)$$

der Zielfunktion zu bilden, deren Komponenten durch das zweimalige Differenzieren erhalten werden. Die hinreichende Bedingung für ein lokales Minimum ist, daß ein stationärer Punkt vorliegt und daß die Hessesche Matrix positiv definit ist. Positiv definit ist eine symmetrische Matrix \mathbf{H} genau dann, wenn für alle Vektoren $\mathbf{u} \neq 0$ $\mathbf{u}^T \mathbf{H} \mathbf{u} > 0$ gilt. Die praktische Überprüfung kann durch Berechnung der Eigenwerte der Matrix \mathbf{H} erfolgen, wenn alle Eigenwerte oder alle Diagonalelemente einer gewöhnlichen Dreieckszerlegung positiv sind (ZURMÜHL 1965, S. 144). Ein Beispiel einer Anwendung der Hesseschen Matrix auf dem Gebiet der Geodäsie bieten GRAFAREND und LOHSE (1991). Sie stellen eine nichtiterative Lösung der Transformation zwischen kartesischen Koordinaten und krummlinigen ellipsoidischen Koordinaten vor. Es ist ein Punkt auf dem Ellipsoid zu finden, der den minimalen Abstand von einem vorgegebenen Punkt im kartesischen System besitzt. Das dafür notwendige Lösen eines Normalgleichungssystems, bestehend aus vier algebraischen Gleichungen, liefert lediglich die stationären Punkte. Erst wenn ein stationärer Punkt eine positiv definite Hessesche Matrix herbeiführt, handelt es sich um die Lösung des Minimierungsproblems.

Ist die Matrix \mathbf{H} eines stationären Punktes positiv semidefinit, d.h. es gilt $\mathbf{u}^T \mathbf{H} \mathbf{u} \geq 0$, so ist nur die notwendige, nicht aber die hinreichende Bedingung für ein lokales Minimum erfüllt. Zur eindeutigen Identifizierung eines Minimums müßten in diesem Fall höhere Ableitungen untersucht werden. Um größeren Rechenaufwand zu vermeiden, wird in der Praxis häufig auf die Aufstellung der Hesseschen Matrix verzichtet, wenn durch Zusatzinformationen sichergestellt werden kann, welche stationären Punkte Minima, Maxima oder Sattelpunkte sind.

Nun läßt sich die folgende Vorgehensweise zur Suche des globalen Minimums ableiten:

1. Nachweis, daß die ersten zwei partiellen Ableitungen der Zielfunktion existieren. Singuläre Punkte sind durch die Wahl geeigneter Parameterintervalle auszuschließen.
2. Bestimmung aller stationären Punkte durch lösen der Normalgleichungen.
3. Überprüfung der stationären Punkte auf lokales Minimum / Maximum.
4. Ermittlung des globalen Minimums durch Vergleich aller lokalen Minima.

Mit dieser Vorgehensweise werden alle lokalen Extrema gefunden. Das globale Minimum ist damit garantiert, so daß von einer geschlossenen Lösung gesprochen werden kann. Jedoch sind nur wenige geodätische Aufgabenstellungen geschlossen lösbar, weil die meisten Zielfunktionen eine komplexe Struktur aufweisen. Spätestens am

Punkt (2.) scheitert der Versuch einer geschlossenen Lösung, denn das Lösen des Normalgleichungssystems ist oft nicht algebraisch möglich.

Trotzdem ist man stets bemüht, eine geschlossene Lösung zu „finden“, auch wenn ein Problem aus komplizierten funktionalen Zusammenhängen besteht. Die geschlossene Lösung wird als die eleganteste Lösungsstrategie bezeichnet und das nicht zu unrecht, denn nur durch sie kann eine Lösung für beliebige Eingabewerte in endlicher Rechenzeit unter Garantie gefunden werden.

Wege zur geschlossenen Lösung eines Normalgleichungssystems

Die Zielfunktion läßt sich, wie oben erläutert, auch als ein System nichtlinearer Gleichungen darstellen. Eine geschlossene Lösung abzuleiten heißt, das Normalgleichungssystem algebraisch zu lösen, so daß eine geschlossene Formel entsteht. Eine besondere Stellung nehmen hierbei die polynomialen, häufig auch als algebraisch bezeichneten Gleichungen ein. Ein Polynom $f \neq 0$ mit m Variablen u_j läßt sich in der Form

$$f = \sum_{j=1}^m a_j u^j \quad (25)$$

schreiben, wobei für die Koeffizienten $a_j \in \mathfrak{R}$ und die Potenzen $n \in \mathbb{N}$ gilt. Zunächst muß unterschieden werden, ob das Gleichungssystem aus rein polynomialen Gleichungen besteht oder ob auch nichtpolynomiale, wie beispielsweise trigonometrische oder exponentielle Funktionen vorhanden sind. Liegt das Normalgleichungssystem nicht als ein System von polynomialen Gleichungen vor, so besteht in der Regel keine Möglichkeit, eine geschlossene Lösung zu formulieren. Eine Ausnahme bilden nichtalgebraische Funktionen, die aufgrund von Besonderheiten in algebraische Form gebracht werden können. Als Beispiel sei hier die analytische Lösung der dreidimensionalen Helmertransformations erwähnt (STUBENVOLL 1995). Es konnte gezeigt werden, daß sich das Problem als Eigenwertaufgabe einer 4×4 Matrix formulieren läßt, wobei sich der Maßstab von den übrigen, zu bestimmenden Parametern trennen läßt. Die Lösung einer 4-zeiligen Eigenwertaufgabe ist nichts anderes als eine polynomiale Gleichung 4. Grades, die wiederum geschlossen lösbar ist.

Speziell zur Lösung polynomialer Gleichungssysteme (25) wurden Verfahren entwickelt, die komplizierte Systeme vereinfachen, oder gar in die lösbare Dreiecksform bringen. Ein Algorithmus von BUCHBERGER (1965) benutzt die sogenannten Gröbner-Basen zur Polynomreduktion. Die modulo F reduzierten Gröbner-Basen lassen sich in ein Koeffizientenschema bringen, in welchem die Parallelität zum Gaußschen Algorithmus für lineare Gleichungssysteme deutlich wird. Nicht jedes polynomiale Gleichungssystem läßt sich auf diese Weise in eine geschlossen lösbar Form bringen, der Erfolg ist davon abhängig, inwieweit sich die Polynome modulo F reduzieren lassen.

Eine weitere Vereinfachung, aber auch eine weitere Spezialisierung stellt der Algorithmus von Euklid dar. Zwei Polynome mit einer gemeinsamen Unbekannten können reduziert werden, wenn ein größter gemeinsamer Teiler (ggT) dieser univariaten Polynome gefunden werden kann.

Eine weitere Möglichkeit zur Bestimmung der Nullstellen eines algebraischen Gleichungssystems ist die sogenannte Resultantenmethode. Hierbei wird nach einem gemeinsamen, nicht konstanten Faktor zweier Polynome gesucht, der nicht notwendigerweise der ggT der beiden Polynome sein muß. Die Methode läßt sich auf SALMON (1888, S. 590) zurückführen, wurde in VAN DER WAERDEN (1967 S. 163 - 166) beschrieben und von LOHSE (1994, S. 74) zur Lösung eines geodätischen Problems angewendet.

GRAFAREND und SCHAFFRIN (1989) entwickelten ein neues Modell für den zweidimensionalen Bogenschnitt. Sie bewiesen, daß dieses Modell eine konvexe Erwartungswertfläche besitzt. LOHSE (1994, S. 71 - 82) griff diesen Modellansatz auf, indem er zeigte, wie sich das Problem auf ein polynomiales Gleichungssystem zurückführen und mit Hilfe der Resultantenmethode lösen läßt. Da das ursprüngliche Problem durch ein anderes ersetzt wird, wäre das neue Modell zur Beschaffung von Näherungswerten für den Bogenschnitt oder für den Fall fehlerfreier Beobachtungen einsetzbar.

Wege zur geschlossenen Lösung mit Hilfe der Computeralgebra

Die Suche nach einer geschlossenen Lösung eines nichtlinearen Gleichungssystems auf analytischem Wege ist selten geradlinig, sondern vielmehr geprägt von langwierigen Formelvereinfachungen. Von zunehmendem Interesse ist daher die Zuhilfenahme von Programmen, die in der Lage sind, algebraisch zu rechnen. Die Erstellung der Lösung von Gleichungssystemen und Differentialgleichungen, sowie Differentiation und Integration mit anschließenden

der Formelvereinfachung wird durch den Rechner automatisierbar. Ein- und Ausgabe erfolgt in einer systemabhängigen, oftmals aber portierbaren Programmiersprache. Von Nachteil ist bei der rechnergestützten Formelmanipulation ein Mangel an Nachvollziehbarkeit. Auch läßt sich nicht jedes Gleichungssystem automatisiert lösen. Zur Zeit besitzt die Computeralgebra lediglich den Status eines nützlichen Werkzeuges, als Rechenkontrolle oder allgemein als Unterstützung. Mit steigender Leistungsfähigkeit der Programme, sowie der Geschwindigkeit der Rechner selbst, vermag die Computeralgebra in Zukunft einen neuen Stellenwert einzunehmen.

Nicht wenige Gleichungssysteme können zwar in eine geschlossene, jedoch komplizierte Form gebracht werden. Es stellt sich hier die Frage nach der Praktikabilität, d.h. dem tatsächlichen Nutzen der geschlossenen Lösung. Durchaus kann der Rechenaufwand für die Auswertung der geschlossenen Formel um ein vielfaches größer sein, als ein alternativer, iterativer Lösungsweg.

2.6 Iterationsverfahren

Bisher wurden lineare und geschlossen lösbar Optimierungsprobleme behandelt. In den folgenden Kapiteln 3 und 4 werden nicht geschlossen lösbar Probleme untersucht, genauer gesagt solche Probleme, für die keine praktikable geschlossene Lösung bekannt ist.

Algorithmen für nicht geschlossen lösbar Probleme können generell auch als iterative Verfahren bezeichnet werden, weil die globale Lösung nicht in einem Schritt gefunden werden kann. Iterative Verfahren dürfen nicht nach einem Schritt abgebrochen werden, es sei denn, man ist nicht an einer exakten Lösung interessiert. Dennoch existieren in der Ausgleichsrechnung Algorithmen der lokalen Optimierung, die nur eine Iteration berücksichtigen. Hierbei geht man davon aus, daß mit dem ersten Schritt ausreichende Genauigkeit erzielt wird, was aber nicht darüber hinwegtäuschen soll, daß ein zur Klasse der iterativen Verfahren gehöriger Algorithmus verwendet wurde. LOHSE (1994, S. 56 - 59) stellt ein Verfahren von G. Blaha zur kleinsten-Quadrate-Ausgleichung vor, bei dem auf die Iteration infolge einer Taylorreihenentwicklung am Näherungspunkt verzichtet werden könne. Jedoch betont er auch, daß der Rechenaufwand größer sei, als bei entsprechenden iterativen Verfahren.

In Abbildung 4 wird die hierarchische Struktur der bisher erwähnten Optimierungsprobleme noch einmal schematisch dargestellt.

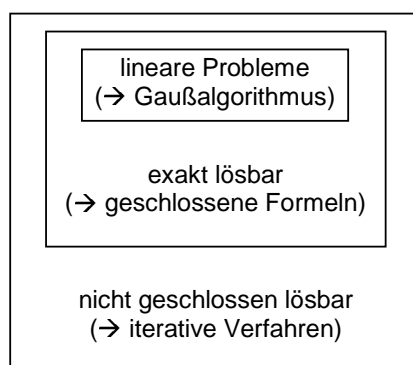


Abb. 4: Klassifizierung von Optimierungsproblemen

Alle Iterationsverfahren bestehen aus einer *Initialisierung*, einer *Iterationsvorschrift* und einem *Abbruchkriterium*.

Die *Initialisierung* besteht darin, geeignete Startwerte für die Zielgrößen, meist in Form von Näherungswerten, zu finden, so daß das Verfahren konvergiert. Die Berechnung geeigneter Startwerte gehört nicht zum eigentlichen Iterationsverfahren, sondern wird extern vollzogen.

Die *Iterationsvorschrift* stellt den funktionellen Zusammenhang dar. Wird ein Vektor mit Startwerten eingesetzt, entstehen neue Resultate, die als verbesserte Startwerte für die darauffolgende Iteration Verwendung finden.

Das *Abbruchkriterium* ist eine Ungleichung, deren Erfüllung darüber entscheidet, ob weitere Berechnungen vollzogen werden sollen. Kriterien sind beispielsweise die Restfehler oder Restklaffen, die Veränderung der Zielgrößen durch die jeweils letzte Iteration, die Rechenzeit oder die Anzahl durchgeführter Iterationen.

Die große Gruppe der iterativen Verfahren wird wiederum in lokale und globale Suchalgorithmen aufgeteilt (Abb. 5). Diese Unterteilung ist von zentraler Bedeutung, da globale Verfahren in der Geodäsie bislang unbeachtet geblieben sind, ganz im Gegensatz zu den Lösungsansätzen der lokalen Optimierung. Die lokalen Verfahren werden auch als

Gradientenverfahren bezeichnet, da sie auf partiellen Ableitungen basieren. Für die globalen Verfahren ist auch der Ausdruck direkte Verfahren gebräuchlich, womit verdeutlicht werden soll, daß direkt mit Funktionswerten operiert wird.

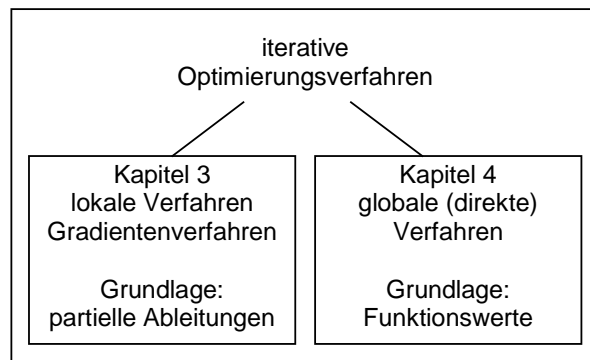


Abb. 5: Klassifizierung iterativer Optimierungsverfahren

3 Lokale Optimierung, Gradientenverfahren

Die lokale Optimierung hat in der Geodäsie eine lange Tradition. Bereits vor ca. 300 Jahren lieferte die Differentialrechnung ein notwendiges Kriterium für lokale Optima: der Gradient muß gleich null sein. Diese Erkenntnis ermöglichte die Konstruktion von effizienten und im mathematischen Sinne „optimalen“ Optimierungsverfahren, die in „wenigen“ Schritten konvergieren. Dadurch erklärt sich auch deren weite Verbreitung. Voraussetzung ist allerdings das Vorhandensein eines differenzierbaren funktionalen Modells, denn die lokalen Verfahren benötigen Informationen über die internen, differentialgeometrischen Eigenschaften der zu minimierenden Funktion. Einschränkung ist anzumerken, daß das Endergebnis eines lokalen Iterationsverfahrens lediglich ein stationärer Punkt ist und daher nur unimodale Probleme gelöst werden können. Die Entwicklung dieser Verfahren, die mit Namen wie NEWTON, EULER, LAGRANGE, oder MACLAURIN verknüpft ist, kann aber auch in der modernen Geodäsie noch nicht als abgeschlossen gelten, was Publikationen der neunziger Jahre zeigen.

Ausgehend von einem Startwert \mathbf{u}_0 , erzeugen die lokalen Optimierungsverfahren eine Punktfolge $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3, \dots, \mathbf{u}_k$, die gegen ein lokales Minimum $\bar{\mathbf{u}}$ von $f(\mathbf{u})$ konvergiert. Man spricht auch von lokalen Abstiegsverfahren, weil im Idealfall jeder Punkt der Folge einen kleineren Funktionswert als sein Vorgänger aufweist und somit die Punktfolge in eine Senke des Qualitätsgebirges herabsteigt.

Eine Klassifikation der verschiedenen, lokalen Iterationsverfahren kann durch das Schema

$$\mathbf{u}_{k+1} = \mathbf{u}_k + t_k \mathbf{d}_k, \text{ mit } k = 0, 1, 2, \dots \quad (26)$$

entsprechend TEUNISSEN (1990, S. 138) vorgenommen werden.

1. Für den Punkt \mathbf{u}_0 werden vorhandene Startwerte eingesetzt.
2. Festlegung der Richtung \mathbf{d}_k des Folgepunktes.
3. Festlegung einer positiven Schrittweite t_k möglichst so, daß $f(\mathbf{u}_{k+1}) < f(\mathbf{u}_k)$ gilt.
4. Test, ob das Abbruchkriterium bereits erfüllt ist. Wenn nicht, wird k inkrementiert und zu (2.) zurückgesprungen.

Die einzelnen lokalen Verfahren unterscheiden sich lediglich in der Wahl des Richtungsvektors \mathbf{d}_k und des positiven Skalars t_k .

Für ein lokales Abstiegsverfahren müssen die aufeinanderfolgenden Funktionswerte streng monoton abnehmen. Es muß also gelten

$$f(\mathbf{u}_{k+1}) = f(\mathbf{u}_k + t_k \mathbf{d}_k) < f(\mathbf{u}_k). \quad (27)$$

Entwickelt man $f(\mathbf{u}_{k+1} + t_k \mathbf{d}_k)$ in eine Taylorreihe und vernachlässigt die Glieder höherer Ordnung, so erhält man $f(\mathbf{u}_k + t_k \mathbf{d}_k) = f(\mathbf{u}_k) + t_k \nabla f(\mathbf{u}_k) \mathbf{d}_k$. Durch Ersetzung in (27) ergibt sich für alle Abstiegsrichtungen \mathbf{d}_k

$$\nabla f(\mathbf{u}_k) \cdot \mathbf{d}_k < 0. \quad (28)$$

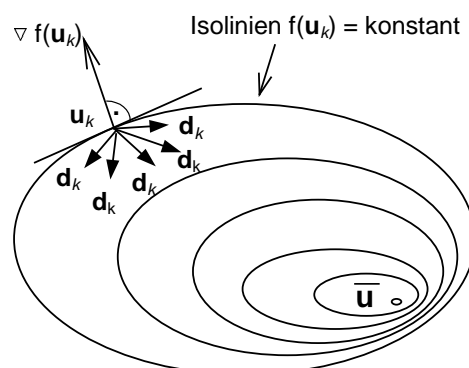


Abb. 6: Abstiegsrichtungen im Punkt \mathbf{u}_k

Richtungsvektoren, die (28) erfüllen, führen zu kleineren Funktionswerten in der Iterationsfolge. Abb. 6 zeigt die möglichen Abstiegsrichtungen \mathbf{d}_k , während der Gradient $\nabla f(\mathbf{u}_k)$ die Richtung des steilsten Anstieges repräsentiert. Die Abstiegsrichtungen \mathbf{d}_k können auch in der allgemeinen Form

$$\mathbf{d}_k = -\mathbf{Q}(\mathbf{u}_k) \cdot \nabla f(\mathbf{u}_k) \quad (29)$$

geschrieben werden, wobei $\mathbf{Q}(\mathbf{u}_k)$ eine beliebige, positiv definite Matrix sei. Durch Einsetzen von \mathbf{d}_k in (26) erhält man die Iterationsformel für die gesamte Klasse der Gradientenmethoden in Form von

$$\mathbf{u}_{k+1} = \mathbf{u}_k - t_k \mathbf{Q}(\mathbf{u}_k) \cdot \nabla f(\mathbf{u}_k), \quad (30)$$

wobei sich die Verfahren lediglich in der Wahl der positiven Schrittweite t_k und der positiv definiten Matrix $\mathbf{Q}(\mathbf{u}_k)$ unterscheiden. Die Konvergenz dieser Verfahren ist sowohl von dem funktionalen Zusammenhang als auch von Näherungswerten abhängig und sie kann nicht garantiert werden, da in der Regel nicht vorausgesagt werden kann, ob die Startwerte eine ausreichende Approximation der Lösung darstellen.

Prinzipiell lassen sich beliebig viele Algorithmen entwickeln, die letztendlich eine Gemeinsamkeit haben: mittels Funktionsableitungen wird das funktionale Modell durch ein einfaches ersetzt. Einige dieser Verfahren, die eine gewisse Bedeutung erlangt haben, werden im folgenden vorgestellt (Tabelle 1). Die Vielfalt der Gradientenmethoden kann in diesem Rahmen jedoch nicht vollständig wiedergegeben werden.

Gradientenmethoden

	klassisches Gradientenverfahren	Newton-Raphson Verfahren	Gauß-Newton Verfahren
Kapitel	3.1	3.2	3.4
Norm	normunabhängig	normunabhängig	L_2 -Norm
Abstiegs- richtung	Gradient (steilster Abstieg)	Inverse Matrix der 2. Ableitungen	Lösung des linearisierten v^2 -Minimum Problems
Q-Matrix	Einheitsmatrix	Inverse Hessesche Matrix	$[\mathbf{v}'(\mathbf{u}_k)^T \mathbf{v}'(\mathbf{u}_k)]^{-1}$
mögliche Schritt- weiten	a) 1 b) $(\lambda_{\min} + \lambda_{\max})/2$, d.h. Mittelwert der extremalen Eigenwerte der Hesseschen Matrix c) Liniensuchalgorithmus	a) 1 b) „gedämpftes Newton“ Verfahren c) Liniensuchalgorithmus d) Trust Region Methode	a) 1 b) $1/[1-0.5 \ \mathbf{v}\ (\lambda_{\min} + \lambda_{\max})]$, siehe auch (33) c) Liniensuchalgorithmus
Iterations- formel	$\mathbf{u}_{k+1} = \mathbf{u}_k - t_k \nabla f(\mathbf{u}_k)$	$\mathbf{u}_{k+1} = \mathbf{u}_k - [\partial_{uu}^2 f(\mathbf{u}_k)]^{-1} \nabla f(\mathbf{u}_k)$	$\mathbf{u}_{k+1} = \mathbf{u}_k - [\mathbf{v}'(\mathbf{u}_k)^T \mathbf{v}'(\mathbf{u}_k)]^{-1} \mathbf{v}'(\mathbf{u}_k) \mathbf{v}(\mathbf{u}_k)$

Tabelle 1: Charakteristika einiger Gradientenverfahren

3.1 Das klassische Gradientenverfahren

Wird die Matrix \mathbf{Q} in (30) als Einheitsmatrix gewählt, so spricht man von dem klassischen Gradientenverfahren oder auch von der Methode des steilsten Abstieges. Die Iterationsformel lautet dann

$$\mathbf{u}_{k+1} = \mathbf{u}_k - t_k \cdot \nabla f(\mathbf{u}_k). \quad (31)$$

Die klassischen Gradientenverfahren lassen sich je nach Wahl der Schrittweite t_k weiter unterteilen. Daß die Wahl der Schrittweite nicht unproblematisch ist, zeigt KOSMOL (1989, S. 88): Zu kleine Schrittweiten benötigen viele Iterationen oder konvergieren nicht. Das Gleiche gilt auch für zu große Schrittweiten. Am geläufigsten ist daher das Verfahren mit der Schrittweitenminimierungsregel: Auf der Halbgeraden in Richtung des stärksten Abstiegs wird nach dem Funktionsminimum gesucht. Ein Liniensuchalgorithmus liefert dann als eindimensionales Optimierungsproblem die optimale Schrittweite für den jeweiligen Nachfolger. Doch die bekannte Veranschaulichung eines zweidimensionalen Problems (Abb. 7), zeigt, daß durch die Orthogonalität aufeinander folgender Suchrichtungen ein Zickzack Kurs beschrieben wird. Je langgestreckter die Ellipse ist, desto mehr Iterationen werden benötigt. Solche langgestreckten Niveaumengen ergeben sich insbesondere bei „ill-posed problems“, deren Matrizen $\mathbf{Q} = \mathbf{H}^{-1}$ in der Regel eine große Differenz zwischen kleinstem und größten Eigenwert aufweisen. Für höherdimensionale Probleme werden dann sehr viele Schritte erforderlich, wodurch das Verfahren an Effizienz verliert.

Matrix nicht invertierbar oder ist sie nicht positiv definit, muß das Newton-Raphson-Verfahren abgebrochen werden. Aus diesem Grund wurde das Newton-Raphson-Verfahren weiterentwickelt und modifiziert. Eine Variante, mit der auf das explizite Aufstellen der ersten Ableitungen verzichtet wird, besteht darin, die ersten Ableitungen $f'(\mathbf{u})$ durch den Differenzenquotienten zu approximieren (KOSMOL 1989, S. 78).

3.3 Das modifizierte Newton-Raphson-Verfahren

Um den Unzulänglichkeiten des Newton-Raphson-Verfahrens entgegenzuwirken, wurde die folgende Modifizierung von LEVENBERG (1944) durchgeführt. Für diesen Algorithmus, der auch unter dem Namen Trust-Region-Method bekannt ist, wählt man für $t_k \mathbf{Q}(\mathbf{u}_k)$ in (30) statt der Matrix $[\partial^2_{uu} f(\mathbf{u})]^{-1}$ eine erweiterte Formel der Form

$$t_k \mathbf{Q}(\mathbf{u}_k) = [\partial^2_{uu} f(\mathbf{u}_k) + \alpha_k \mathbf{R}]^{-1}. \quad (35)$$

Dabei ist α_k ein positiver Skalar und \mathbf{R} eine positiv definite Matrix. Es ergibt sich die Iterationsformel (36) für das modifizierte Newton-Raphson-Verfahren

$$\mathbf{u}_{k+1} = \mathbf{u}_k - \nabla(\mathbf{u}_k) \left[\frac{\partial^2 f}{\partial^2 \mathbf{u}}(\mathbf{u}_k) + \alpha_k \mathbf{R} \right]^{-1}. \quad (36)$$

Die Formel selbst zeigt schon die beiden Grundprinzipien, auf denen das Verfahren basiert: Da \mathbf{R} eine positiv definite Matrix ist, kann immer ein hinreichend großes α_k gefunden werden, so daß $t_k \mathbf{Q}(\mathbf{u}_k)$ in (35) positiv definit ist. Mit der positiven definiten \mathbf{Q} -Matrix ist immer eine Abstiegsrichtung garantiert. Dadurch kann ein Mangel des Newton-Raphson-Verfahrens, nämlich der einer eventuell nicht positiv definiten Matrix \mathbf{Q} , behoben werden. Andererseits zeigt (36), daß das Verfahren ein Kompromiß zwischen der klassischen Gradientenmethode und dem Newton-Raphson-Verfahren darstellt. Wählt man in (36) für \mathbf{R} die Einheitsmatrix \mathbf{I} und für $\alpha_k = 0$, so erhält man die Formel (34) des Newton-Raphson-Verfahrens. Für $\mathbf{R} = \mathbf{I}$ und sehr große α_k geht das Verfahren in die klassische Gradientenmethode (31) über. Die möglichen Suchrichtungen liegen also zwischen der des Newton- und der des Gradientenverfahrens (Abb. 8). Die Variable α_k übernimmt dabei die Rolle der Schrittweite t_k .

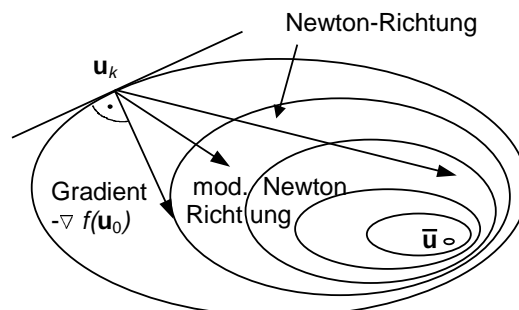


Abb. 8: Suchrichtungen des erweiterten Newton-Raphson-Verfahrens

Einerseits ist dieser Algorithmus wesentlich flexibler als die oben genannten Verfahren, andererseits bleibt aber die Frage offen, welchen Wert α_k annehmen soll. Da es nicht möglich ist, für alle Optimierungsprobleme eine allgemeine Regel zu formulieren, bleibt nichts anderes übrig, als einen selbst gewählten Wert für α_k dahingehend zu testen, ob eine Abstiegsrichtung vorliegt oder nicht. Ist $t_k \mathbf{Q}(\mathbf{u}_k)$ in (35) positiv definit, liegt also eine Abstiegsrichtung vor, so kann α_k akzeptiert werden, anderenfalls muß ein erneuter Test mit einem größeren α_k durchgeführt werden. Derartige Hilfskonstruktionen, wie das verwendete „trial-and-error“-Prinzip, zeigen schon die Schwächen des Verfahrens. Das Ausprobieren von Funktionswerten kann schnell recht zeitaufwendig werden und es sollte zumindest bei der lokalen Optimierung behutsam damit umgegangen werden, denn der Hauptvorteil der lokalen Optimierungsverfahren ist, im Gegensatz zur globalen Optimierung, der mögliche Verzicht auf rechenzeitraubende Funktionstests.

Konvergenzbedingungen des Verfahrens sind in TEUNISSEN (1990, S. 141 - 144) hergeleitet worden. Eine weitere Untergliederung der einzelnen Verfahren und deren Untervarianten sind in KRABS (1983, S. 143 - 147) und KOSMOL (1989, S. 130 - 145) zu finden.

3.4 Das Gauß-Newton-Verfahren

In der Geodäsie, insbesondere aber in der Ausgleichsrechnung, ist das Gauß-Newton-Verfahren das mit Abstand am häufigsten eingesetzte Verfahren zur Lösung von Optimierungsproblemen. In der Lehre, in Publikationen und in der Standardsoftware für Ausgleichsprobleme hat sich das Verfahren mittlerweile derart durchgesetzt, als könne damit jedes Problem am besten gelöst werden. Nicht annähernd so bekannt sind jedoch dessen Mängel. Teilweise ist Anwendern des Verfahren nicht einmal bewußt, daß es sich um ein Iterationsverfahren handelt. Aus diesem Grund soll der Algorithmus, der zu den newton-ähnlichen Verfahren zählt, ausführlich behandelt werden.

Im Gegensatz zu dem Newton-Raphson-Verfahren wird hier eine Linearisierung nicht außerhalb der Norm (auf der Ebene Normalgleichungen oder Zielfunktionen), sondern innerhalb einer Norm vorgenommen, d.h. die Funktionen der einzelnen Residuen werden an einem Taylorpunkt entwickelt und dann erst einer Norm unterworfen. Daraus folgt zunächst einmal, daß das Verfahren von der gewählten Norm abhängig ist und daher für jede Norm ein eigener Algorithmus entworfen werden muß. Die folgenden Ausführungen sind speziell für die L_2 -Norm entwickelt worden und nur für diese Norm gültig.

Ausgehend von der Minimierung der Residuenquadrate (10) können die Residuen v_i allgemein als vektorwertige Funktion $\mathbf{v}(\mathbf{u})$ aufgefaßt werden. Es gelte

$$\mathbf{v}(\mathbf{u}) = \mathbf{y} - \mathbf{f}(\mathbf{u}) = y_i - f_i(\mathbf{u}) \quad \text{mit } i = 1, \dots, n \quad (37)$$

wobei der Unbekanntenvektor der Form $\mathbf{u} \in \mathfrak{R}^m$ und die Dimension des Beobachtungsvektors $\mathbf{y} \in \mathfrak{R}^n$ sei. Die vektorwertige Funktion \mathbf{f} ist nicht zu verwechseln mit der zu minimierenden Funktion. Sie ist eine Abbildungsvorschrift vom \mathfrak{R}^n in den \mathfrak{R}^m .

Werden die Residuen $v_i(\mathbf{u})$ durch die Funktion $\mathbf{v}(\mathbf{u}) = ((v_1(\mathbf{u}), v_2(\mathbf{u}), \dots, v_n(\mathbf{u}))^T$ ausgedrückt, so erhält man die L_2 -Norm in der Form

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n v_i(\mathbf{u})^2 = \frac{1}{2} \|\mathbf{v}(\mathbf{u})\|^2 \quad \forall \mathbf{u} \in \mathfrak{R}^m. \quad (38)$$

Der Faktor $\frac{1}{2}$ beeinflusst die Rechnung nicht und wurde lediglich aus Gründen der Vereinfachung eingeführt. In den folgenden Betrachtungen soll auf den Index i aus Gründen der Übersichtlichkeit verzichtet werden. Weiterhin gilt die Vektorwertigkeit der Funktion $\mathbf{v}(\mathbf{u})$.

Das Gauß-Newton-Verfahren basiert darauf, die Funktionen \mathbf{v} in eine Taylorreihe nur bis zu den Gliedern der 1. Ordnung zu entwickeln. Nach dieser häufig als Linearisierung bezeichneten Approximation entsteht dann die Ersatzfunktion

$$\mathbf{v}^*(\mathbf{u}) := \mathbf{v}(\mathbf{u}_k) + \mathbf{v}'(\mathbf{u}_k)(\mathbf{u} - \mathbf{u}_k), \quad \text{wobei } \mathbf{v}'(\mathbf{u}_k) = \frac{\partial \mathbf{v}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{u}_k). \quad (39)$$

Der Entwicklungspunkt muß dabei eine extern bereitgestellte Näherungslösung \mathbf{u}_k sein. Von nun an wird für den folgenden Iterationsschritt $k + 1$, statt der ursprünglichen Funktion \mathbf{v} , die lineare Ersatzfunktion \mathbf{v}^* verwendet. \mathbf{v}^* stellt eine Approximation der ursprünglichen Funktion als Hyperebene dar. Welche Konsequenz diese Ersetzung mit sich bringt, soll später behandelt werden. Wird die Ersatzfunktion in die Norm eingesetzt, entsteht das neue Minimierungsproblem

$$Q^*(\mathbf{u}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n [\mathbf{v}(\mathbf{u}_k) + \mathbf{v}'(\mathbf{u}_k)(\mathbf{u} - \mathbf{u}_k)]^2 \rightarrow \min. \quad (40)$$

Lediglich Vektor \mathbf{u} beinhaltet die unbekannt Parameter, denn \mathbf{u}_k , $\mathbf{v}(\mathbf{u}_k)$ und $\mathbf{v}'(\mathbf{u}_k)$ sind durch die Näherung gegeben, liegen also schon numerisch fest. Nun wird deutlich, daß es sich bei Q^* um das in Kapitel (2.4) beschriebene, lineare Problem handelt, siehe auch Gleichung (15). Gelöst wird die unimodale, konvexe Minimierungsaufgabe mit Hilfe des Kriteriums für stationäre Punkte, nämlich $\nabla Q^* = 0$. Dies ist die notwendige und hinreichende Bedingung, da das lineare System (40) konvex ist. Nach Ableiten und Nullsetzen von (40) erhält man die Gaußschen Normalgleichungen

$$[\mathbf{v}(\mathbf{u}_k) + \mathbf{v}'(\mathbf{u}_k)(\mathbf{u} - \mathbf{u}_k)]\mathbf{v}'(\mathbf{u}_k) = 0. \quad (41)$$

Löst man (41) unter Berücksichtigung von $\mathbf{u} = \mathbf{u}_{k+1}$ nach den Unbekannten \mathbf{u}_{k+1} auf, so ergibt sich die Iterationsformel für das Gauß-Newton-Verfahren

$$\mathbf{u}_{k+1} = \mathbf{u}_k - [\mathbf{v}'(\mathbf{u}_k)^T \mathbf{v}'(\mathbf{u}_k)]^{-1} \mathbf{v}'(\mathbf{u}_k)^T \mathbf{v}(\mathbf{u}_k). \quad (42)$$

In der vermittelnden Ausgleichsrechnung werden die Zuschläge für die Unbekannten innerhalb einer Iteration $\Delta \mathbf{u} = \mathbf{u}_{k+1} - \mathbf{u}_k$ durch $\Delta \mathbf{x}$, $\mathbf{v}'(\mathbf{u}_k)$ durch eine Matrix \mathbf{A} und $\mathbf{v}(\mathbf{u}_k)$ durch einen Vektor $\boldsymbol{\ell}$ ausgedrückt und in das bekannte Matrizenchema $\Delta \mathbf{x} = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \boldsymbol{\ell}$ gebracht.

Wird das Verfahren entsprechend (30) als iterative Gradientenmethode eingeteilt, so ergibt sich für die Schrittweite t_k der Wert 1 und für die Matrix der Abstiegsrichtungen $\mathbf{Q}(\mathbf{u}_k)$ der Ausdruck $[\mathbf{v}'(\mathbf{u}_k)^T \mathbf{v}'(\mathbf{u}_k)]^{-1}$. Der Gradient $\nabla f(\mathbf{u}_k)$ in (30) entspricht dem Gradienten ∇Q der Zielfunktion Q und wird durch den Ausdruck $\mathbf{v}'(\mathbf{u}_k)^T \mathbf{v}(\mathbf{u}_k)$ beschrieben.

Geometrisch veranschaulichen läßt sich das Gauß-Newton-Verfahren, indem man die Erwartungswertfläche, also die m -dimensionale Funktion $\mathbf{f}(\mathbf{u})$ im n -dimensionalen Beobachtungsraum betrachtet. Die Beobachtungen \mathbf{y} erscheinen in diesem Raum als ein Punkt \mathbf{y} . Es gibt immer einen kürzesten Vektor zwischen der Erwartungswertfläche und dem Punkt \mathbf{y} . Der Fußpunkt dieses Vektors auf der Fläche aller möglichen Lösungen entspricht dann der Lösung $\bar{\mathbf{u}}$ des allgemeinen Optimierungsproblems der kleinsten Quadrate (Abb. 9). Der Betrag des Vektors entspricht dem Minimalwert des Optimierungsproblems $Q = \sum \mathbf{v}\mathbf{v} \rightarrow \min$. Im Falle fehlerfreier Beobachtungen würde \mathbf{y} auf der Fläche $\mathbf{f}(\mathbf{u})$ liegen.

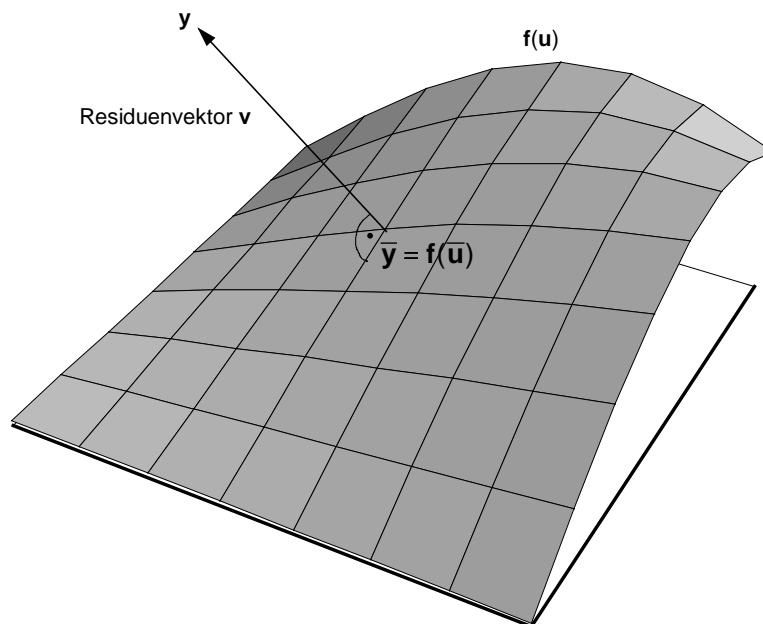


Abb. 9: Geometrie der Methode der kleinsten Quadrate

In das Gauß-Newton-Verfahren werden aber nicht alle Informationen über die Fläche $\mathbf{f}(\mathbf{u})$ eingebracht, sondern nur der Funktionswert und die partiellen Ableitungen am Punkt $\mathbf{f}(\mathbf{u}_k)$. Damit wird die Funktion durch eine Ebene ersetzt, dessen Minimalabstand zum Punkt \mathbf{y} sich leicht berechnen läßt. Wie in Abb. 10 zu erkennen ist, steht der Abstandsvektor senkrecht auf der Ebene. In der Abbildung wird aber auch deutlich, daß die wahre Lösung $\bar{\mathbf{u}}$ nicht in einem Schritt gefunden werden kann.

Die Frage, wann das Gauß-Newton-Verfahren konvergiert, wurde bereits von KOSMOL (1989, S. 80 - 83) und TEUNISSEN (1990, S. 146 - 149) untersucht. Zwei Faktoren beeinflussen die lokale Konvergenz hauptsächlich: Die Krümmung der Modellfunktion einerseits und die Größe des Residuenvektors andererseits. Entscheidend sind allerdings die Krümmungen am Lösungspunkt bzw. stationären Punkt $\bar{\mathbf{u}}$ sowie der Betrag des Residuenvektors an diesem Punkt. Um eine Konvergenz vorauszusagen, muß die Lösung $\bar{\mathbf{u}}$ schon vorliegen. Bei konkreten Optimierungsproblemen ist das jedoch nicht der Fall, so daß im voraus keine gesicherte Aussage über die Konvergenz des Gauß-Newton-Verfahrens gemacht werden kann.

Sei k_1 die kleinste und k_m die größte aller Hauptkrümmungen der Modellfunktion am stationären Punkt $\bar{\mathbf{u}}$ und sei $\mathbf{v}(\bar{\mathbf{u}})$ der Residuenvektor zwischen stationärem Punkt und dem Beobachtungspunkt \mathbf{y} im Lösungsraum, so konvergiert das Verfahren, wenn

$$\max\{|k_1|, |k_m|\} \cdot \|\mathbf{v}(\bar{\mathbf{u}})\| < 1. \quad (43)$$

Geometrisch bedeutet Gleichung (43), daß der Beobachtungspunkt innerhalb der Hyperkugel mit dem kleinsten Hauptkrümmungsradius des Punktes $\bar{\mathbf{u}}$ liegen muß. Ist also die Modellfunktion nur wenig gekrümmt, wirkt sich das günstig auf die Konvergenz aus. Ebenso vorteilhaft ist es, wenn der Betrag des Residuenvektors $\mathbf{v}(\bar{\mathbf{u}})$ klein ist. Für Optimierungsprobleme mit kleinen Widersprüchen oder gar mit konsistenten Beobachtungen ist die Konvergenz daher lokal gewährleistet.

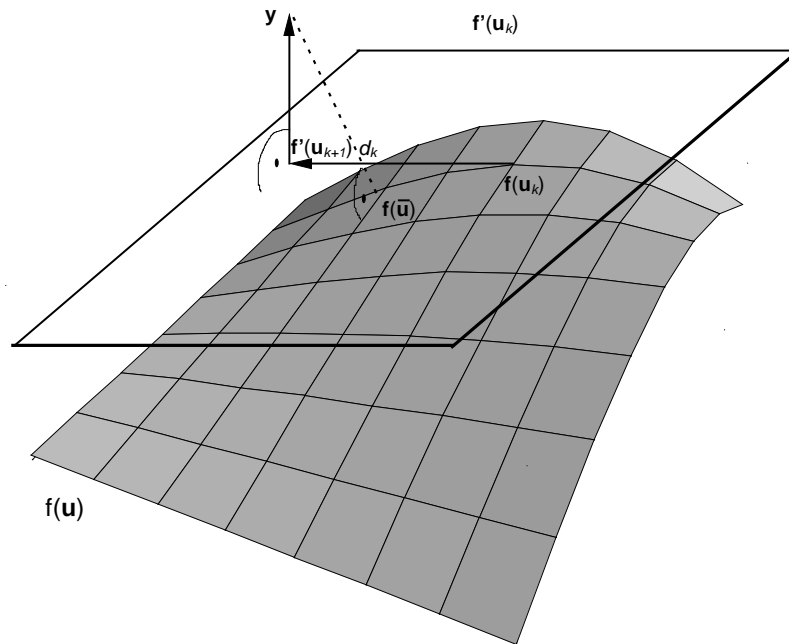


Abb. 10: Gauß-Newton-Schritt bei 3 Beobachtungen und 2 Unbekannten

Ist die Zielfunktion negativ gekrümmt, besteht die Gefahr, daß ein Gauß-Newton-Schritt über den stationären Punkt hinauschießt und ein Alternieren verursacht. Ein solches Alternieren um den Lösungspunkt herum kann zu langsamer Konvergenz oder gar zur Divergenz führen. Positive Krümmungen führen zu eher kleinen Schrittweiten, wodurch die Anzahl der Iterationsschritte ebenfalls ansteigt. Hilfreich ist daher eine Schrittweitenregelung.

Die Konvergenz ist allerdings nur lokal, d.h. das Verfahren ist nur dann konvergent, wenn die Startwerte „nahe genug“ an der Lösung selbst liegen. Ob eine Näherungslösung jedoch genau genug ist, hängt vom Charakter der Zielfunktion ab und kann in der Regel nicht vorausgesagt werden.

Ist (43) nicht erfüllt, kann nicht einmal eine lokale Konvergenz garantiert werden. Beliebig genaue Näherungswerte können dann zur Divergenz führen. An einem von SCHWETLICK (1979, S. 279) eingeführten, einfachen Beispiel (44) wird deutlich, daß sich der Gauß-Newton-Algorithmus in diesem Fall der gesuchten Lösung nicht nähert. Dabei ist es völlig unerheblich, wie gut die Näherungswerte sind. In dem Beispiel besteht die Messung aus zwei Beobachtungen und einer Unbekannten. Die Größen l_1 und l_2 sind die beiden direkten Beobachtungen, u ist die einzige Unbekannte und a eine beliebige, feste Konstante größer eins. Die beiden Beobachtungsgleichungen sind der Form

$$\begin{aligned} a + \frac{1}{2}u^2 &= l_1 + v_1 & (1) \\ u &= l_2 + v_2 & (2) \end{aligned} \quad (44)$$

wobei $l_1 = l_2 = 0$ und $a > 1$.

Sucht man nun die Lösung des Systems nach der Methode der kleinsten Quadrate, so ergibt sich durch Einsetzen der Residuen v_1 und v_2 in die L_2 -Norm Gleichung (10) die biquadratische, konvexe Zielfunktion $Q(u) = 0.25 u^4 + (a + 1) u^2 + a^2$, deren einzige Minimallösung $u = 0$ sich sofort bestimmen läßt. Wird aber der Gauß-Newton-Algorithmus verwendet, so müssen die Beobachtungsgleichungen erst linearisiert werden. Graphisch

anschaulich wird dieser Zusammenhang für $a = 2$ in Abb. 11. Das mathematische Modell, also die Gesamtheit der Beobachtungsgleichungen wird durch eine Parabel repräsentiert. Die Anzahl der Achsen entspricht hierbei der Anzahl der Beobachtungen. Die Dimension der im Beobachtungsraum eingebetteten Kurve, bzw. Fläche ist gleich der Anzahl der Unbekannten, also eins. Eine Linearisierung der Modellfunktionen ergibt eine Tangente im Näherungspunkt P_0 . Entlang der Tangente wird nun derjenige Punkt ermittelt, der den kleinsten Abstand zum Beobachtungspunkt besitzt. Der Beobachtungspunkt ist im Beispiel der Punkt $\mathbf{y} = (0; 0)$. Der Lotfußpunkt vom Punkt \mathbf{y} zur Tangente ist mit P_F bezeichnet. Durch die Abbildung von P_F vom Beobachtungsraum in den Parameterraum (gestrichelte Linie) ergibt sich P_1 als Ergebnis des Gauß-Newton-Schrittes. P_1 ist im Beispiel jedoch dem optimalen Punkt P_{\min} nicht näher gekommen. Ein weiterer Iterationsschritt würde ebenfalls wieder nur einen Vorzeichenwechsel bewirken, so daß die Punktfolge nicht konvergiert, sondern stets um den Wert $\pm\sqrt{2/3(a-1)}$ alterniert. Geometrisch kann diese Erscheinung als ein „über-die-Lösung-Hinausschießen“ interpretiert werden, da die Schrittweite eines Gauß-Newton-Schrittes in diesem Fall zu groß ist.

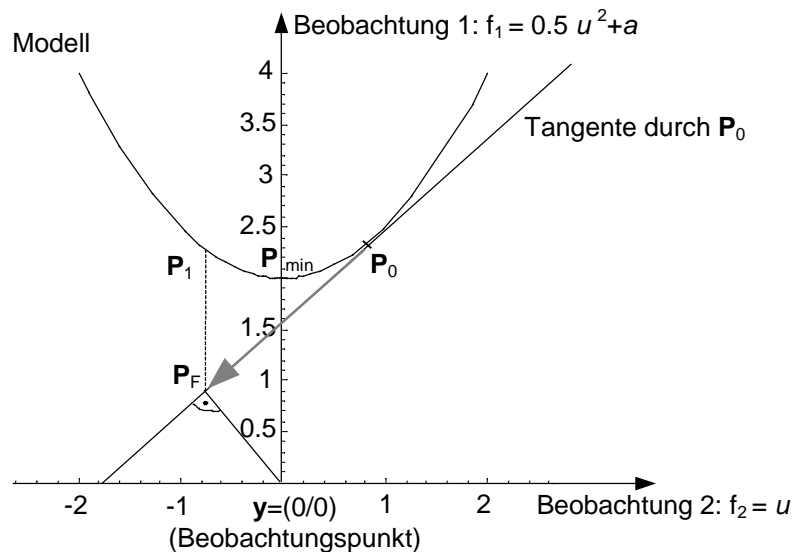


Abb. 11: Gauß-Newton-Schritt mit Schrittweite 1

Für $a > 1$ kann das Minimum $\bar{\mathbf{u}} = 0$ vom Gauß-Newton-Verfahren nicht gefunden werden und sei die Näherungslösung dem Minimum beliebig nahe. Das Fehlen der lokalen Konvergenz kann durch Nichterfüllung der Ungleichung (43) nachgewiesen werden. Dafür müssen die Hauptkrümmungen berechnet werden. Im Falle einer Unbekannten existiert nur eine Krümmung, so daß sich die Bedingung zu $\|\mathbf{v}(u)\| |k| < 1$ vereinfacht. Im Minimalpunkt ist die Länge des Residuenvektors gleich dem Koeffizienten a und die Krümmung κ gleich -1 (Rechnung siehe Anhang), so daß für alle $|a| \geq 1$ keine lokale Konvergenz vorliegt.

Bisher wurde davon ausgegangen, daß die Schrittweite t_k gleich eins ist. Es konnte aber gezeigt werden, daß die optimale Schrittweite durch (45) beschrieben wird (TEUNISSEN 1990, S. 147).

$$t_k = \frac{1}{1 - \|\mathbf{v}(\bar{\mathbf{u}})\| \frac{1}{2}(k_1 + k_m)} \quad (45)$$

Wie aus (45) ersichtlich, folgt für einen Residuenvektor $\|\mathbf{v}\| = 0$ die optimale Schrittweite $t_k = 1$. Wird der Mittelwert aus der kleinsten Hauptkrümmung k_1 und der größten Krümmung k_m klein genug, dann ist die optimale Wahl der Schrittweite ebenfalls nahe dem Wert eins. Durch die Wahl einer optimalen Schrittweite kann die Konvergenz auch für das Beispiel (44) erzwungen werden. Zunächst vereinfacht sich (45) für den eindimensionalen Fall zu

$$t_k = \frac{1}{1 - \|\mathbf{v}(\bar{\mathbf{u}})\| \cdot k} \quad (46)$$

Mit $\kappa(\bar{\mathbf{u}}) = -1$ und $\|\mathbf{v}(\bar{\mathbf{u}})\| = a$ ergibt sich die optimale Schrittweite $t_k = 1/(1+a)$. Ersetzt man in Abbildung 11 die Schrittweite 1 durch die optimale Schrittweite, so ergibt sich $t_k = 1/3$, wegen $a = 2$. Das Drittel des Gauß-Newton-Schrittes verkürzt den Vektor entsprechend und innerhalb von nur drei Schritten ist das Minimum erreicht. In der Praxis ist jedoch $\bar{\mathbf{u}}$ nicht im voraus bekannt und muß durch eine Schätzung \mathbf{u}_0 ersetzt werden.

Resümierend soll festgehalten werden, daß das Gauß-Newton-Verfahren schnell konvergieren kann, wenn

1. die Zielfunktion nur leicht gekrümmt ist,
2. die Residuen klein sind,
3. und die Näherungswerte nahe genug beim Minimum liegen.

Alle Optimierungsprobleme können daher mit diesem Verfahren nicht gelöst werden. Generell muß bei Verwendung des Verfahrens im Auge behalten werden, daß das ursprüngliche Optimierungsproblem in jedem Schritt durch ein anderes, neues Problem ersetzt wird. Die neuen Ersatzprobleme haben andere Eigenschaften und die Frage, inwieweit dadurch das zu lösende Problem repräsentiert wird, muß im Einzelfall untersucht werden.

3.5 Direkte Optimierungsverfahren

Die zweite große Gruppe der Optimierungsverfahren sind die direkten Verfahren. Als „direkt“ wird ein Verfahren bezeichnet, das nur mit Funktionswertberechnungen der eigentlichen Zielfunktion auskommt. Es werden keine Hilfsfunktionen, wie beispielsweise Steigungen und Krümmungen, hinzugezogen. Der Verlauf direkter Optimierungsverfahren ist durch einen Entscheidungsbaum gekennzeichnet. Aufgrund von großen und kleinen Funktionswerten muß darüber entschieden werden, welche Teillösungen verworfen, verändert oder gebildet werden.

Prinzipiell können direkte Optimierungsverfahren für eine sehr große Klasse von Problemen eingesetzt werden. Im Gegensatz zu den Gradientenmethoden können auch multimodale Probleme gelöst werden. Multimodale Probleme besitzen mehrere lokale Minima, wobei nicht durch Näherungswerte vorgegeben ist, welches lokale Minimum auch das gesuchte globale Minimum darstellt.

Obwohl die direkten Verfahren global optimieren können, sind auch direkte, lediglich lokal-optimierende Verfahren bekannt. Diese Gruppe von direkten Verfahren soll zunächst behandelt werden. Sie ist für diese Arbeit von untergeordneter Bedeutung, da Probleme der lokalen Optimierung häufig mit den wesentlich effizienteren Gradientenmethoden gelöst werden können.

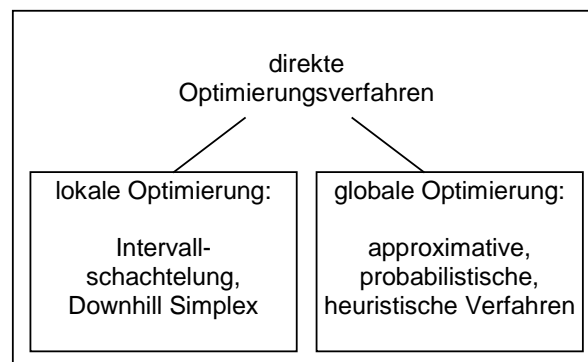


Abb. 12: Klassifizierung direkter Optimierungsverfahren

Es werden zwei direkte Algorithmen der lokalen Optimierung vorgestellt, die nur mit Hilfe von Funktionswerten ein lokales Optimum erreichen. Verwendung finden sie bei unimodalen Problemen, deren Ableitungsfunktionen unbekannt oder unverhältnismäßig kompliziert sind.

3.6 Verfahren mit Intervallschachtelung

Eindimensionale, unimodale Minimierung kann mit Hilfe einer Intervallschachtelung durchgeführt werden. Eine Strecke AB, die das Minimum einschließt, wird durch einen neuen Punkt C geteilt. KOSMOL (1989, S. 64) schlägt die Teilung im Verhältnis des Goldenen Schnittes vor, wenn sich die längere Teilstrecke zur kürzeren Teilstrecke so verhält, wie die längere Teilstrecke zu AB. Aufgrund der Symmetrie lassen sich zwei Punkte C_1 und C_2 finden, die dieser Regel genügen (Abb. 13).

Die Funktionswerte $f(C_1)$ und $f(C_2)$ werden miteinander verglichen. Der Punkt C_i mit dem größeren Funktionswert wird neuer Endpunkt, wodurch sich das Intervall verkleinert. Ein weiterer, die neue Strecke AB teilender Punkt C_i wird so gewählt, daß er sie im Verhältnis eins zu $\frac{1}{2}(\sqrt{5}-1)$ bzw. $\frac{1}{2}(3-\sqrt{5})$ aufteilt. Auch jede andere Aufteilung der Strecke zur Intervallschachtelung ist grundsätzlich denkbar. Durch die Wiederholung dieses Vorganges kann das

Verfahren solange fortgesetzt werden, bis das Minimum in ausreichender Weise eingegrenzt ist. Da der Algorithmus nur im Falle einer Unbekannten funktioniert, ist sein Einsatz auf eine kleine Klasse von Problemen beschränkt.

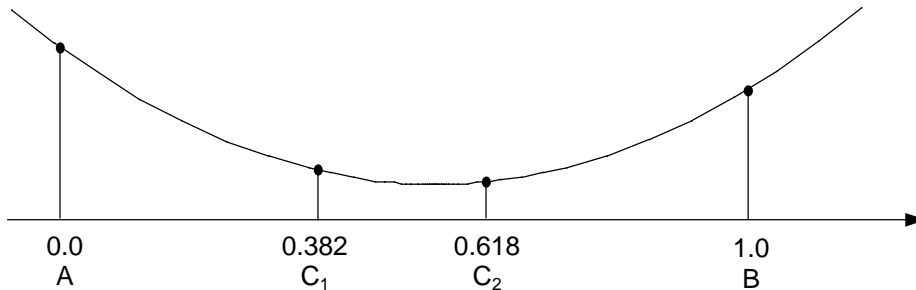


Abb. 13: Goldener Schnitt der Strecke AB

3.7 Das Downhill-Simplex-Verfahren

Ein interessanter Algorithmus zur Lösung höherdimensionaler Probleme ist das Downhill-Simplex-Verfahren (PRESS 1992, Kap. 10). Für die Klasse unimodaler Probleme kann ein Minimum ohne Hinzunahme von Ableitungen gefunden werden.

Wie aus dem Namen hervorgeht, soll ein Simplex zum tiefsten Punkt einer Funktion gebracht werden. Ein Simplex ist ein geometrischer Körper, bestehend aus $m+1$ Punkten in einem n -dimensionalen Raum. Für zweidimensionale Probleme ergibt sich beispielsweise ein Dreieck, im \mathfrak{R}^3 ein Tetraeder.

Zur Initialisierung des Algorithmus müssen für alle m Unbekannten jeweils $m+1$ verschiedene Näherungswerte vorhanden sein. Sie bilden dann die Eckpunkte für das Start-Simplex. Liegt nur eine Näherungslösung vor, so können mit Hilfe von zufälligen Koordinatenzuschlägen die fehlenden Eckpunkte erzeugt werden. Nachdem alle $m+1$ Startwerte geschaffen worden sind, werden die dazugehörigen Funktionswerte berechnet und nach ihrer Größe sortiert. Der eigentliche Algorithmus besteht nun darin, die alten Punkte durch geeignete Nachfolger zu ersetzen. Dafür stehen insgesamt vier Regeln zur Verfügung (Abb. 14).

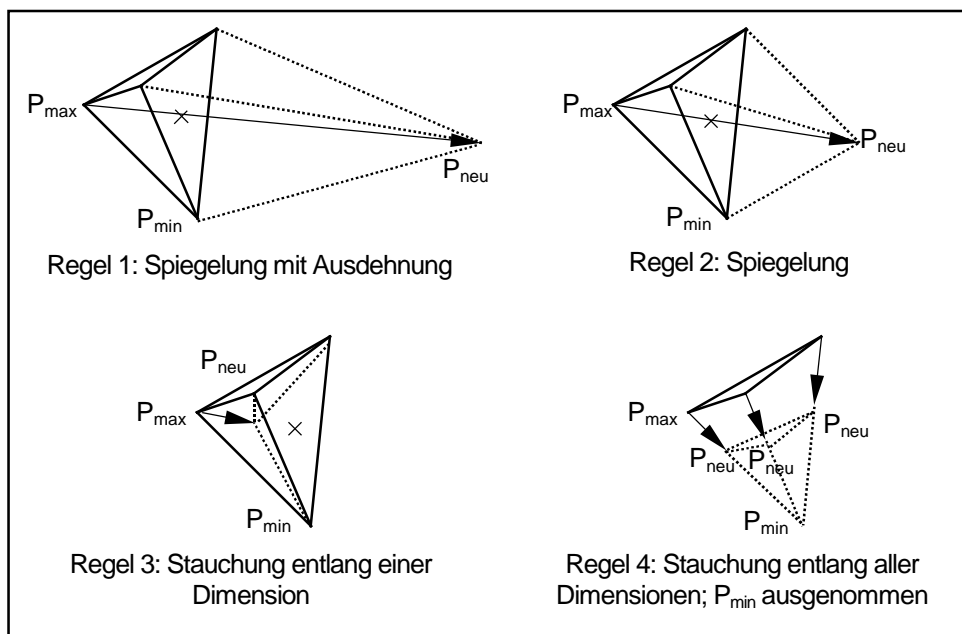


Abb. 14: Schritte des Downhill Simplex Verfahrens. Das ursprüngliche Simplex ist mit durchgezogenen Linien, das neue Simplex mit gestrichelten Linien dargestellt.

Der Punkt mit dem ungünstigsten Funktionswert (= höchster Punkt) wird an dem durch die übrigen Punkte gebildeten Schwerpunkt gespiegelt. Ist der gespiegelte Punkt günstiger als alle anderen Eckpunkte, so kann getestet werden, ob eine Spiegelung mit gleichzeitiger Streckung einen noch günstigeren Wert liefert. Ist die Streckung ebenfalls erfolgreich, wird der gestreckte Neupunkt durch den höchsten Punkt ersetzt (Regel 1). Ist der gestreckte Punkt erfolglos, aber der gespiegelte erfolgreich, so wird der gespiegelte Punkt ersetzt (Regel 2). War

der gespiegelte Punkt erfolglos, kann entlang der gleichen Geraden eine Stauchung des Simplexes versucht werden, so daß der Neupunkt diesseits des Schwerpunktes liegt. Besitzt der neue Punkt einen kleineren Funktionswert als der höchste Punkt, so wird dieser Neupunkt akzeptiert (Regel 3). Waren alle Versuche erfolglos, tritt automatisch die letzte Vorschrift in Kraft: alle Punkte werden in Richtung des tiefsten Punktes verschoben (Regel 4).

Regel 1 vergrößert das Simplex, Regel 2 läßt es im Parameterraum wandern, während die übrigen Regeln das Simplex schrumpfen lassen. Nach einigen Iterationen stellt sich für jede konvexe Funktion die Konvergenz des Verfahrens ein, indem das Simplex so klein wird, daß es zu einem Punkt entartet. Eine Toleranzgrenze ε sorgt dafür, daß das Verfahren abbricht. Der Schwerpunkt des winzigen, übriggebliebenen Tetraeders ist dann das gesuchte Minimum.

Als nachteilig hat sich durch einige Tests erwiesen, daß ein Simplex das Abbruchkriterium erfüllen kann, ohne das tatsächliche Minimum erreicht zu haben. Da solche Fälle nicht auszuschließen sind, empfiehlt sich mindestens ein Neustart mit anderen Startwerten.

Ein weiterer Nachteil stellt die schnell steigende Zahl der Funktionsaufrufe dar, wenn es sich um ein höher dimensioniertes Problem handelt. Ist man in der Lage, das Problem so zu beschreiben, daß Funktionsableitungen gebildet werden können, empfiehlt sich die Verwendung der schneller konvergierenden Gradientenmethoden.

4 Globale Optimierung

4.1 Grundlagen der globalen Optimierung

Besitzt eine Zielfunktion eine unbekannte Anzahl lokaler Optima, so handelt es sich um ein echtes globales Optimierungsproblem. Die bisher behandelten Strategien befaßten sich lediglich mit der lokalen Optimierung. Globale, multimodale Probleme können nicht allein durch lokale Optimierung gelöst werden. In der Praxis erfordern Probleme dieser Klasse ebenfalls eine akzeptable Lösung in angemessener Rechenzeit. An einem metaphorischen Beispiel kann dieser Zusammenhang illustriert werden: In einem zerklüfteten Gebirge mit vielen Mulden und Senken soll der tiefste Punkt gefunden werden. Die lokale Optimierung sucht sich nun einen Ort aus, für den vermutet wird, daß er nicht weit von dem tiefsten Punkt entfernt liegt und schüttet dort Wasser aus. Die Stelle, an der sich das Wasser nach dem Herabfließen wieder sammelt, erklärt die lokale Optimierung für den tiefsten Punkt. Was aber, wenn sich das Wasser in einem kleinen, hoch gelegenen Gletschersee sammelt? Was, wenn zwei Punkte an verschiedenen Rändern des Gebietes mehr oder weniger beide den tiefsten Punkt repräsentieren? In einem solchen Fall muß auf global optimierende Verfahren zurückgegriffen werden. Deren wichtigster Unterschied besteht in der Generierung vieler Startpunkte. In der Gebirgslandschaft würde es regnen. Wäre der Regen stark genug, dann fiel irgendwann ein Tropfen auf den tiefsten Punkt des gesamten Gebietes.

Für die exakte Lösung des globalen Optimierungsproblems gibt es zunächst kein Kriterium, mit dem das globale Minimum aus der offenen Menge lokaler Optima herausgefiltert werden kann. Auch können keine Eigenschaften des globalen Optimums genannt werden, die zu einem effizienten Verfahren zur Gewinnung der exakten Lösung führen. Das multimodale Optimierungsproblem ist daher im allgemeinen unlösbar, denn es können immer Funktionen konstruiert werden, deren lokale Optima beliebig weit auseinander liegen.

Es stellt sich nunmehr die Frage, nach welchem Schema der Lösungsraum durchsucht werden soll, d.h. wie die Regentropfen verteilt werden sollen. Zunächst einmal liegt es nahe, den gesamten Lösungsraum systematisch zu durchsuchen. Jedoch steigt die Mächtigkeit des Lösungsraumes mit zunehmender Anzahl der Dimensionen exponentiell an. Bis auf einige „kleinere“ Problemstellungen wird die systematische Durchforschung des Lösungsraumes in angemessener Zeit nicht möglich sein. Speziell bei Anwendungen in der Geodäsie, wo die Unbekannten selten diskrete, sondern meist reelle Größen sind, ergibt sich ohnehin ein unendlicher Lösungsraum. Sicherlich könnte der Lösungsraum mittels Rasterung diskretisiert werden, aber welche Maschenweite ausreichend ist, bleibt offen. In der Komplexitäts- und Algorithmentheorie werden solche Probleme als NP-schwere Probleme bezeichnet. NP-schwere Probleme sind dadurch gekennzeichnet, daß eine Lösung mit exponentiellem Aufwand herbeigeführt werden kann, im Gegensatz zu NP-effizienten Problemen, deren Aufwand mit der Problemgröße polynomial ansteigt. Dieser Definition zufolge müssen globale Optimierungsprobleme als effektiv nicht lösbar angesehen werden (SCHWEHM 1996, S. 2). Dennoch besteht die Möglichkeit, heuristische Verfahren auf diese Problemklasse anzusetzen. Zunächst sollen einige wichtige Begriffe zum Verständnis der globalen, heuristischen Optimierungsverfahren geklärt werden, um anschließend eine Einteilung der Verfahren vornehmen zu können.

Heuristiken

Das Wort „Heuristik“ leitet sich vom griechischen „heuriskein“ ab und bedeutet so viel wie „finden“, „entdecken“ oder „erfinderisch sein“. In der Informatik versteht man unter einer Heuristik „ein Lösungsverfahren, das nicht auf wissenschaftlich gesicherten Erkenntnissen, sondern auf Hypothesen, Analogien oder Erfahrungen aufbaut.“⁴ Die Güte solcher Verfahren ist deshalb auch nicht beweisbar, sondern kann nur durch wiederholte Experimente an typischen Problemstellungen geschätzt werden. Heuristiken kommen hauptsächlich dann zum Einsatz, wenn Alternativen nicht mit Erfolg anwendbar sind. Ein direkter Vergleich zwischen „exakten“ Verfahren und Heuristiken ist damit eigentlich nicht möglich, weil ja bereits die Existenz eines effizienten, exakten Verfahrens den Einsatz einer Heuristik überflüssig macht.

Algorithmenbegriff

Häufig wurden die Heuristiken nicht einmal als Algorithmen, sondern schlicht als Probierv Verfahren oder Monte-Carlo-Methoden bezeichnet. Mittlerweile gibt es eine ganze Schar verschiedener Erweiterungen des Algorithmenbegriffes wie etwa „approximative“, „randomisierte“, „probabilistische“ oder „heuristische“ Verfahren. Ob es sich bei den heuristischen Verfahren um Algorithmen handelt, hängt vom Begriff des Algorithmus ab. Der klassische Algorithmenbegriff basiert auf den fünf Eigenschaften „Beschränktheit“, „Korrektheit“, „Vorhersagbarkeit“, „Endlichkeit“ und „Definiertheit“. Den heuristischen Verfahren, die sich zumeist auf einen Pseudozufallszahlengenerator stützen,

⁴ nach DUDEN „Informatik“ 1994

sind solche Eigenschaften jedoch fremd. Zum einen können sie nicht das Auffinden der optimalen Lösung garantieren und zum anderen entstehen mit jedem Aufruf und mit dem damit verbundenen Neustart des Zufallszahlengenerators neue Zahlenwerte. Dadurch wird die Forderung nach Beschränktheit, Korrektheit und Vorhersagbarkeit des klassischen Algorithmusbegriffes verletzt. Auch die klassischen Analysemethoden für Algorithmen sind nicht mehr anwendbar, da der Aufwand für einen unvorhersagbaren Algorithmus nicht definiert ist. Daher können die Heuristiken nicht als algorithmische Optimierungsverfahren im klassischen Sinne betrachtet werden.

Praktikabilität

Für eine ganze Klasse von Problemen steht zu dessen exakter Lösung kein klassischer Algorithmus zur Verfügung und dennoch muß zumindest eine brauchbare Lösung geschaffen werden. Ausgehend von einem begrenzten Kontingent an Rechnerleistung, besteht Bedarf an einem praktikablen Verfahren, das zumindest eine akzeptable, suboptimale Lösung liefert. Ein Verfahren kann als „praktikabel“ bezeichnet werden, wenn es mit dem zur Verfügung stehenden Arbeitsaufwand bzw. der verfügbaren Rechenzeit mindestens ebenso gute Ergebnisse liefert wie andere bekannte Verfahren. In der vorliegenden Arbeit soll die Praktikabilität als Bewertungsmaßstab für den Einsatz verschiedener Verfahren zugrunde gelegt werden.

Eigenschaften des Lösungsraumes im Hinblick auf die globale Optimierung

Während für die lokale Optimierung Stetigkeit und Differenzierbarkeit der Zielfunktion die wichtigsten Voraussetzungen sind, spielt für Funktionen bei der globalen Optimierung die Lipschitz-Eigenschaft (47) die wichtigste Rolle. Erst mit Hilfe der Lipschitz-Eigenschaft wird die Konstruktion von lokalen Optimierungsverfahren ermöglicht. Gibt es für eine Funktion f mit $[a; b] \subseteq \mathbb{D}(f)$ eine Konstante $L > 0$, so daß für alle $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2 \in [a; b]$ gilt

$$|f(\mathbf{u}_1) - f(\mathbf{u}_2)| \leq L \|\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2\|, \quad (47)$$

dann erfüllt nach BRONSTEIN und SEMENDJAJEW (1989, S. 260) die Funktion in $[a; b]$ die Lipschitz-Bedingung mit der Lipschitzkonstanten L . Die Lipschitz-Konstante L ist eine obere Schranke für die Variabilität der Zielfunktion. Je kleiner diese Schranke für eine gegebene Zielfunktion ist, desto effizienter kann ein direktes Optimierungsverfahren den Lösungsraum durchsuchen.

Eine weitere wichtige Eigenschaft des Lösungsraumes ist dessen Mächtigkeit (Tabelle 2). Sind die Unbekannten ganzzahlig, so ergibt sich ein diskretes Optimierungsproblem. Diskrete Probleme können einerseits vom booleschen Typ sein, wenn sie sich aus einer Folge von ja-nein-Entscheidungen zusammensetzen, andererseits aus einer Teilmenge der natürlichen Zahlen bestehen, falls $\mathbf{u} \in \mathbb{N}^m$. In der Geodäsie treten diskrete Probleme auf, wenn beispielsweise bei der Netzplanung die Beobachtungsanordnung optimiert werden soll, so daß auf m Standpunkten die minimale Anzahl von Richtungssätzen gemessen werden kann. In der Satellitengeodäsie treten bei der Ambiguity-Suche ebenfalls ganzzahlige Lösungsräume auf. Die Gradientenverfahren können für diskrete Probleme nicht direkt eingesetzt werden. Erst muß ein diskretes Problem durch ein kontinuierliches ersetzt und nach Berechnung der reellen Größen wieder diskretisiert werden. Die heuristischen Verfahren können für diskrete Probleme direkt eingesetzt werden, ohne daß die Aufgabenstellung neu formuliert werden muß. Voraussetzung ist lediglich die Wahl einer Norm (bzw. Metrik des Lösungsraumes). Das Gros der geodätischen Parameterschätzungen findet in kontinuierlichen Lösungsräumen statt, wobei die Unbekannten im Bereich reeller Zahlen bestimmt werden müssen. Ferner existieren auch gemischt ganzzahlige Probleme, wenn sowohl ganzzahlige, als auch reelle Parameter zu schätzen sind. Die heuristischen Verfahren können grundsätzlich auf alle Problemklassen angewendet werden.

Lösungsraum	diskrete Optimierungsprobleme		kontinuierliche Optimierungsprobleme	
	\mathbb{B}^m boolesch	\mathbb{N}^m ganzzahlig	$\mathbb{N}^m \times \mathbb{R}^m$ gemischt ganzzahlig	$\mathbb{R}^m, \mathbb{C}^m$ kontinuierlich
Gradientenverfahren anwendbar	nein	nein	teilweise	ja
heuristische Verfahren anwendbar	ja	ja	ja	ja

Tabelle 2: Klassifizierung der Lösungsräume

Lösungsmengen des globalen Optimierungsproblems

Für die Konstruktion heuristischer Optimierungsverfahren ist es notwendig, den Begriff der globalen Lösungsmenge (Kapitel 2.3) zu erweitern. Bisher war nur die exakte globale Lösung von Interesse. Die

$$\text{exakte Lösungsmenge } \mathbb{L} = \{\mathbf{u} \in L: f(\mathbf{u}) = \min(f(\mathbf{u}))\} \quad (48)$$

besteht aus dem Punkt bzw. den Punkten mit dem extremsten Funktionswert des gesamten Lösungsraumes. Ziel eines Optimierungsproblems ist die Suche nach \mathbb{L} oder zumindest eines beliebigen Punktes $\mathbf{u} \in \mathbb{L}$. Es kann aber vorkommen, daß der rechentechnische Aufwand zum Finden eines Elementes $\bar{\mathbf{u}}$ aus der Lösungsmenge nicht praktikabel ist. In diesem Fall sind Punkte von Interesse, deren Funktionswerte sich nur in geringem Maße von der exakten Lösung unterscheiden. Man gibt sich also bereits mit einem Punkt \mathbf{u}_ε aus der Menge der

$$\text{approximativen Lösung } \mathbb{L}_\varepsilon = \{\mathbf{u} \in L: |f(\mathbf{u}) - f(\mathbf{u}_\varepsilon)| < \varepsilon\} \quad (49)$$

mit $\varepsilon \geq 0$ zufrieden. Mit der Beschränkung auf die sogenannte approximative Lösung verringert sich allgemein der Schwierigkeitsgrad der Optimierungsaufgabe. Selbst eine approximative Lösung kann nicht immer garantiert werden, denn es gibt kein allgemeines Kriterium, mit dem die Zugehörigkeit eines Punktes zur Menge \mathbb{L}_ε festgestellt werden kann. Abermals kann die Problemstellung abgeschwächt werden, indem auch Punkte zugelassen werden, die nur mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit p in \mathbb{L}_ε liegen. In diesem Fall ist ein Punkt aus der Menge der

$$\text{probabilistischen Lösung } \mathbb{L}_{\varepsilon,\gamma} = \{\mathbf{u} \in L: p(\mathbf{u} \in \mathbb{L}_\varepsilon) \geq \gamma\} \quad (50)$$

mit $\gamma \in]0;1]$ gesucht. Punkte, die Gleichung (50) erfüllen, werden als probabilistische Lösung des globalen Optimierungsproblems bezeichnet. Eine geringe Verminderung für γ von 1 auf beispielsweise 0.99 kann den Schwierigkeitsgrad des Optimierungsproblems erheblich reduzieren. Optimierungsverfahren, die in einem Punkt $\mathbf{u} \in \mathbb{L}_{\varepsilon,\gamma}$ konvergieren, nennt man probabilistische Optimierungsverfahren. Sie können nur mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit γ eine approximative Lösung finden.

Ist das globale Optimum ein isolierter Punkt mit unstetiger Nachbarschaft, so ist das Problem nicht einmal probabilistisch lösbar. In einem solchen Fall ist die Lipschitz-Bedingung nicht erfüllt und selbst heuristische Verfahren können das Optimum nicht finden. Differenzierbare Funktionen, deren Ableitungen beschränkt sind, erfüllen jedoch stets die Lipschitz-Bedingung. Modellfunktionen in der Geodäsie sind in der Regel lipschitz-stetig, so daß heuristische Lösungsverfahren erfolgversprechend angewendet werden können.

Attraktionsgebiet eines Minimums

Betrachtet werden in dieser Arbeit nur lipschitz-stetige bzw. essentielle Optima, die keine isolierten Punkte der Zielfunktion sind. Ein lokales, essentielles Optimum besitzt ein sogenanntes Attraktionsgebiet. Ein Punkt innerhalb eines Attraktions- oder Einzugsgebietes eines Minimums zeichnet sich dadurch aus, daß die Verfolgung des Gradienten zum jeweiligen Minimalpunkt führt. Zu einem lokalen Optimum $\bar{\mathbf{u}}$ wird das dazugehörige Attraktionsgebiet $A(\bar{\mathbf{u}})$ als die Menge aller Startpunkte $\mathbf{u} \in \mathbb{D}$ definiert, für die ein lokales Optimierungsverfahren gegen $\bar{\mathbf{u}}$ konvergiert. Wendet man nun ein Gradientenverfahren (Kapitel 3) auf ein globales Optimierungsproblem wiederholt an und wählt dabei die Startpunkte zufällig aus, so wird das Gradientenverfahren je nach Lage des Startpunktes in verschiedenen lokalen Minima konvergieren. Die Wahrscheinlichkeit, daß das lokale Minimum $\bar{\mathbf{u}}_i$ gefunden wird, beträgt dann

$$p_i = \frac{A(\bar{\mathbf{u}}_i)}{D^m}, \quad (51)$$

wobei D der Definitionsbereich sei. Für das globale Minimum besitzt Formel (51) ebenfalls Gültigkeit, wobei die Wahrscheinlichkeit für die Entdeckung des globalen Minimums mit \bar{p} bezeichnet wird. Damit ist eine wichtige Charakterisierung des globalen Optimums gegeben. Falls $\bar{p} = 1$, so besitzt die Funktion nur ein Optimum, bzw. alle lokalen Optima sind gleichzeitig Elemente des globalen Optimums. In diesem Fall ist die Optimierungsaufgabe mit lokaler Optimierung lösbar, da bei jedem zufällig gewählten Startpunkt die Folge zum globalen Optimum konvergiert. Liegt \bar{p} in der Nähe von eins, wird das Optimum leicht zu finden sein. Je kleiner \bar{p} , desto schwieriger wird die Suche nach dem globalen Optimum mit Hilfe eines heuristischen Optimierungsverfahrens. Für sehr kleine Werte \bar{p} muß ein optimierendes System sehr effizient sein, damit die globale Lösung überhaupt gefunden werden

kann. Wie aus (51) ersichtlich, ist die Wahl des Definitionsbereiches ein entscheidender Faktor für p . Es ist also von großer Bedeutung, daß der Definitionsbereich so weit wie möglich begrenzt wird. Erreicht werden kann dies durch eine überlegte Wahl der zulässigen Intervalle für die Unbekannten. Im Gegensatz zum Definitionsbereich ist die Ausdehnung eines Attraktionsgebietes bei der praktischen Anwendung unbekannt und unveränderlich.

Teure und billige Zielfunktionen

In der Informatik bedient man sich häufig mit Begriffen des täglichen Sprachgebrauchs zur Illustration anstelle von unverständlichen Fachtermini. So werden Zielfunktionen als „teuer“ bezeichnet, wenn eine Funktionswertberechnung sehr rechenintensiv ist. Entsprechend benötigen „billige“ Zielfunktionen einen niedrigen Rechenaufwand.

Für die heuristischen Optimierungsverfahren werden sehr viele Funktionswerte der Zielfunktion benötigt. Je billiger die Zielfunktion ist, desto mehr Punkte können in der zur Verfügung stehenden Zeit berechnet werden und desto erfolversprechender kann das Verfahren angewendet werden.

Bevor also ein heuristisches Verfahren auf eine Optimierungsaufgabe angesetzt wird, sollte die Zielfunktion auf mögliche Vereinfachungen hin untersucht werden. Zwei verschiedene Arten von Vereinfachungen müssen gedanklich voneinander getrennt werden: Zum einen rein rechentechische, die nicht aus einer Veränderung der Zielfunktion bestehen, sondern nur algebraische Formelvereinfachungen sind. Derartige Vereinfachungen haben keinen Einfluß auf das Ergebnis selbst, abgesehen davon, daß das gleiche Ergebnis in kürzerer Rechenzeit erhalten werden kann. Die andere Gruppe von Vereinfachungen sind Approximationen. Sie nähern die ursprüngliche Zielfunktion an und verändern sie dadurch. Diese Art von Vereinfachungen sollte nur dann vorgenommen werden, wenn die Zielfunktion so teuer ist, daß ohne Approximation keine ausreichende Lösung in akzeptabler Zeit berechnet werden kann. Bei der Suche nach Näherungswerten können derartige Vereinfachungen dienlich sein. Ein Beispiel, bei dem die Praktikabilität durch Vereinfachung erheblich gesteigert wurde, ist im Kapitel 5.4 zu finden.

Spezialisierung der Problemklasse durch Vorinformationen

Heuristische Optimierungsverfahren sind Lösungsmethoden für eine große Problemklasse. Jedes Problem dieser Klasse bringt bestimmte Vorinformationen mit sich. Vorinformationen sind beispielsweise Intervallgrenzen für die Unbekannten und beschränken den Lösungsraum. Je mehr a priori-Informationen zur Lösung des Problems genutzt werden können, desto effizienter kann ein Optimierungsverfahren sein. Allerdings wird das Optimierungsverfahren mit dem Einbringen von a priori-Wissen spezialisiert, d.h. ein Programm wird nur noch auf eine kleinere Klasse von Problemen angesetzt werden können, ohne daß der Quelltext modifiziert werden muß.

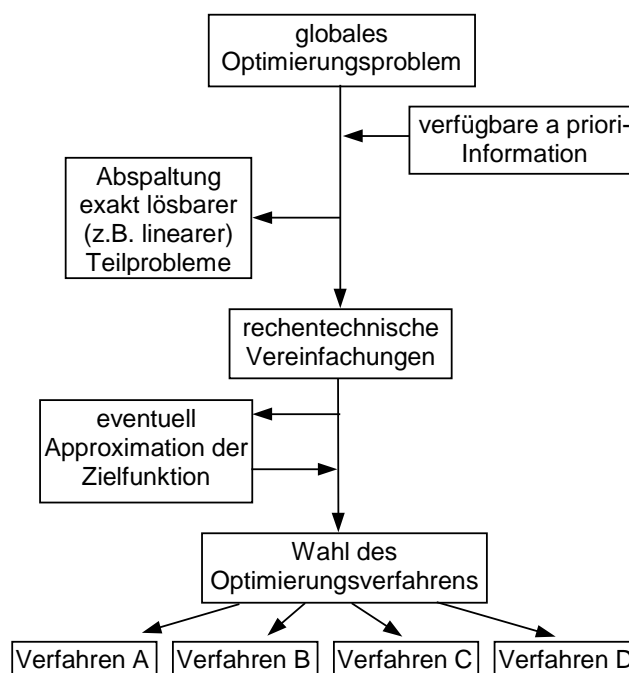


Abb. 15: Aufbau eines effizienten heuristischen Optimierungsverfahrens

In der Regel liegen bedeutende a priori-Informationen vor, die durch ihren Einbezug die Komplexität des Problems stark herabsetzen. Prinzipiell kann ganz auf das Einbringen von Vorinformationen verzichtet werden. Will man aber

zur Lösung eines bestimmten Problems ein möglichst effizientes Verfahren konstruieren, muß das allgemeine Verfahren durch geeignete Implementierung angepaßt werden. Eine Spezialisierung wird also mit „menschlichem“ Arbeitsaufwand verbunden sein.

Das Einbringen aller Vorinformationen ist dennoch in jedem Fall sinnvoll. Abgesehen von der Effizienzsteigerung kann sich sogar in einigen Fällen herausstellen, daß unter Verwendung aller a priori-Informationen nicht mal ein heuristisches Optimierungsverfahren angesetzt werden muß, weil Gradientenverfahren das noch verbleibende Problem lösen.

Das Einbringen von zusätzlichen Informationen ermöglicht auch die Abspaltung exakt lösbarer Teilprobleme (Abb. 15). Beispielsweise können Teilprobleme lineare Probleme sein, die deterministisch mittels Gauß-Algorithmus berechnet werden können, ohne ein rechenintensives heuristisches Verfahren bemühen zu müssen. Im Kapitel (5.2) führt bei einer konkreten Anwendung das Lösen eines Teilproblems außerhalb des heuristischen Verfahrens zu einer enormen Steigerung der Effizienz.

Globale und lokale Strategie eines Optimierungsverfahrens

Die Auswahl der Punkte, an denen die Zielfunktion ausgewertet werden soll, ist ein wichtiges Kriterium für die Wahl des Optimierungsverfahrens. Bei der Auswahl sind zwei einander widersprüchliche Ziele zum Einklang zu bringen. Einerseits wünscht man sich, daß kein Teil des Lösungsraumes vernachlässigt wird, da das globale Optimum überall innerhalb des Definitionsbereiches liegen könnte. Man wünscht sich also eine globale Verlässlichkeit des Verfahrens. Die globale Verlässlichkeit kann nur erreicht werden, wenn Punkte innerhalb des gesamten Definitionsbereiches getestet werden. Man nennt dies auch die globale Strategie eines Verfahrens. Andererseits soll ein Verfahren die Tatsache nutzen, daß in der Nachbarschaft eines relativ guten Punktes mit großer Wahrscheinlichkeit noch bessere Punkte liegen. Die lokale Strategie besteht also darin, in der Nähe eines Punktes weitere Punkte auszuwählen, sei es durch zufällige Wahl oder durch lokale Optimierung.

Ein erfolgversprechendes globales Optimierungsverfahren wird beide Ziele verfolgen. Es muß daher sowohl eine globale, wie auch eine lokale Strategie beinhalten. Jedes globale Optimierungsproblem bringt seine eigene Verteilung der lokalen Minima im Lösungsraum mit sich. Sind die lokalen Minima gleichmäßig innerhalb des ganzen Definitionsbereiches verteilt, so muß der globalen Strategie ein höheres Gewicht beigemessen werden. Im anderen Extremfall wäre das Problem unimodal und man könnte auf die globale Strategie ganz verzichten. Ein ideales Verfahren wird das Verhältnis von lokaler und globaler Strategie von alleine optimal anpassen.

Strategien globaler Optimierungsverfahren

Alle globalen Optimierungsverfahren haben eines gemeinsam: Sie durchsuchen den Definitionsraum, indem für bestimmte Punkte die Qualität berechnet wird. Der Unterschied liegt nun darin, welche Punkte ausgesucht werden. Es gibt passive Verfahren, bei denen die Auswahl der Punkte schon zu Beginn festgelegt ist und aktive, bei denen die Auswahl der Punkte von vorangegangenen Auswertungen abhängt.

4.2 Überdeckungsverfahren

Das Grundprinzip des Überdeckungsverfahrens besteht darin, den Definitionsraum möglichst vollständig abzudecken. Eine vollständige Überdeckung ist jedoch nur bei diskreten Problemen denkbar, so daß im allgemeinen Fall lediglich eine approximative Lösung angestrebt werden kann.

Zunächst wird ein k -dimensionaler Vektor aus Punkten des Definitionsbereiches

$$\Omega_k = \{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_k\} \in \mathfrak{X}^m \quad (52)$$

festgelegt. Hierbei ist \mathbf{u}_i mit $i = 1, \dots, k$ ein Vektor mit möglichen Werten für die Unbekannten, dessen Komponenten der Anzahl zu schätzender Parameter entspricht. Für ein Netz Ω mit der Mächtigkeit k existiert nach der komponentenweisen Auswertung der Zielfunktion ein entsprechender Vektor

$$\Theta_k = \{f(\mathbf{u}_1), f(\mathbf{u}_2), \dots, f(\mathbf{u}_k)\} \in \mathfrak{R}^m \quad (53)$$

deren Elemente die Funktionswerte $f(\mathbf{u}_i)$ sind. Die Lösung des Optimierungsproblems ergibt sich dann mit $\bar{\mathbf{u}} = \min(\Theta_k)$. Jeder Punkt \mathbf{u}^* legt für eine lipschitz-stetige Funktion f eine ε -Umgebung

$$U_\varepsilon(\mathbf{u}^*) = \{\mathbf{u}_i \in \mathfrak{R}^m \mid |f(\mathbf{u}_i) - f(\mathbf{u}^*)| \leq \varepsilon\} \quad (54)$$

mit $\varepsilon > 0$ fest (Abb. 16). Ein Netz Ω wird als endliche Überdeckung des Definitionsraumes bezeichnet, wenn die Vereinigungsmenge aller ε -Umgebungen den Definitionsraum vollständig enthält. Wenn eine solche Überdeckung existiert, ist das globale Optimierungsproblem mit der Genauigkeit ε gelöst, d.h. das Verfahren liefert eine approximative Lösung L_ε .

Der maximale Abstand eines beliebigen Punktes \mathbf{u} zu seinem nächst gelegenen Punkt des Netzes Ω wird Dispersion genannt. Mittels der Dispersion eines Netzes kann der maximale Approximationsfehler für Zielfunktionen mit beschränkter Variabilität abgeschätzt werden. Je gleichmäßiger die Punkte im Definitionsbereich verteilt werden, desto kleiner wird die Dispersion und somit der maximale Approximationsfehler.

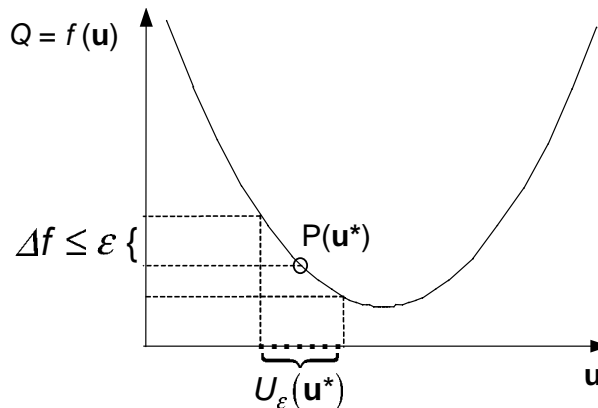


Abb. 16: ε -Umgebung des ausgewerteten Punktes \mathbf{u}^*

Es liegt also nahe, eine gleichmäßige Verteilung als Raster zu wählen. Sind die Intervalle von allen m Unbekannten identisch, so kann in ein Würfelgitter verwendet werden. In der Regel besitzen die unbekannt Parameter verschiedene Intervallgrenzen in Form eines Hyperrechtecks $D = [a_1; b_1] \times [a_2; b_2] \times \dots \times [a_m; b_m]$. Ist q die Anzahl der Punkte einer Kante, so ergibt sich ein Rechteckgitter der Form

$$\Omega = \{\mathbf{u} \in D^m \mid \mathbf{u} = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_m)\} \text{ mit } \xi_k = a_k + \left(i - \frac{1}{2}\right) \frac{b_k - a_k}{q}, \quad i = 1, 2, \dots, q. \quad (55)$$

Die Mächtigkeit von Ω ist q^m und die Länge der Abschnitte zwischen den Gitterpunkten beträgt $(b_k - a_k)/q$. Die Abstände der Gitterpunkte entlang einzelner Dimensionen können auch unterschiedlich groß gewählt werden. Da die Unbekannten verschieden starke Variabilitäten der Zielfunktion verursachen, empfiehlt sich eine unterschiedlich dichte Rasterung entlang einzelner Dimensionen. Es entsteht ein allgemeines Rechteckgitter mit unterschiedlichen Punktzahlen q_k der Form

$$\Omega = \{\mathbf{u} \in D^m \mid \mathbf{u} = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_m)\} \text{ mit } \xi_k = a_k + \left(i - \frac{1}{2}\right) \frac{b_k - a_k}{q_k}, \quad i = 1, 2, \dots, q_k. \quad (56)$$

Die Nachteile eines solchen Überdeckungsverfahrens sind offensichtlich: Die Variabilität der Zielfunktion ist in der Regel sehr groß und obendrein auch noch unbekannt. Deshalb kann zwischen zwei benachbarten Gitterpunkten, selbst bei kleinen Punktabständen, immer ein Minimum verborgen bleiben. Der Rechenaufwand steigt mit q^m an, so daß es oft nicht möglich ist, in akzeptabler Zeit ein m -dimensionales Problem mit dem Gitterabstand $1/q$ zu lösen. Der größte Teil des Rechenaufwandes wird für Bereiche verschwendet, in denen von vornherein kein Minimum zu erwarten ist. TÖRN und ŽILINSKAS (1988, S. 51 - 52) stellen fest, daß die Effizienz passiver Überdeckungsverfahren sehr gering ist.

Sequentielle Überdeckungsverfahren

Ein Optimierungsverfahren, das nicht schon vor dem Start ein Netz von auszuwertenden Punkten festlegt, sondern die Auswahl der Punkte in Abhängigkeit vorangegangener Auswertungen trifft, nennt man sequentielles oder aktives Optimierungsverfahren. Als sequentiell bezeichnet man das Verfahren deshalb, weil die Reihenfolge der

ausgewerteten Punkte von Bedeutung ist. Vom Erfolg oder Mißerfolg der ersten Zielfunktionsauswertungen hängt die weitere Strategie ab. Sequentielle Verfahren werden daher auch als aktive Verfahren bezeichnet.

Ein Nachteil sequentieller Optimierungsverfahren ist die fehlende Parallelisierbarkeit für die Verteilung des Rechenaufwandes auf viele Prozessoren. Eine ausführliche Behandlung dieses Themas findet man in SCHWEHM (1996, S. 24 - 27).

Auch bei sequentiellen Überdeckungsverfahren muß die Variabilität der Zielfunktion beschränkt sein. Angenommen eine Zielfunktion genüge der Lipschitz-Bedingung mit der Lipschitzkonstanten L . In diesem Fall ist eine gleichmäßige Überdeckung des Definitionsraumes zu vorsichtig, denn sie berücksichtigt nicht, daß aufgrund der beschränkten Variabilität der Zielfunktion in der Nähe „schlechter“ Punkte ein größerer Punktabstand ausreicht. Das Optimum muß von einem Punkt \mathbf{u} mit dem Funktionswert $f(\mathbf{u})$ einen Abstand von mindestens $|f(\mathbf{u}) - f(\bar{\mathbf{u}})|/L$ besitzen. Da das Minimum $\bar{\mathbf{u}}$ nicht bekannt ist, kann für $\bar{\mathbf{u}}$ beispielsweise der bisher tiefste Punkt als Ersatz für $\bar{\mathbf{u}}$ eingeführt werden. Um das Optimierungsproblem mit der Genauigkeit ε zu lösen, kann nach jeder Funktionswertberechnung $f(\mathbf{u})$ die Kugel mit dem Radius

$$r = \left| \frac{f(\mathbf{u}) - f(\bar{\mathbf{u}}) + \varepsilon}{L} \right| \quad (57)$$

um den Punkt \mathbf{u} von der Lösung ausgeschlossen werden. Zur Überdeckung des Lösungsraumes sind dann erheblich weniger Punkte auszuwerten. Allerdings kann die Berechnung des noch nicht überdeckten Gebietes aufgrund des zunehmend komplizierter werdenden Suchraumes mit großem Rechenaufwand verbunden sein.

Für alle Überdeckungsverfahren ergibt sich das Problem der Berechnung der Lipschitz-Konstante L , die bei Problemen aus der Praxis grob abgeschätzt werden muß. Schon kleine Fehler in der Abschätzung von L führen zu großen Unterschieden in der Anzahl notwendiger Überdeckungspunkte. Ein Fehler in der Abschätzung von 50% würde den Rechenaufwand um den Faktor 2^m vergrößern.

4.3 Stichprobenverfahren

Die Wahl der auszuwertenden Punkte erfolgt beim Stichprobenverfahren nicht systematisch, sondern mit Hilfe von Zufallszahlen. Die Stichprobenverfahren, häufig auch als heuristische oder randomisierte Verfahren bezeichnet, enthalten Regeln über den kontrollierten Einsatz von Zufallszahlen zur Minimumsuche.

Vorteile der Stichprobenverfahren

Ein Grund für den Einsatz von Zufallszahlen ist die Robustheit eines solchen Verfahrens. Stichprobenverfahren sind nicht anfällig für bestimmte Systematiken der Zielfunktion und arbeiten meist zuverlässig. Ein weiterer Vorteil der Stichprobenverfahren ist eine leichte Implementierbarkeit in ein Programm, sowie die flexible Anwendbarkeit auf eine große Klasse von Problemen. Schon bei TÖRN und ŽILINSKAS (1988, S. 94) wurde auf die Vorteile randomisierter Verfahren hingewiesen. Während eine deterministische Minimumsuche nach jedem Programmstart das gleiche Ergebnis liefert, kann beim Einsatz von Zufallsentscheidungen das Ergebnis durch Neustarts eventuell weiter verbessert werden.

Letztendlich ist der Einsatz von Zufallszahlen motiviert durch ein großes, erfolgreiches Vorbild: der Natur. Deren heutigen Zustand erreichte die biologische Evolution mit Hilfe der Mutation, nämlich kleinen zufälligen Änderungen des Erbgutes. Die Anpassung der Flora und Fauna an gegebene klimatische Verhältnisse beispielsweise kommt einer Optimierungsaufgabe gleich, die erstaunlich gut gelöst ist. Bei schwierigen mathematischen Problemen lassen sich ebenfalls mit dem Zufallsprinzip gute Lösungen finden, auch wenn die optimale Lösung unbekannt bleibt.

Erzeugung von Zufallszahlen

Die automatisierte Generierung von „echten“ Zufallszahlen ist ein Bestreben, das schon in sich widersprüchlich ist. Es ist mit einem Rechner lediglich möglich, Zahlen zu produzieren, die Zufallszahlen nahe kommen. Genaugenommen müßte daher stets von Pseudo-Zufallszahlen gesprochen werden. Verbleibende Systematiken in den Zufallszahlen können ein Stichprobenverfahren ungewollt beeinträchtigen.

Ein Zufallszahlengenerator besteht aus zwei Teilen: der Initialisierung und einer Rechenvorschrift. Mit der Initialisierung werden Startwerte in Form von natürlichen Zahlen bereitgestellt. Sind diese fest im Programm implementiert, so ergibt sich zwangsläufig nach jedem Programmstart die gleiche Zufallszahlenfolge. Möchte man

aber stets neue Zufallsfolgen, so besteht eine Möglichkeit der Initialisierung darin, die Startwerte mit Hilfe der internen Uhr des Rechners zu bestimmen. Schwieriger als die Initialisierung gestaltet sich die Konstruktion einer Rechenvorschrift. In den vierziger Jahren entwickelte man die „Mittelquadratmethode“, bei der jede Zahl aus den mittleren Ziffern des Quadrates ihrer Vorgängerzahl hervorgeht. Wegen der kurzen Zahlenfolge bis zur ersten Wiederholung ist diese Rechenvorschrift nicht mehr in Gebrauch. Heute sind die kongruenten Methoden am häufigsten im Einsatz. Die Rechenvorschrift einer linear kongruenten Methode lautet

$$x_{k+1} = (ax_k + c) \bmod(m) \text{ mit } x_0 \geq 0, a \geq 2, c \geq 0, m > a. \quad (58)$$

Mit Hilfe von (58) wird eine Folge von natürlichen Zahlen erzeugt, deren Periode von den Parametern a , c und m abhängt. Eine nähere Beschreibung der kongruenten Methode, sowie ein auf Überblick die heute gebräuchlichen Rechenvorschriften zur Erzeugung von Zufallszahlen ist bei GRONEK (1997, S. 16 - 17) zu finden.

Erzeugung von normalverteilten Zufallszahlen

Die oben erwähnten Methoden zur Erzeugung von Zufallszahlenfolgen liefern gleichverteilte Zufallszahlen in einem bestimmten Intervall. Einige der randomisierten Optimierungsverfahren benötigen jedoch normalverteilte Zufallsvariablen. Es muß daher eine Transformation von einer Gleichverteilung in eine Normalverteilung durchgeführt werden. Unter der Fülle von Transformationen in der Literatur soll eine Transformationsmethode vorgestellt werden, die sich durch Exaktheit einerseits und durch geringen Rechenaufwand andererseits auszeichnet. Sie findet häufige Verwendung und ist in der Literatur unter dem Namen Polarmethode bekannt.

Seien X und Y zwei unabhängige, gleichverteilte Zufallsvariablen im Intervall $[0; 1[$, so lautet der Algorithmus der Polarmethode wie folgt:

1. Setze $X := 2 X - 1$ und $Y := 2 Y - 1$ (entspricht einer Transformation auf das Intervall $[-1; +1[$)
2. Setze $S := X^2 + Y^2$
3. Falls $S \geq 1$ dann Neustart
4. Setze $N_1 := X \sqrt{\frac{-2 \ln(S)}{S}}$ und $N_2 := Y \sqrt{\frac{-2 \ln(S)}{S}}$

Die Abfrage im Schritt 3 führt dazu, daß die Schleife im Durchschnitt 1.27 mal durchlaufen wird. N_1 und N_2 sind zwei normalverteilte Zufallsvariablen mit dem Erwartungswert $\mu = 0$ und der Standardabweichung $\sigma = 1$. Eine Transformation auf beliebige Erwartungswerte μ mit Standardabweichung σ erfolgt durch die Formeln

$$5. N_1(\mu, \sigma^2) = \mu + \sigma N_1 \text{ und } N_2(\mu, \sigma^2) = \mu + \sigma N_2.$$

Klassifikation der heuristischen Verfahren

In der Literatur ist eine Vielzahl von Verfahren zu finden, vor allem deshalb, weil jede beliebige Strategie erlaubt ist, die ein brauchbares Ergebnis liefert. Jedes Verfahren besitzt individuelle Stärken und Schwächen und optimiert je nach Aufgabenstellung mehr oder weniger erfolgreich. Im Rahmen dieser Arbeit sollen nur einige Verfahren vorgestellt werden. Für eine tiefergehende Klassifikation sei auf TÖRN und ŽILINSKAS (1988) verwiesen.

Eine Aufteilung entsprechend der anwendbaren Problemklassen ist nicht möglich, da alle heuristischen Verfahren prinzipiell die gleiche Problemklasse behandeln, nämlich globale multimodale multidimensionale Optimierungsaufgaben. Interessant für den Anwender wäre die von einem Verfahren erreichbare Genauigkeit. Jedoch ist diese stärker von der Problemstellung, als vom Lösungsverfahren selbst abhängig. Mögliche Kriterien für eine Klassifikation sind beispielsweise:

1. Aktivität oder Passivität der Punktauswahl (parallele/adaptive und sequentielle/nicht adaptive Verfahren)
2. Größe des Speichers der ausgewerteten Punkte (Monte-Carlo- Markov- Genetische Verfahren)
3. Gewichtung der globalen und lokalen Strategie (global und lokal zuverlässige Verfahren)
4. Ob und wie oft lokale Optimierungsverfahren mit eingebunden werden (single- und multistart Verfahren)
5. Ob eine ε -Überdeckung garantiert werden kann (approximative und probabilistische Verfahren)
6. Ob ein globales Modell der Zielfunktion aufgebaut wird (direkte und indirekte Verfahren)

7. Ob die Definitionsmenge der Zielfunktion durch Straffunktionen eingegrenzt wird (Bestrafungsverfahren)
8. Ob auf Zufallszahlen zurückgegriffen wird (deterministische und randomisierte/stochastische Verfahren)
9. Ob das Verfahren viele Optimierungsprobleme löst oder spezialisiert ist (general- und tailored Verfahren)

Da die Menge der gespeicherten Punkte ein besonders wichtiges Kriterium für die Komplexität und somit für die Praktikabilität eines Verfahrens darstellt, soll die Klassifizierung nach der Größe des Speichers (Nr. 2.) erfolgen.

Allgemeine Vorgehensweise bei direkten, globalen Optimierungsverfahren

Ein Verfahren wird vor allem durch einen Konstruktionsoperator und einen Ersetzungsoperator geprägt. Während der Konstruktionsoperator die Auswahl der zu berechnenden Punkte trifft, entscheidet der Ersetzungsoperator darüber, welche Punkte verworfen und welche gespeichert werden.

Die Entscheidung darüber, welche Punkte konstruiert und welche ersetzt werden, wird in Abhängigkeit von vorausgegangenen Auswertungen der Zielfunktion erfolgen. Ein Verfahren muß sich also die Ergebnisse vorangegangener Berechnungen merken. Damit entsteht die Liste

$$[\mathbf{u}, \mathbf{f}]_H = \{(\mathbf{u}_1, f_1), (\mathbf{u}_2, f_2), \dots, (\mathbf{u}_H, f_H)\} \in \mathfrak{R}^m \times \mathfrak{R} \quad (59)$$

mit insgesamt H gespeicherten Elementen bestehend aus Punkten \mathbf{u} und Qualitäten $f(\mathbf{u})$. Die Größe H ist die Anzahl der gespeicherten Punkte. H kann zwischen 0 und der Anzahl bisheriger Funktionsauswertungen liegen. Nach jeder Iteration i eines Verfahrens wird der nächste auszuwertende Punkt \mathbf{u}_i in Abhängigkeit der Liste gespeicherter Punkte $[\mathbf{u}, \mathbf{f}]_H$ mit Hilfe des Konstruktionsoperators

$$\mathcal{K}_i: (\mathfrak{R}^m \times \mathfrak{R})_H \rightarrow \mathfrak{R}^m \quad (60)$$

ausgewählt. Danach erfolgt die Bewertung des durch \mathcal{K}_i bestimmten Punktes \mathbf{u}_i , indem \mathbf{u}_i in die Zielfunktion eingesetzt und dessen Funktionswert $f(\mathbf{u}_i)$ berechnet wird. Anschließend muß entschieden werden, ob der neue Punkt in die Liste der zu speichernden Punkte aufgenommen werden soll. Dies erfolgt mittels des Ersetzungsoperators \mathcal{E} der Form

$$\mathcal{E}_i: (\mathfrak{R}^m \times \mathfrak{R})_{H+1} \rightarrow (\mathfrak{R}^m \times \mathfrak{R})_H \quad (61)$$

Der Index H verdeutlicht, daß \mathcal{E} von vorangegangenen Auswertungen der Zielfunktion abhängt. Das Ablaufschema eines allgemeinen Algorithmus ist in Tabelle 3 dargestellt.

1. Initialisierung:	$i = 1, \mathbf{u}_0, f_0 = f(\mathbf{u}_0)$ mit \mathbf{u}_0 $\left\{ \begin{array}{l} \text{aus apriori Information oder} \\ \text{zufälliger Wahl aus } D \end{array} \right.$
2. Konstruktion:	$\mathbf{u}_i = \mathcal{K}_i([\mathbf{u}, \mathbf{f}]_{H_{i-1}})$
3. Bewertung:	$f_i = f(\mathbf{u}_i)$
4. Ersetzung:	$[\mathbf{u}, \mathbf{f}]_{H_i} = \mathcal{E}_i(\mathbf{u}_i, f_i, [\mathbf{u}, \mathbf{f}]_{H_{i-1}})$
5. Abbruchkriterium:	bei Erfüllung zu (6.) sonst $i := i + 1$ und Fortsetzung mit (2.)
6. Ausgabe:	$\{\mathbf{u}^*, \mathbf{f}^*\} \in [\mathbf{u}, \mathbf{f}]_{H_i}$ mit $\mathbf{f}^* = \min[\mathbf{f}_{H_i}]$

Tabelle 3: Allgemeines Schema direkter Optimierungsverfahren

Die parallelen, d.h. nicht adaptiven Verfahren, für die $H=0$ gilt, stellen einen Sonderfall dar, bei dem die Konstruktion der Punkte schon extern vollzogen wurde. Der Ersetzungsoperator entfällt ganz.

4.4 Nicht adaptive Verfahren, Monte-Carlo-Methoden

Bei nicht adaptiven Verfahren wird die Auswahl der Auswertepunkte unabhängig von den Erfolgen oder Mißerfolgen vorangegangener Auswertungen getroffen. Es gilt $H=0$, d.h. gespeicherte Punkte haben keinen Einfluß auf den Optimierungsvorgang. Die in Kapitel (4.2) beschriebenen Überdeckungsverfahren sind ein Beispiel für nicht

adaptive Verfahren, denn dort wird ein vorgegebenes Netz von Punkten ausgewertet. Nicht adaptive Verfahren, deren Punktauswahl zufällig geschieht, sind unter dem Namen Monte-Carlo-Methode bekannt.

Die Monte-Carlo-Verfahren sind vom inneren Aufbau sehr einfach. Die Unbekannten werden innerhalb ihres Definitionsbereiches mit gleichverteilten Zufallszahlen besetzt. Die Konstruktion von gleichverteilten Punkten im Intervall $[a; b]$ erfolgt mit

$$\mathcal{K} = \text{RANDOM} [a; b]. \quad (62)$$

Alle Punkte werden bewertet. Eine Ersetzung von Punkten findet nicht statt, lediglich der Punkt mit der besten Qualität wird als Endergebnis ausgegeben. Nicht adaptive Stichprobenverfahren führen also eine blinde Suche im gesamten Lösungsraum durch.

Monte-Carlo-Methoden sind sehr leicht zu implementieren, sie sind jedoch nicht effizient. Solange die Zielfunktion stetige Minima enthält, sind Optimierungsverfahren, die sich diese Tatsache zu Nutze machen, besser geeignet. Sinnvoll ist der Einsatz von reinen Monte-Carlo-Verfahren nur dann, wenn die Zielfunktion nicht essentielle Optima enthält, die kein eigenes Attraktionsgebiet besitzen. Derartig unstrukturierte Zielfunktionen sind jedoch auf dem Gebiet der Geodäsie nicht vorhanden.

4.5 Markov-Verfahren

Verfahren mit $H=1$ werden als Markov-Verfahren bezeichnet. Da H die Anzahl der gespeicherten Punkte ist, können sich die Markov-Verfahren nur eine Auswertung $[\mathbf{u}^*, f^*]$ der Zielfunktion merken. Die Konstruktion neuer Punkte erfolgt durch einen Konstruktionsoperator $\mathcal{K}([\mathbf{u}^*, f^*])$, der von dem Punkt $\mathbf{P}^*[\mathbf{u}^*, f^*]$ abhängt. Neue Punkte werden in der Regel so konstruiert, daß sie in der Nähe des gespeicherten Punktes liegen. Eine Möglichkeit besteht darin, gleichverteilte Zufallszahlen in einem abgeschlossenen Intervall um den gespeicherten Punkt zu bilden. Es ergibt sich ein Konstruktionsoperator der Form

$$\mathcal{K} = \text{RANDOM} [\mathbf{u}^* - \mathbf{S}; \mathbf{u}^* + \mathbf{S}]. \quad (63)$$

\mathbf{S} dient als Schranke für die Unbekannten und ist ein Vektor mit positiven reellen Zahlen. Diese müssen keine Konstanten sein, sondern können beispielsweise von der Anzahl durchlaufener Iterationsschritte abhängen. Mit \mathcal{K} in (63) werden innerhalb eines m -dimensionalen Hyperrechteckes neue Punkte um den gespeicherten Punkt konstruiert. Kann die Metrik einzelner unbekannter Parameter mit einbezogen werden, so ist es sinnvoll, \mathbf{S} als Vektor mit unterschiedlich großen Komponenten zuzulassen. Ansonsten sind die Vektorkomponenten⁵ \mathbf{S} des Vektors \mathbf{S} gleich groß und Punkte innerhalb eines Hyperquadrats können konstruiert werden.

Es stellt sich die Frage, ob es sinnvoll ist, feste Grenzen für die Intervalle vorzugeben. Bei der Suche nach dem Minimum beruhen die Vorgabewerte ohnehin auf Hypothesen, so daß eine weiche Abgrenzung sinnvoll erscheint. Mit

$$\mathcal{K} = \mathcal{N} (U^*, \mathbf{S}) \quad (64)$$

werden Punkte in der Umgebung von U^* normalverteilt konstruiert, mit dem Erwartungswert $\mu = U^*$ und der Standardabweichung $\sigma = S$. Auf diese Weise werden bevorzugt Punkte in der direkten Umgebung des gespeicherten Punktes ausgewählt.

Sowohl bei einer Gleichverteilung (63) als auch bei einer Normalverteilung (64) läßt sich durch den Parameter S zwischen globaler und lokaler Suchstrategie umschalten. Je größer S , desto größer ist der Suchraum um den Punkt \mathbf{u}^* und desto höher ist die Gewichtung der globalen Suche. Für $S \rightarrow 0$ entartet das Verfahren zu einem lokalen Optimierungsalgorithmus. Allerdings ist die reine Suche nach einem lokalen Optimum mittels heuristischer Verfahren nicht effizient und es sollte daher auf die Gradientenmethoden (Kap. 3) zurückgegriffen werden.

Die bekannten Markov-Verfahren unterscheiden sich hauptsächlich durch den Ersetzungsparameter \mathcal{E} . Da die Markov-Verfahren nur einen Punkt speichern, wird mit \mathcal{E} lediglich bestimmt, ob der gespeicherte Punkt \mathbf{P}^* durch den aktuellen Punkt \mathbf{P}_j ersetzt werden soll. In Tabelle 4 werden einige bekannte Verfahren durch ihren Ersetzungsoperator definiert.

⁵ \mathbf{S} ist der Vektor mit den Schranken für alle Unbekannten, S wird verwendet, um die Einzelkomponente des Vektors als Schranke für eine Unbekannte zu bezeichnen.

In Literatur verwendete Namen der Verfahren		Ersetzungsparameter \mathcal{E}	
Englisch	Deutsch	Ersetzung von \mathbf{P}^* durch \mathbf{P}_i ,	Beibehaltung von \mathbf{P}^*
Hill Climbing	--	$f(\mathbf{u}_i) < f(\mathbf{u}^*)$	sonst
Great Deluge Algorithm	Sintflut Algorithmus	$f(\mathbf{u}_i) < T(i)$	sonst
Threshold Accepting	Schwellenakzeptanz	$f(\mathbf{u}_i) - f(\mathbf{u}^*) < T(i)$	sonst
Simulated Annealing	Simuliertes Ausglühen	$\text{RANDOM}[0;1] < \text{EXP}[-\Delta f/T(i)]$ mit $\Delta f = f(\mathbf{u}_i) - f(\mathbf{u}^*)$	sonst

Tabelle 4: Markov-Verfahren

Der Steuerparameter $T(i)$ ist ein Maß für die Akzeptanz der neu berechneten Punkte. Dabei ist $T(i)$ eine positive reelle Zahl, die von der Anzahl durchlaufener Iterationen abhängt. Für alle Verfahren wird ein monoton fallendes $T(i)$ verwendet. Damit wird im Laufe der Durchführung von einer großzügigen Akzeptanz allmählich zu härteren Kriterien für die Anerkennung von neuen Punkten übergegangen. Durch den Steuerparameter $T(i)$ kann auch geregelt werden, ob nur neue Optima akzeptiert werden oder ob gewisse Verschlechterungen der Qualität erlaubt sind.

Abbildung 17 veranschaulicht den Einfluß der Steuerparameter S und T für den Optimierungsvorgang. Während mit Hilfe von S die Bandbreite der Konstruktionspunkte entlang der Unbekanntenachse geregelt wird, übernimmt T die Kontrolle darüber, welche Funktionswerte noch zu akzeptieren sind. T kann daher auch als oberste Grenze für die Qualität von ersetzbaren Punkten verstanden werden. Beide Parameter nehmen für jedes Verfahren sehr unterschiedliche Gestalt an. Beispielsweise können S und T scharfe oder weiche Grenzen sein. Die Abbildungen 17 und 18 sind deshalb nicht als geometrische Beschreibung der Parameter, sondern als Prinzipskizzen aufzufassen.

Wie in Abbildung 18 zu erkennen ist, wird das globale Minimum durch die Herabsetzung der zeitabhängigen Steuerparameter S und T eingegrenzt. Die Herabsetzung der Steuerparameter muß dabei langsam erfolgen. Wird beispielsweise S zu schnell vermindert, besteht die Gefahr, daß das globale Minimum außerhalb des Konstruktionsbereiches liegt und deshalb nicht mehr gefunden werden kann. Andererseits darf die Herabsetzung von S nicht beliebig langsam erfolgen, da das Ergebnis in endlicher Zeit zur Verfügung stehen muß. Die Herabsetzung von S ist daher als ein weiterer Steuerparameter aufzufassen, deren optimaler Wert von der Optimierungsaufgabe abhängt und in der Regel empirisch bestimmt werden muß. Näheres dazu im Abschnitt 4.9.

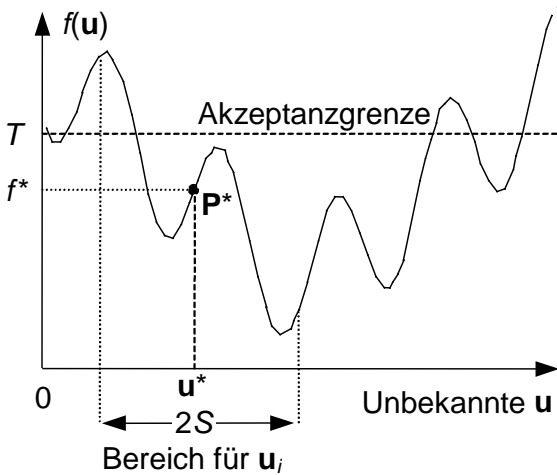


Abb. 17: Steuerparameter S und T

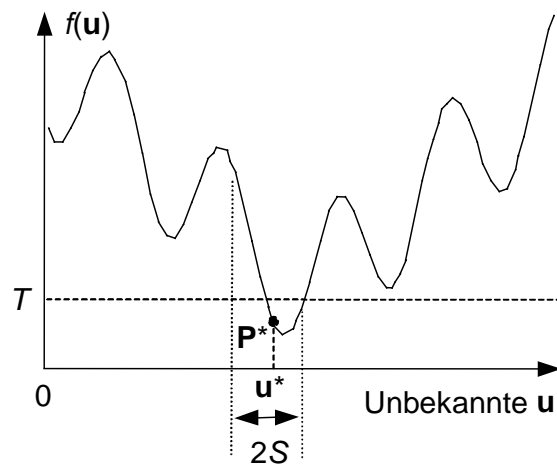


Abb. 18: Entwicklung nach einigen Iterationen

4.6 Hill Climbing

Das sogenannte Hill Climbing Verfahren besitzt den einfachsten Ersetzungsoperator. Jeder Punkt, der besser als das bisherige Optimum ist, wird akzeptiert, schlechtere Punkte werden jedoch immer verworfen. Der Steuerparameter $T(i)$ entfällt (Tabelle 4). Diese Tatsache kann als Vorteil des Verfahrens gewertet werden, da die Steuerparameter für jedes Optimierungsproblem speziell angepaßt werden müssen. Die leichte Handhabung des Verfahrens steht einer oft unbefriedigenden Güte der Lösung gegenüber. Häufig bleibt das Verfahren in einem Nebenminimum stecken. Ferner berichten APEL und TEUBER (1996, Kap. 3) über eine Abhängigkeit der Lösung von den Startwerten, die nur durch häufige Neustarts mit geänderten Startwerten beseitigt werden kann.

4.7 Sintflut Algorithmus

Nach der Definition des Algorithmenbegriffes (Kap. 4.1) ist das Verfahren kein Algorithmus in diesem Sinne. Zur Anlehnung an die Literatur wird dennoch der Name beibehalten.

Die Ersetzung von Punkten erfolgt in Abhängigkeit des zeitabhängigen Steuerparameters $T(i)$, der hier oft auch als „Wasserstand“ bezeichnet wird. Dabei spielt es keine Rolle, ob der neue Punkt besser oder schlechter als das bisherige Optimum ist. Das einzige Kriterium für die Ersetzung ist, ob der Schwellwert $T(i)$ erreicht wird oder nicht. Mit der allmählichen Herabsetzung von $T(i)$ kann ein globales Minimum gefunden werden (Abb. 18).

OTTO (1994, S. 188 - 191) weist darauf hin, daß der Sintflut Algorithmus in umfangreichen Tests etwa die doppelte Rechenzeit im Vergleich zu Threshold Accepting benötigte. Gleichzeitig sei aber die Handhabung des Steuerparameters im Vergleich einfacher.

4.8 Threshold Accepting

Das von DUECK und SCHEUER (1990) entwickelte Verfahren stellt eine Verfeinerung des Sintflut Algorithmus dar und hat in der Optimierung weite Verbreitung gefunden.

Die Initialisierung kann durch Übergabe vorgegebener Startwerte oder, wie in Tabelle 5 skizziert, zufällig erfolgen. Voraussetzung ist die Vorgabe der Intervallgrenzen \mathbf{u}_{\min} und \mathbf{u}_{\max} . Die Konstruktion neuer Punkte erfolgt in Abhängigkeit des zeitabhängigen Steuerparameters S und dem gespeicherten Vektor \mathbf{u}^* .

1. Initialisierung:	$i = 1, \mathbf{u}^* = \text{RANDOM} [\mathbf{u}_{\min}; \mathbf{u}_{\max}], f^* = f(\mathbf{u}^*)$
2. Konstruktion:	$\mathbf{u}_i = \mathcal{K}(\mathbf{u}^*, S)$
3. Bewertung:	$f_i = f(\mathbf{u}_i)$
4. Ersetzung:	$\mathcal{E} \begin{cases} \mathbf{u}^* := \mathbf{u}_i & \text{wenn } f_i - f^* < T \\ \mathbf{u}^* & \text{sonst} \end{cases}$
5. Abbruchkriterium:	wenn Bedingung erfüllt zu (6.) sonst $i := i + 1$, vermindere (S, T) , Rücksprung zu (2.)
6. Ausgabe:	\mathbf{u}^*

Tabelle 5: Schema für Threshold Accepting

Nach der Bewertung des konstruierten Punktes \mathbf{u}_i erfolgt eine Ersetzung, wenn der Funktionswert des konstruierten Punktes f_i kleiner ist als die Summe aus Referenz f^* und Steuerparameter T . Mit $T > 0$ werden auch schlechtere Punkte akzeptiert, sofern sie sich maximal um den Betrag von T unterscheiden. Für $T \rightarrow 0$ konvergiert Threshold Accepting zum Hill Climbing Verfahren, bei dem nur neue Optima Akzeptanz finden.

Die Varianten zur Verminderung von S und T sowie die möglichen Abbruchkriterien unterscheiden sich nicht grundsätzlich von Simulated Annealing. Sie werden daher im folgenden Kapitel erläutert.

OTTO (1994, S. 188 - 191) erzielte mit Threshold Accepting die besten und schnellsten Ergebnisse im Vergleich zum Great Deluge Algorithm und Simulated Annealing. Auch APEL und TEUBER (1996) sehen in Threshold Accepting die schnellste Optimierungsmethode, weisen jedoch gleichzeitig auf die Unterlegenheit des Verfahrens in Bezug auf das Steckenbleiben in Suboptima hin.

4.9 Simulated Annealing

Das Simulated Annealing wird im deutschen Sprachgebrauch als „Simuliertes Ausglühen“ bezeichnet und ist das bekannteste Markov-Verfahren. Teilweise werden in der Literatur alle Markov-Verfahren unter dem Namen Simuliertes Ausglühen zusammengefaßt. Häufig finden sich auch Untervarianten oder beliebige Verfeinerungen des Verfahrens. Der Ablauf der Grundvariante ist Tabelle 6 zu entnehmen.

Die Vorgehensweise unterscheidet sich von Threshold Accepting lediglich durch den Ersetzungsoperator. Die Initialisierung erfolgt entweder mit vorgegebenen Startwerten \mathbf{u}_0 oder zufällig innerhalb eines vorgegebenen Bereiches. Neue Punkte werden mit Hilfe von Gleichung (63) oder (64) generiert.

1. Initialisierung:	$i = 1, \mathbf{u}^* = \text{RANDOM} [\mathbf{u}_{\min}; \mathbf{u}_{\max}], f^* = f(\mathbf{u}^*)$
2. Konstruktion:	$\mathbf{u}_i = \mathcal{K}(\mathbf{u}^*, S)$
3. Bewertung:	$f_i = f(\mathbf{u}_i)$
4. Ersetzung:	$\mathcal{E} \begin{cases} \mathbf{u}^* := \mathbf{u}_i & \text{wenn } \text{RANDOM} [0; 1] < e^{-\frac{f_i - f^*}{T}} \\ \mathbf{u}^* & \text{sonst} \end{cases}$
5. Abbruchkriterium:	wenn Bedingung erfüllt zu (6.) sonst $i := i + 1$, vermindere (S, T) , Rücksprung zu (2.)
6. Ausgabe:	\mathbf{u}^*

Tabelle 6: Schema für das Simulierte Abkühlen

Besondere Aufmerksamkeit sei der Ersetzung gewidmet. Eine im Intervall $[0; 1[$ erzeugte Zufallszahl wird mit dem Ergebnis einer Exponentialfunktion verglichen, die wiederum von der Differenz der Funktionswerte zwischen dem neuen und dem alten Punkt abhängig ist. Ist die Güte des neuen Punktes besser als der gespeicherte Funktionswert, d.h. es gilt $f_i < f^*$, so ergibt sich ein positiver Exponent, da $T \geq 0$ gilt. Die Wahrscheinlichkeit, daß der neue Punkt übernommen wird, beträgt also 1, weil ein positiver Exponent in jedem Fall einen Wert größer 1 liefert und die Ungleichung in Tabelle 6 in jedem Fall erfüllt. Schlechtere Punkte \mathbf{P}_i werden allerdings nur mit einer Wahrscheinlichkeit akzeptiert, die zwischen 0 und 1 liegt. Über den Steuerparameter T kann die Akzeptanzwahrscheinlichkeit reguliert werden. Für $T \rightarrow 0$ konvergiert Simulated Annealing zum Hill Climbing Verfahren und es wird nur noch kleineren Funktionswerten der Zielfunktion Beachtung geschenkt.

Der Verlauf des Verfahrens ist durch das kontinuierliche Absenken der Steuerparameter und das stufenweise Absacken der Zielfunktion (z.B. $Q = \sum \mathbf{v}^T \mathbf{v}$) gekennzeichnet. Ein Überblick über den charakteristischen Verlauf der beteiligten Größen bietet MAUTZ (1999, S. 791 - 797).

In der Literatur erfolgt der Abbruch des Verfahrens, wenn lange keine spürbare Verbesserung mehr eingetreten ist. Es besteht auch die Möglichkeit, das Abbruchkriterium an S bzw. T zu binden, wie beispielsweise die Abbruchbedingung $T < \varepsilon$. In diesem Fall ist \mathbf{u}^* (in der Regel) ein Element der approximativen Lösung (49). Wird $S < \varepsilon$ als Abbruchkriterium gewählt, so unterschreitet in diesem Fall die mögliche Variabilität der Unbekannten eine vorgegebene Schranke, die direkt dem Restfehler der Unbekannten entspricht.

Die Herabsetzung der Steuerparameter, in der Literatur häufig als Abkühlungsschema bezeichnet, erfolgt in der Regel logarithmisch, um verschiedene Größenordnungen des Suchraumes abzudecken. Die Verminderung von $T(i)$ erfolgt durch den konstanten Steuerparameter R mit

$$T(i) = T_0 R^i. \quad (65)$$

T_0 ist ein extern übergebener Startwert. Die Konstante R muß im Bereich zwischen 0 und 1 liegen, beispielsweise 0.9995, um ein langsames, streng monotonen Absinken von $T(i)$ zu ermöglichen. Auch ein monoton fallendes $T(i)$ ist denkbar. In diesem Fall wird T nicht in jeder, sondern in jeder k -ten Iteration einmal herabgesetzt.

TÖRN und ŽILINSKAS (1988, S. 75) weisen schon auf die widersprüchlichen Beurteilungen von Simulated Annealing in den Jahren 1983 - 1988 hin, als das Verfahren gerade neu entwickelt worden war. In Veröffentlichungen der 90er Jahre sind sich die Experten noch immer nicht einig. Während SCHWEHM (1996, S. 26 - 27) Simulated Annealing sowie andere Markov-Verfahren für komplexere Probleme als ungeeignet betrachtet, fühlt sich NOLTE (1997, S. 1 - 5) durch Experimente bestätigt, daß Simulated Annealing das am besten geeignete Verfahren sei. Die sich in der Literatur häufig widersprechenden Einschätzungen der Verfahren sind darauf zurückzuführen, daß

- verschiedene Optimierungsprobleme mit unterschiedlichen Zielfunktionen zu lösen sind
- spezielle Untervarianten der Verfahren entwickelt werden
- unterschiedliche Werte für die Steuerparameter zugrunde liegen.

Simuliertes Abkühlen wurde vor allem für größere kombinatorische Probleme wie beispielsweise das Städtereisen⁶ (OTTO 1994, S. 190 - 191) oder das Färbungsproblem⁷ (NOLTE 1997) untersucht und findet dort erfolgreiche und häufige Verwendung.

⁶ Problem des Handlungsreisenden, der n Städte auf dem kürzesten Reiseweg besuchen soll

Konvergenz des Verfahrens

Für die blinde zufällige Suche läßt sich die Konvergenz leicht nachweisen. Der Suchraum \mathbb{D} sei beschränkt und die probabilistische Lösung $\mathbb{L}_{\varepsilon\gamma}$ (Gleichung 50) des Optimierungsproblems sei eine Teilmenge der Definitionsmenge. So wird mit der Wahrscheinlichkeit $p > 0$ ein zufällig ausgewählter Punkt Element von $\mathbb{L}_{\varepsilon\gamma}$ sein. Die Wahrscheinlichkeit, daß nach k Versuchen für mindestens einen Punkt $\mathbf{P} \in \mathbb{L}_{\varepsilon\gamma}$ gilt, beträgt

$$p_i = 1 - (1 - p)^i. \quad (66)$$

Für $i \rightarrow \infty$ konvergiert die Folge gegen die Wahrscheinlichkeit $p = 1$. Wird ein Multistart Verfahren verwendet, d.h. es wird nach jeder Auswahl eines Punktes ein lokales Optimierungsverfahren gestartet, so beträgt die Wahrscheinlichkeit 1, daß das globale Minimum für $i \rightarrow \infty$ gefunden wird, denn jedes globale essentielle Minimum besitzt ein Attraktionsgebiet $A(\bar{\mathbf{u}})$. So ist nach Gleichung (51) die Wahrscheinlichkeit $p > 0$, daß ein Punkt innerhalb des Attraktionsgebietes zufällig ausgewählt wird.

Die asymptotische Konvergenz von Simulated Annealing wurde von LAARHOVEN und AARTS (1988, S. 17 - 35) untersucht. Simulated Annealing wird als ein Algorithmus betrachtet, der ständig eine Konfiguration in eine Folgekonfiguration transformiert. Dieser Mechanismus kann durch Markov-Ketten beschrieben werden. Das Entstehen eines Gliedes der Markov-Kette hängt, wie bei Simulated Annealing, nur von dem Vorgänger, bzw. dem einzigen gespeicherten Punkt ab. Die Wahrscheinlichkeit, daß ein bestimmter Zustand \mathbf{j} eingetreten ist, wird mit

$$p_j(i) = p \{ \mathbf{u}_i = \mathbf{j} \} \quad (67)$$

beschrieben. Von Bedeutung sind die Übergangswahrscheinlichkeiten, die in der Form

$$p_{jk}(i, i+1) = p \{ \mathbf{u}_i = \mathbf{j} \mid \mathbf{u}_{i+1} = \mathbf{k} \} \quad (68)$$

notiert werden. Formel (68) gibt die Wahrscheinlichkeit an, mit der eine Folge zwischen Schritt i und $i+1$ vom Zustand \mathbf{j} in den Zustand \mathbf{k} übergeht. Entscheidend ist, ob die Übergangswahrscheinlichkeit p_{jk} von i abhängt oder konstant bleibt. Im ersten Fall spricht man von inhomogenen Markov-Ketten im zweiten Fall von homogenen Markov-Ketten.

Asymptotische Konvergenz des homogenen Simulated Annealing

Sind die Steuerparameter S und T von Simulated Annealing unabhängig von der Anzahl durchlaufener Iterationen i , so spricht man von einem homogenen Algorithmus. In diesem Fall sind S und T Konstanten und das Verfahren entspricht einer homogenen Markov-Kette, denn die Wahrscheinlichkeit, daß die Unbekannten von einem Zustand in einen anderen wechseln, bleibt konstant. Für Simulated Annealing muß aber zumindest der Steuerparameter T herabgesetzt werden. Wird T stufenweise herabgesetzt, so ergibt sich eine Folge von homogenen Markov-Ketten, nämlich für jede Stufe genau eine. LAARHOVEN und AARTS (1988, S. 17 - 26) zeigen, daß das Optimum $\bar{\mathbf{u}}$ mit der Wahrscheinlichkeit $p = 1$ gefunden wird, wenn die folgenden Bedingungen erfüllt sind:

1. Jede Markov-Kette besitzt eine unendliche Länge.
2. $p(\mathcal{K}(\mathbf{u}^*, S) = \mathbf{u}) > 0 \forall \mathbf{u} \in \mathbb{D}$, d.h. jedes Element der Definitionsmenge wird mit einer Wahrscheinlichkeit größer 0 konstruiert. Daraus folgt, daß S den gesamten Definitionsraum umfassen muß.
3. $\forall T > 0 \exists \mathbf{u}, \mathbf{u}^* \in \mathbb{D} : p(\mathcal{E}(\mathbf{u}^*, T) = \mathbf{u}) < 1$, d.h. nicht jede Ersetzung erfolgt mit der Wahrscheinlichkeit $p = 1$. (Aperiodizität der Markov-Kette)

Die Bedingung unter (3.) ist aufgrund des Ersetzungsoperators für Simulated Annealing (Tabelle 6) erfüllt. Die Bedingung unter (1.) ist jedoch unrealistisch, denn jede Kette muß bei einer Realisierung des Verfahrens von endlicher Länge sein.

Asymptotische Konvergenz des inhomogenen Simulated Annealing

Wird der Steuerparameter T kontinuierlich herabgesetzt, so ergibt sich ein Algorithmus, der auf einer inhomogenen Markov-Kette basiert. Die Übergangswahrscheinlichkeiten ändern sich von Schritt zu Schritt aufgrund der Veränderung des Ersetzungsoperators, der ja eine Funktion von T ist.

⁷ Problem beim Einfärben von angrenzenden Flächen mit der minimalen Anzahl von Farben, wobei angrenzende Flächen verschieden eingefärbt werden müssen.

Der asymptotische Konvergenzbeweis beruht darauf, daß die Markov-Ketten unter bestimmten Bedingungen ergodisch sind. Man nennt ein System ergodisch, wenn bei unterschiedlichen Startpunkten eine Bewegung über lange Zeit betrachtet immer zu der gleichen Verteilung von Werten führt.

Die Beweisführung wird in LAARHOVEN und AARTS (1988, S. 27 - 38) ausführlich beschrieben. Als Bedingung für die Konvergenz des Verfahren kann zusammen gefaßt werden, daß

$$T(i) = \frac{\Gamma}{\ln(i)} \quad (69)$$

mit Γ als eine vom Problem abhängige Konstante, wobei $\Gamma \geq d$ gelten muß. Dabei ist d ebenfalls eine vom Optimierungsproblem abhängige Größe. Es wurde vorgeschlagen, die Größe d als maximale Tiefe von allen lokalen Minima einzusetzen. Die Tiefe eines lokalen Minimums entspricht der Differenz zwischen dem Funktionswert des lokalen Minimums und seiner kleinsten „Paßhöhe“, mit der in ein nächst gelegenes Minimum gelangt werden kann. Bei Problemen aus der Praxis ist die Größe d jedoch unbekannt.

Abgesehen von der Schwierigkeit, die Größe Γ zu bestimmen, ist der asymptotische Konvergenzbeweis ohnehin wenig hilfreich, da bei einer Implementierung des Verfahrens die unendliche Folge von Schritten durch eine endliche ersetzt werden muß.

Konvergenz für zeitlich begrenztes Simulated Annealing

Im Gegensatz zum asymptotischen Konvergenzbeweis existieren nur wenige Veröffentlichungen über das Verhalten des Verfahrens im Endlichen. NOLTE (1997, S. 16 - 18) untersucht das Färbungsproblem auch für das zeitbegrenzte Simulated Annealing. Seine quadratische Aufwandsabschätzung⁸ von $\mathcal{O}(n^{2+\varepsilon})$ Schritten mit n als Problemgröße und ε als sehr kleine positive Zahl ist nur für einige kombinatorische Probleme gültig. Für den allgemeinen Fall sieht er keine Hoffnung für den Beweis, daß die optimale Lösung mit weniger als exponentiellem Aufwand garantiert gefunden werden kann. Ein Aufwand in exponentieller Größe jedoch kann höher sein als die Enumeration des Problems.

Festzuhalten bleibt, daß Simulated Annealing oft gute Ergebnisse bei Problemen in praktischen Anwendungen liefert. Eine Garantie zur Auffindung des globalen Optimums in endlicher Zeit kann jedoch nicht gegeben werden.

4.10 Verfahren, die mehrere Funktionswerte speichern

Im letzten Abschnitt wurden die Markov-Verfahren behandelt, die nur jeweils einen Punkt im Speicher behalten. Ist die Anzahl gespeicherter Punkte größer eins ($H > 1$), so ergeben sich viele Möglichkeiten für die Konstruktion von Optimierungsverfahren. Mittels einer Liste von vorangegangenen Auswertungen der Zielfunktion besteht die Möglichkeit, die Zielfunktion zu modellieren. Es ist leicht einzusehen, daß, mit Zuhilfenahme dieser Informationen über die Zielfunktion, effizientere Optimierungsverfahren aufgebaut werden können. Einige dieser Verfahren sollen kurz beschrieben werden, um sie anschließend am konkreten Problem anzuwenden.

4.11 Generationelle Verfahren

Werden mehrere Punkte gleichzeitig konstruiert und erst anschließend bewertet, spricht man von einem generationellen Verfahren. Die konstruierten Punkte durchlaufen gemeinsam die Zyklen der Konstruktion, Bewertung und Ersetzung, weshalb sie in Generationen mit der Generationsgröße H zusammengefaßt werden. Die daraus resultierenden Verfahren und Untervarianten zur globalen Optimierung sind sehr vielschichtig. An dieser Stelle sollen nur die wichtigsten Strategiebausteine vorgestellt werden.

Die Strategien der generationellen Verfahren sind aus den Prinzipien des natürlichen Prozesses der Evolution abgeleitet. Deshalb können die generationellen, bzw. genetischen oder evolutionären Verfahren am treffendsten mit Hilfe von Fachausdrücken aus der Biologie beschrieben werden.

Die Konstruktion von Punkten, die hier als Individuen bezeichnet werden, erfolgt mit Hilfe von Paarung und Mutation (Abb. 19). Während die Paarung neue Individuen erschafft, indem zwei Eltern (Individuen der alten Generation) rekombiniert werden, erfolgt die Mutation wahllos in Form von zufälligen Abänderungen der frisch erzeugten Kindergeneration.

⁸ Der rechentechnische Aufwand wird in der Form von $\mathcal{O}(n)$ angegeben, wobei n die Problemgröße darstellt.

Die Konstruktions- und Ersetzungsoperatoren arbeiten im Gegensatz zu den Markov-Verfahren nicht direkt auf der Ebene der Unbekannten selbst, sondern auf einer Ebene der sogenannten Genotypen. Die Genotypen sind lediglich eine andere Darstellungsart der Unbekannten, zumeist in Form von Bitfolgen. Der Wechsel der Darstellungsart erfolgt mit einem Interpretationsoperator. Dieser wird benötigt, um die Unbekannten in Form von Genotypen zwecks Bewertung in die ursprüngliche Form zurückzuwandeln. Den ursprünglichen Zustand der Unbekannten nennt man Phänotyp. Nur der Phänotyp kann in die Zielfunktion eingesetzt und bewertet werden.

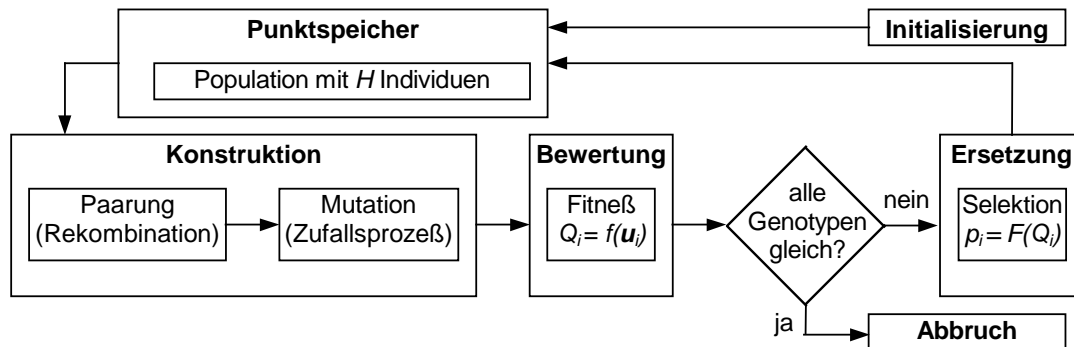


Abb. 19: Aufbau eines generativen Optimierungsverfahrens

Initialisierung

Die Initialisierung erfolgt zufällig im Raum der Genotypen. Es werden H Individuen erzeugt, die zunächst keine Korrelationen aufweisen. Sie bilden die Population der ersten Generation.

Paarung

Der erste Teil des Konstruktionsoperators ist die Paarung. Aus der Population einer Generation i werden zwei beliebige Individuen herausgenommen. Mit Hilfe der Rekombination werden neue Individuen für die nächste Generation erzeugt. Eine Strategie der Rekombination besteht darin, die Bitfolgen der Datenstrings beider Eltern an zufälligen Stellen aufzubrechen und auszutauschen, ähnlich der Aufspaltung einer DNA. Diese Technik, als Crossing-over bezeichnet, ermöglicht die Erzeugung von vielen verschiedenen Nachkommen mit den Eigenschaften beider Eltern. Nicht immer müssen zwei Eltern zwei Nachkommen erzeugen. Beispielsweise werden proportional zur Fitneß einige Individuen häufiger zur Paarung ausgewählt. Eine mögliche Strategie besteht darin, die Eltern nach der Paarung sterben zu lassen. Eine andere Variante bezieht die Elterngeneration in die nächste Generation mit ein. Die Vielfalt möglicher Strategien wird in SCHWEFEL (1989, S. 154 - 158) beschrieben und mit Zuhilfenahme einer speziellen Nomenklatur geordnet.

Mutation

Nur mit Hilfe der Paarung allein würde das Optimierungsverfahren vorzeitig konvergieren, ohne das Optimum zu erreichen, weil innerhalb einer Population nur ein begrenztes Potential an möglichen Kombinationen existiert. Erst ein Einfluß von außen kann die frühzeitige Stagnation verhindern. Ein solcher Einfluß ist die Mutation, nämlich die zufällige Veränderung eines Individuums mittels Inversion von einzelnen Datenbits. Entsprechend der biologischen Mutation ist eine solche Veränderung meistens mit einer Abnahme der Qualität verbunden. Eine schadhafte Veränderung wird das mutierte Individuum sehr wahrscheinlich absterben lassen, so daß künftige Generationen keinen Schaden nehmen. In den seltenen Fällen positiver Veränderungen wird ein Anstieg der Qualität erfolgen, der sich dann auf die gesamte Population ausbreitet. Die Mutationsrate ist ein Steuerparameter, der über den Erfolg oder Mißerfolg des Optimierungsverfahrens entscheidet. RECHENBERG (1989, S. 57) zeigt, daß sich zwischen zu kleinen und zu großen Mutationsschritten ein schmales „Evolutionfenster“ befindet, in dem die Evolution stattfinden kann (Abb. 20).

Selektion

Den Ersetzungsoperator bezeichnet man bei den generationellen Verfahren als Selektion. Dieser Operator entscheidet darüber, welche Nachkommen in die Population aufgenommen werden und welche vorzeitig absterben. Dem Ersetzungsoperator von Simulated Annealing ähnlich, muß die Überlebenswahrscheinlichkeit eine Funktion der Qualität sein, damit auf lange Sicht eine Besserung gewährleistet ist. Allerdings dürfen nicht nur die besten Individuen übernommen werden, sonst geht die genetische Variabilität in der Population verloren und das Verfahren konvergiert vorzeitig in einem lokalen Minimum.

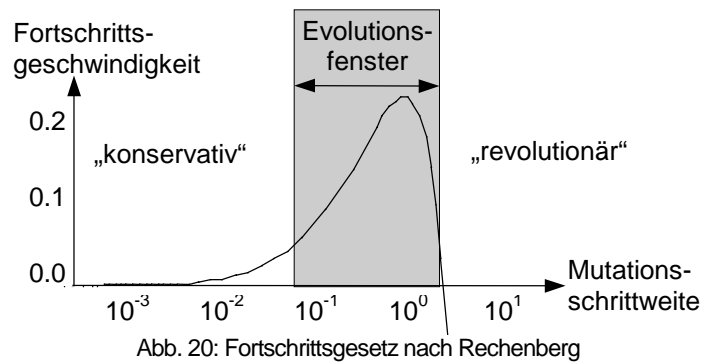


Abb. 20: Fortschrittsgesetz nach Rechenberg

Konvergenz und Abbruchbedingung

Die Konvergenz ist erreicht, wenn kein Unterschied mehr im Genotyp der Individuen einer Population besteht. Zwei Ursachen sind hierfür zu nennen: entweder wurde das globale Minimum des Optimierungsproblems erreicht oder ein Genotyp hat sich vorzeitig über die gesamte Population ausgebreitet. Nur mit Hilfe eines Neustarts läßt sich empirisch prüfen, ob die globale Lösung gefunden wurde. Eventuell kann ein Neustart auch mit veränderten Steuerparametern erfolgen. Eine Untersuchung der Steuerparameter führte HESSER (1992) durch.

Im Gegensatz zum natürlichen Evolutionsprozeß, der keine Abbruchbedingung kennt, muß bei der Implementierung eines generativen Verfahrens ein Abbruch erfolgen. In der Regel wird ein generativer Algorithmus abgebrochen, wenn nach einer bestimmten Rechenzeit keine Konvergenz eingetreten ist. Aus der aktuellen Population wird das Individuum mit der besten Qualität als Lösung ausgegeben.

Die generativen Optimierungsverfahren sind in der Lage, komplizierte globale Optimierungsprobleme zu lösen. Ein flexibler Einsatz für eine große Klasse von Problemen ist möglich. Der Erfolg ist stark abhängig von der Anpassung an das aktuelle Problem. Eine ausführliche Beschreibung der generativen Verfahren ist bei SCHWEHM (1996, S. 37 - 63) zu finden.

4.12 Bestrafungsverfahren

Mit Hilfe eines Bestrafungsverfahrens soll verhindert werden, daß ein einmal gefundenes lokales Minimum nicht noch einmal aufgesucht wird. Mit Hilfe einer Straffunktion werden die Funktionswerte in der näheren Umgebung des lokalen Minimums künstlich erhöht, bis das lokale Minimum verschwindet.

Das Verfahren besteht aus zwei Phasen. Zuerst wird mit Hilfe eines Gradientenverfahrens ein lokales Optimum $\bar{\mathbf{u}}$ ermittelt. Anschließend wird für die eindimensionale Optimierung die Straffunktion

$$F(\mathbf{u}, \alpha) = \frac{f(\mathbf{u}) - f(\bar{\mathbf{u}})}{\left[(\mathbf{u} - \bar{\mathbf{u}})^2 \right]^\alpha} \quad (70)$$

gebildet. Der Nenner bestraft Punkte in der Nähe des lokalen Optimums durch Erhöhung der Funktionswerte. Dabei ist α ein zu bestimmender Parameter, mit dem die Ausdehnung des Strafgebietes festgelegt wird. Der Parameter α muß das gesamte Minimum umfassen und wird solange optimiert, bis der Rand des lokalen Minimums erreicht ist. Punkte, dessen Funktionswerte kleiner sind als das bisherige Optimum, müssen zu dem Attraktionsgebiet eines tiefer gelegenen Minimums gehören und werden aufgrund des Nenners in (70) nicht mehr bestraft.

TÖRN und ŽILINSKAS (1988, S. 61) geben auch die multidimensionale Variante des Verfahrens an. Probleme entstehen vor allem durch mögliche numerische Instabilitäten, hervorgerufen durch Straffunktionen, die ein Abflachen der Zielfunktion verursachen.

4.13 Neuronale Netze

Neuronale Netze können zur globalen Optimierung eingesetzt werden. Ebenso wie Simulated Annealing und generative Verfahren sind sie durch das Vorbild der Natur motiviert. Mit Hilfe eines neuronalen Netzes wird ein Modell der Zielfunktion erstellt. Ein solches Netz besteht aus Knoten, die über verschiedene Gewichte miteinander verbunden sind. Anfangs sind die Gewichte zufällig gewählt. Damit das Netz eine Zielfunktion repräsentiert, müssen die Gewichte trainiert werden. Wenn das Netz eine Funktion nachbilden soll, wird das Trainieren durch Eingabe vieler Punkte und deren Funktionswerte vollzogen. Da in dieser Arbeit nicht auf Neuronale Netze eingegangen wird, sei auf die Literatur (BRAUN 1997) verwiesen.

5 Spektralanalyse mit beliebigen Frequenzen als Modellunbekannte

In diesem Kapitel wird ein neues funktionales Modell zur Beschreibung von Periodizitäten in Zeitreihen vorgestellt. Im Gegensatz zur Fourierreihe werden in diesem Modell nicht nur die Amplituden, sondern auch die Frequenzen als Modellunbekannte eingeführt. Zur Berechnung der Modellparameter wird ein effizientes probabilistisches Rechenverfahren entwickelt.

5.1 Funktionales Modell und Problemstellung

„The search for periodicities is one of the most useful and yet most tricky tasks in the analysis of data that arise from observations taken regularly in time. Typical of these data are stock prices, gross national product, population figures, sun-spots, rainfall, tide levels, egg production, and electronic impulses. If one found a periodicity in stock price, he could buy at the low, sell at the high, and become a philanthropist.“

Frederick Mosteller, 1973

Werden von einem Sensor zu verschiedenen Zeitpunkten t_i die Meßwerte y_i beobachtet, so spricht man von einer Zeitreihe. Nach einer Messung liegen im einfachsten Fall die Beobachtungspaare

Zeitpunkt	Meßwert
t_1	y_1
t_2	y_2
...	...
t_n	y_n

vor. Nun soll ein physikalischer Zusammenhang mit Hilfe eines funktionalen Modells beschrieben werden. Gegenstand der folgenden Untersuchungen ist das in der Geodäsie, sowie in vielen anderen Disziplinen häufig anzutreffende Modell

$$f(\mathbf{t}) = \sum_{k=1}^M a_k \sin(2\pi f_k \mathbf{t} + \varphi_k) \quad (71)$$

mit Amplituden a_k ,
 Frequenzen f_k ,
 Phasenlagen φ_k ,
 und Anzahl Schwingungen M .

Verschiedene harmonische Schwingungen werden überlagert. Es wird von einem vollständigen Modell ausgegangen, so daß der Residuenvektor \mathbf{v} zufällige Fehler repräsentiert. Es gelte

$$v_i = f(t_i) - y_i. \quad (72)$$

Das Ziel besteht darin, die unbekanntes Modellparameter derart zu bestimmen, daß die Residuen minimal im Sinne der L_2 -Norm (10) werden. Folglich ergibt sich die Minimierungsaufgabe

$$\sum_{i=1}^n (f(t_i) - y_i)^2 = \min \quad (73)$$

mit Meßwerten y_i ,
 Zeitpunkten t_i ,
 Anzahl der Beobachtungen n ,
 und funktionales Modell (71) f .

Aus Gründen der Übersichtlichkeit wird die Abkürzung

$$x_i = 2\pi t_i \quad (74)$$

eingeführt. Anbei sei bemerkt, daß x_i keine Unbekannten, sondern durch die Meßanordnung vorgegebene Größen sind und daher als bekannt betrachtet werden.

Aus (71), (73) und (74) ergibt sich die nichtlineare Zielfunktion

$$Z = \sum_{i=1}^n \left(\sum_{k=1}^M a_k \sin(f_k x_i + \varphi_k) - y_i \right)^2 = \min. \quad (75)$$

mit $m = 3M$ Unbekannten, nämlich a_k , f_k und φ_k . Im Fall $n < 3M$ ist die Anzahl der Beobachtungen kleiner als die Anzahl der Unbekannten und dessen Bestimmung nicht eindeutig möglich. Physikalisch sinnvoll ist daher nur der Fall $n \geq 3M$. Die Zielfunktion besitzt dann eine eindeutige Lösung⁹, nämlich das globale Minimum der Funktion Z ¹⁰.

Die Lösung des Minimierungsproblems Gleichung (75) kann nicht ausschließlich mit Gradientenverfahren gelöst werden, denn die Zielfunktion besitzt eine Vielzahl lokaler Minima (Abb. 21). Außerdem sind in der Praxis keine oder nur grobe Näherungswerte im Voraus bekannt. Somit ist die unabdingbare Voraussetzung für die Lösung multimodaler Probleme mit Hilfe von Gradientenverfahren nicht gegeben.

Ein direkter Ansatz zur Lösung von (75) mit einem globalen heuristischen Optimierungsverfahren erweist sich als nicht praktikabel, da die Anzahl der Unbekannten mit dem Faktor $3M$ ansteigt. Ein Rechenbeispiel befindet sich in Abschnitt 6.1, Tabelle 12. Der Aufbau eines globalen Optimierungsverfahrens wird nach der in Abb. 15 erläuterten Vorgehensweise vollzogen.

5.2 Abspaltung exakt lösbarer Probleme

Zur Vereinfachung des Optimierungsproblems (75) wird zunächst eine einzelne harmonische Schwingung

$$y(x) = a \cdot \sin(fx + \varphi) \quad (76)$$

betrachtet. Aus dem Additionstheorem für die Sinusfunktion folgt

$$y(x) = a \cdot \sin(fx) \cos(\varphi) + a \cdot \cos(fx) \sin(\varphi). \quad (77)$$

Mit der Substitution

$$A = a \cdot \cos(\varphi) \quad \text{und} \quad B = a \cdot \sin(\varphi) \quad (78)$$

läßt sich die harmonische Schwingung eindeutig in die Form

$$y(x) = A \cdot \sin(fx) + B \cdot \cos(fx) \quad (79)$$

transformieren. Die Umkehrung der Transformation erfolgt über die Formeln

$$a = \sqrt{A^2 + B^2} \quad (80)$$

und

$$\varphi = \arctan \frac{A}{B}. \quad (81)$$

Der entscheidende Vorteil in der Schreibweise einer harmonischen Schwingung gemäß Gleichung (79) liegt darin, daß sowohl A als auch B linear abhängige Parameter sind. Nur noch die Frequenz f ist nicht linear abhängig. Im Falle mehrerer überlagerter Frequenzen läßt sich eine Beobachtungsgleichung in der Form

$$v_i = \sum_{k=1}^M A_k \sin(f_k x_i) + \sum_{k=1}^M B_k \cos(f_k x_i) - y_i \quad (82)$$

schreiben. Alle A_k und B_k sind linear abhängige Größen. **Unter der Annahme, daß die Frequenzen f_k bekannt sind**, können die übrigen Parameter A_k und B_k eindeutig durch den Gauß-Algorithmus (Kap. 2.4) berechnet werden. Die Beobachtungsgleichung (82) entspricht dann der allgemeinen linearen Beobachtungsgleichung (14) mit

$$u_j = \begin{cases} A_{(j+1)/2}, & \text{für ungerade } j \\ B_{j/2}, & \text{für gerade } j \end{cases} \quad \text{und} \quad f_j(x_i) = \begin{cases} \sin(f_{(j+1)/2} x_i), & \text{für ungerade } j \\ \cos(f_{j/2} x_i), & \text{für gerade } j. \end{cases} \quad (83)$$

⁹ ausgenommen einiger Sonderfälle, wie z.B. konstante Meßwerte y_i

¹⁰ Die globale Lösung kann auch aus mehreren Elementen bestehen, siehe Abschnitt 2.3.

Es entsteht ein Normalgleichungssystem mit $2M$ Gleichungen der Form

$$(2j-1)\text{-te Normalgleichung: } \sum_{k=1}^M A_k S_{jk} + \sum_{k=1}^M B_k G_{jk} - a_j = 0 \quad (84)$$

$$2j\text{-te Normalgleichung: } \sum_{k=1}^M A_k G_{jk} + \sum_{k=1}^M B_k C_{jk} - b_j = 0 \quad (85)$$

mit

$$S_{jk} = \sum_{i=1}^n \sin(f_j x_i) \sin(f_k x_i) \quad C_{jk} = \sum_{i=1}^n \cos(f_j x_i) \cos(f_k x_i) \quad G_{jk} = \sum_{i=1}^n \sin(f_j x_i) \cos(f_k x_i) \quad (86)$$

$$a_j = \sum_{i=1}^n \sin(f_j x_i) y_i \quad b_j = \sum_{i=1}^n \cos(f_j x_i) y_i \quad (87)$$

und mit $j = 1, \dots, M$ sowie $k = 1, \dots, M$.

Unter der Voraussetzung, daß die Frequenzen bekannt sind, lassen sich die Summen (86) berechnen und das Normalgleichungssystem (84-85) kann mit

$$\begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \\ A_2 \\ B_2 \\ \dots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11} & G_{11} & S_{12} & G_{12} & \dots \\ G_{11} & C_{11} & G_{21} & C_{12} & \dots \\ S_{21} & G_{21} & S_{22} & G_{22} & \dots \\ G_{12} & C_{21} & G_{22} & C_{22} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \\ a_2 \\ b_2 \\ \dots \end{bmatrix} \quad (88)$$

gelöst werden. Damit können die Amplituden A_k und B_k bestimmt werden. Die Residuen (82) sowie die Summe der Residuenquadrate

$$Q = \sum_{i=1}^n \left(\sum_{k=1}^M A_k \sin(f_k x_i) + \sum_{k=1}^M B_k \cos(f_k x_i) - y_i \right)^2 = \min. \quad (89)$$

lassen sich berechnen. Um zu verdeutlichen, daß Q eine Zielfunktion darstellt, die lediglich von den Frequenzen abhängig ist, wird die Schreibweise

$$Q = F(f_1, f_2, \dots, f_M) = \min. \quad (90)$$

eingeführt. Die Funktion F wird durch die Formeln (84-89) repräsentiert. In Abbildung 21 ist ein Teil der Zielfunktion für $M=2$ dargestellt. Die Graphik basiert auf künstlich erzeugten Zeitreihen mit den harmonischen Schwingungen der Frequenzen 15 und 22. Entsprechend befindet sich das globale Minimum mit $Q=0$ an der Stelle $f_1 = 15$ und $f_2 = 22$. Die Abbildung zeigt die vielen lokalen Minima, welche schon in diesem einfachen Beispiel auftreten.

Die Funktionswertkosten (vergl. Kapitel 4.1) von Q Gleichung (90) sind wesentlich höher als die von Z Gleichung (75), die Anzahl der Parameter dafür um den Faktor 3 niedriger, siehe Tabelle 7.

Kriterien der Funktionen Q und Z	Z	Q
Anzahl unbekannter Parameter	$3M$	M
Anzahl der Berechnungen von Sinus und Kosinus	nM	$2nM$
Anzahl der Rechenoperationen in Summen	nM	$2n(2M^2 + M)$
Anzahl der Rechenoperationen zur Invertierung ¹¹ der N -Matrix	--	$(2M)^3$

Tabelle 7: Funktionswertkosten von Z und Q mit M =Anzahl der Frequenzen im Modell und n =Anzahl der Beobachtungen.

¹¹ Auf die Invertierung der **N**-Matrix kann bei Lösung von $\mathbf{Nu} = \mathbf{b}$ verzichtet werden. Statt der Einheitsmatrix wird nur die Spalte **b** im Gauß-Algorithmus mitgeführt. Der Verzicht auf die Invertierung spart ca. 50% Rechenzeit.

Physikalisch interpretierbare Modellfunktionen aus Zeitreihen werden nur aus relativ wenigen überlagerten Schwingungen bestehen, so daß in der Regel $M \ll n$ gilt. Außerdem sind, aufgrund der hohen Datenrate moderner Sensoren, die Zeitreihen recht groß, wodurch $M \ll n$ verstärkt wird. Daraus folgt, daß die Invertierung der Matrix weniger Rechenaufwand bedeutet als die Summenbildung bei Aufstellung der Normalgleichungen.

Der Funktion Q kommt eine zentrale Bedeutung zu. Sie wird mit Hilfe der globalen Optimierung minimiert. Für Q gilt $m = M$, d.h. die Anzahl der Unbekannten ist gleich der Anzahl der Frequenzen im Modell.

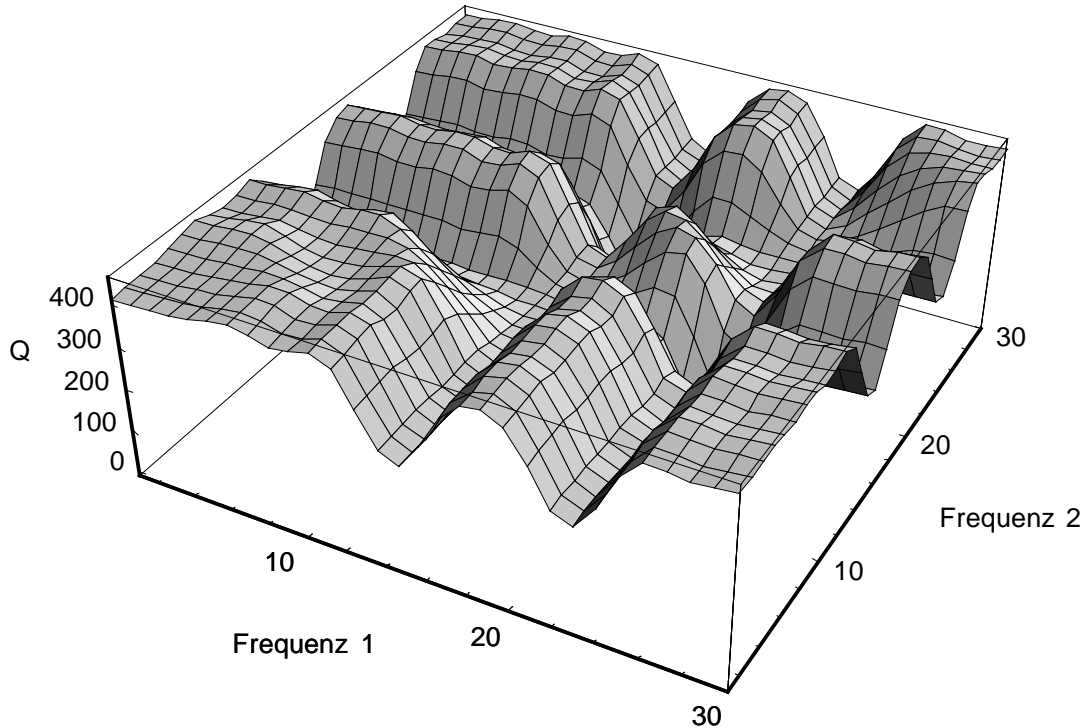


Abb. 21: Zielfunktion Q mit zwei Frequenzen im Modell

5.3 Einbringung verfügbarer Vorinformationen

Wenn bei einer konkreten Zeitreihe Vorinformationen über die Unbekannten eingebracht werden, kann die Effizienz des Verfahrens erheblich gesteigert werden. Beispielsweise könnte bekannt sein, daß sich ein periodischer Einfluß innerhalb eines bestimmten Frequenzbereiches befindet.

Allgemein läßt sich der Definitionsbereich der unbekannt Frequenzen einschränken. Aus Gründen der Übersichtlichkeit wird die Zeitreihe zunächst mit

$$\bar{t}_i = \frac{t_i - t_1}{t_n - t_1} \quad \text{mit} \quad \begin{array}{l} t_1 \text{ erster Beobachtungszeitpunkt} \\ t_n \text{ letzter Beobachtungszeitpunkt} \end{array} \quad (91)$$

in das Intervall $[0; 2\pi]$ transformiert und im Hinblick auf spätere Berechnungen in die Form

$$x_i = 2\pi \left(\bar{t}_i \frac{n-1}{n} + \frac{1}{n} \right) \quad (92)$$

gebracht. Es entsteht (im Falle äquidistanter Beobachtungen) die Folge

$$x_i = 2\pi \frac{i}{n} \quad \text{mit} \quad i = 1, \dots, n. \quad (93)$$

Diese Schreibweise ist vorteilhaft, da die Frequenz f mit der Anzahl der Perioden im Intervall $[0; 2\pi]$ übereinstimmt und die Aliases¹² von f in der Form $f + n z$ mit $z \in \mathbb{Z}$ geschrieben werden und es gilt

¹² Erläuterung zum Problem des Aliasing im Anhang

$$\sin(fx_i) = \sin\left(2\pi f \frac{i}{n}\right) = \sin\left(2\pi(f + nz)\frac{i}{n}\right) = \sin\left(2\pi f \frac{i}{n} + 2\pi zi\right) = \sin(fx_i). \quad (94)$$

Folglich liegt die Nyquist-Frequenz¹³ bei $f = n/2$, denn es ist

$$\sin(fx_i) = -\sin\left(fx_i + \frac{n}{2}\right). \quad (95)$$

Alle Frequenzen außerhalb des Intervalls $[0, \dots, n/2]$ können als redundant betrachtet werden. Der relevante Definitionsbereich aller unbekannt Frequenzen liegt für die Optimierungsaufgabe Q daher zwischen 0 und $n/2$. Beispielsweise ist der Suchraum für Frequenzen einer Meßreihe mit 1000 Beobachtungspaaren auf das Intervall zwischen 0 und 500 beschränkt. Mit dieser Begrenzung der Unbekanntenintervalle wird die eindeutige Lösung des Minimierungsproblems Q ermöglicht.

5.4 Rechentechnische Vereinfachungen

Der nächste Schritt zum Aufbau eines effektiven globalen Optimierungsverfahrens (vgl. Abb. 15) besteht in der Senkung der Funktionswertkosten. Einerseits werden Formelvereinfachungen angebracht und andererseits redundante Berechnungen vermieden. Die Vereinfachungen beeinflussen das Ergebnis nicht.

Die Kosten der Zielfunktion Gleichung (90) lassen sich ebenfalls senken. Das Gros der Funktionswertkosten entsteht bei der Aufstellung der Normalgleichungen (84)-(85). Zur Aufstellung der Normalgleichungsmatrix \mathbf{N} sind $2nm$ Winkelfunktionsberechnungen sowie je $4nm^2$ Additionen und Multiplikationen notwendig. Nach Berücksichtigung der Symmetrie von \mathbf{N} bleiben noch $2nm^2 + nm$ Additionen und Multiplikationen.

Sonderfall Frequenzen im ganzzahligen Verhältnis

Verwendet man die Fourierfrequenzen, also ganzzahlige Teiler der Datenlänge n der Form

$$f_j = \frac{n}{k} j \text{ mit } k \left[1; \frac{n}{2}\right] \in \mathbb{N} \text{ und } j [1, 2, \dots, k] \in \mathbb{N} \quad (96)$$

so sind diese in die Zielfunktion (90) einzusetzen und der Funktionswert $Q = F(f_1, f_2, f_3, \dots, k)$ zu berechnen. Die Normalgleichungsmatrix vereinfacht sich aufgrund der Orthogonalitätseigenschaften von Sinus und Kosinus¹⁴ und es gilt

$$G_{jk} = 0 \quad S_{jk} = C_{jk} = \begin{cases} \frac{n}{2} & \text{für } j=k \\ 0 & \text{für } j \neq k. \end{cases} \quad (97)$$

Folglich besitzt \mathbf{N} die triviale Form der Diagonalmatrix $\text{diag}(n/2, n/2, n/2, \dots)$. Lediglich die a_j und b_j aus (87) müssen durch Summenbildung berechnet werden. Die Formeln für die Koeffizienten des linearen Gleichungssystems (88) entsprechen dann denen der bekannten Fourierkoeffizienten

$$A_j = \frac{n}{2} \sum_{i=1}^n \sin(f_j x_i) y_i \quad B_j = \frac{n}{2} \sum_{i=1}^n \cos(f_j x_i) y_i \quad \text{mit } j = 1, \dots, \frac{n}{2}. \quad (98)$$

Werden $n/2$ Fourierkoeffizienten berechnet, spricht man von Fouriertransformation. Es liegen keine Überbestimmungen vor und es folgt $Q = 0 = \min$.

Aus der Vielzahl von Möglichkeiten bei der Einführung bestimmter Frequenzen ist die Entscheidung, Fourierfrequenzen zu verwenden, willkürlich getroffen. Frequenzen aus (96) sind ganzzahlige Teiler des Beobachtungszeitraumes. Es existiert keine physikalische Begründung dafür, die Festlegung der Frequenzen mit der Länge des Beobachtungsintervalls in Abhängigkeit zu bringen. Der Beobachtungszeitraum beginnt mit der Registrierung des ersten Beobachtungspaars und endet mit der letzten Datenregistrierung. Durch das Ein- und Ausschalten eines

¹³ Die aus einer Zeitreihe größte noch korrekt identifizierbare Frequenz wird als Nyquist-Frequenz bezeichnet.

¹⁴ Orthogonalitätseigenschaften von Sinus und Kosinus im Anhang

Sensoren werden diese Zeitpunkte festgelegt, zweifellos ein Vorgang, der nichts mit den physikalischen Periodizitäten der Meßdaten zu tun haben muß.

Ziel dieser Arbeit ist das Auffinden von Schwingungen, denen direkt physikalische Ursachen zugeordnet werden können. In einer Zeitreihe sind beispielsweise die drei amplitudenstärksten Frequenzen von Interesse, wenn vermutet wird, daß drei mechanische Anregungen existieren. Für diesen Zweck muß der Definitionsbereich für die gesuchten Frequenzen aus beliebigen Werten innerhalb von \mathbb{R} bestehen. Die Fourierfrequenzen können lediglich der Beschaffung von Näherungswerten dienlich sein.

Sonderfall gleichabständige Beobachtungen

Häufig ist die Aufzeichnungsrate von Sensoren über den gesamten Beobachtungszeitraum konstant. Die Zeitabstände Δt bzw. Δx zwischen zwei Beobachtungen unterliegen keiner Veränderung. Für beliebige Frequenzen f gilt dann

$$\sum_{i=1}^n \sin\left(2\pi \frac{i}{n} f\right) = \begin{cases} 0 & \text{für } f = 0, \pm n, \pm 2n, \dots \\ \sin\left(\pi f + \frac{\pi f}{n}\right) \frac{\sin(\pi f)}{\sin\left(\frac{\pi f}{n}\right)} & \text{sonst} \end{cases} \quad (99)$$

Mit Einschränkung des Definitionsbereiches für f auf dessen Hauptalias $]0, \dots, n/2]$ vereinfacht sich (99) zu

$$\sum_{i=1}^n \sin\left(2\pi \frac{i}{n} f\right) = S(f) \quad \text{mit} \quad S(f) = \sin\left(\pi f + \frac{\pi f}{n}\right) \frac{\sin(\pi f)}{\sin\left(\frac{\pi f}{n}\right)}, \quad (100)$$

wobei bei der Implementierung von (100) auf die Rechenunschärfe für $f \rightarrow 0$ zu achten ist. Entsprechend gilt

$$\sum_{i=1}^n \cos\left(2\pi \frac{i}{n} f\right) = C(f) \quad \text{mit} \quad C(f) = \cos\left(\pi f + \frac{\pi f}{n}\right) \frac{\sin(\pi f)}{\sin\left(\frac{\pi f}{n}\right)}. \quad (101)$$

Bei der Aufstellung der Normalgleichungsmatrix sind Produktsummen aus Winkelfunktionen zu berechnen. Mit Hilfe der Additionstheoreme in Tabelle 8 lassen sich auch die Produkte zerlegen.

Additionstheorem allgemein	Elemente der Normalgleichungsmatrix
$\sin^2 a = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos(2a)$	$S_{jj} = \sum_{i=1}^n \sin^2(f_j x_i) = \frac{n}{2} - \frac{1}{2} C(2f_j)$
$\cos^2 a = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos(2a)$	$C_{jj} = \sum_{i=1}^n \cos^2(f_j x_i) = \frac{n}{2} + \frac{1}{2} C(2f_j)$
$\sin(a) \cos(a) = \frac{1}{2} \sin(2a)$	$G_{jj} = \sum_{i=1}^n \cos(f_j x_i) \sin(f_j x_i) = \frac{1}{2} S(2f_j)$
$\sin(a) \sin(b) = \frac{1}{2} \cos(a-b) - \frac{1}{2} \cos(a+b)$	$S_{jk} = \sum_{i=1}^n \sin(f_j x_i) \sin(f_k x_i) = \frac{1}{2} C(f_j - f_k) - \frac{1}{2} C(f_j + f_k)$
$\cos(a) \cos(b) = \frac{1}{2} \cos(a-b) + \frac{1}{2} \cos(a+b)$	$C_{jk} = \sum_{i=1}^n \cos(f_j x_i) \cos(f_k x_i) = \frac{1}{2} C(f_j - f_k) + \frac{1}{2} C(f_j + f_k)$
$\sin(a) \cos(b) = \frac{1}{2} \sin(a-b) + \frac{1}{2} \sin(a+b)$	$G_{jk} = \sum_{i=1}^n \sin(f_j x_i) \cos(f_k x_i) = \frac{1}{2} S(f_j - f_k) + \frac{1}{2} S(f_j + f_k)$

Tabelle 8: Aufstellung der Normalgleichungen ohne Summenbildung

Anschließend entfallen unter Berücksichtigung von (100) und (101) die Summen über alle Beobachtungen. Mit der Abkürzung

$$x_i = 2\pi \frac{i}{n} \quad (102)$$

ergeben sich die Elemente der Normalgleichungsmatrix (86) für den Sonderfall gleichabständiger Beobachtungen entsprechend der Tabelle 8. Für die Aufstellung von N entfällt jegliche Summenbildung. Die Anzahl der Operationen in Summen reduziert sich von $2n(2m^2+m)$ auf $2nm$. Damit wird der Rechenaufwand etwa um den Faktor m verringert.

Sonderfall eine Frequenz

Besteht das Modell aus nur einer einzigen unbekanntem Frequenz, so gilt $M=m=1$. Dieser Spezialfall ist für die Beschaffung von Näherungswerten interessant. Das Normalgleichungssystem (88) vereinfacht sich zu

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S & G \\ G & C \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}. \quad (103)$$

Dessen Lösung

$$A = \frac{Ca - Gb}{SC - G^2} \quad B = \frac{Sb - Ga}{SC - G^2} \quad (104)$$

kann, ausgehend von der Zielfunktion (89), direkt in den Spezialfall für eine Frequenz,

$$Q(f) = \sum_{i=1}^n (A \sin(fx_i) + B \cos(fx_i) - y_i)^2 = \min. \quad (105)$$

eingesetzt werden, so daß man die Zielfunktion Q in Abhängigkeit einer unbekanntem Frequenz

$$Q(f) = \sum_{i=1}^n \left(\frac{(Ca - Gb) \sin(fx_i) + (Sb - Ga) \cos(fx_i)}{SC - G^2} - y_i \right)^2 = \min. \quad (106)$$

erhält. Dabei gilt

$$S = \sum_{i=1}^n \sin^2(fx_i) \quad C = \sum_{i=1}^n \cos^2(fx_i) \quad G = \sum_{i=1}^n \sin(fx_i) \cos(fx_i) \quad a = \sum_{i=1}^n \sin(fx_i) y_i \quad b = \sum_{i=1}^n \cos(fx_i) y_i. \quad (107)$$

Die stationären Punkte könnten theoretisch mittels Nullsetzen der ersten Ableitung von Q ermittelt werden. Jedoch kann die Ableitung nicht ohne weiteres nach f aufgelöst werden. Der Einsatz heuristischer Verfahren bleibt auch für das Modell mit einer Frequenz gerechtfertigt.

5.5 Grundsätzlicher Aufbau der heuristischen Frequenzanalyse

Initialisierung

Der Unbekanntenvektor $\mathbf{u}_1 = (f_1, f_2, f_3, \dots, f_m)^T$ wird mit gleichverteilten Zufallszahlen im Intervall $]0; n/2]$ initialisiert und die Summe der Residuenquadrate $Q(\mathbf{u}_1)$ der Anfangskonfiguration \mathbf{u}_1 wird berechnet.

Iterationsvorgang

Mit Hilfe der in den Abschnitten (4.5 - 4.9) beschriebenen Verfahren werden neue Unbekanntenvektoren \mathbf{u}_j konstruiert und nach der jeweiligen Strategie des verwendeten Verfahrens ersetzt. Die Bewertung erfolgt allgemein mit (86)-(90) oder in Spezialfällen mit Tabelle 8 oder Gleichung (106).

Abbruchkriterium

Die Anzahl der Schritte wird im voraus festgelegt. Damit wird eine Lösung innerhalb einer bestimmten Rechenzeit garantiert. Die notwendige Anzahl der Rechenschritte ist proportional zum Quadrat der Anzahl von Unbekannten. Es gilt

$$\text{Schrittzahl} \sim c m^2 \quad (108)$$

wobei c die Breite des Frequenzspektrums und m die Anzahl der Frequenzen im Modell ist.¹⁵

Strategien bei Konstruktion des Unbekanntenvektors

Grundsätzlich bietet sich die Möglichkeit, alle Frequenzen f_1, \dots, f_m in jedem Iterationsschritt neu zu konstruieren. Dieser Fall ist für $m > 5$ jedoch nicht optimal. Besteht das Modell aus mehr als ca. 5 Frequenzen¹⁶ und werden in jedem Schritt alle Frequenzen neu konstruiert, so ist die Trefferwahrscheinlichkeit für das globale Minimum gering.

Andererseits hat die Konstruktion von nur einer einzigen Frequenz je Iterationsschritt ebenfalls ungünstige Auswirkungen auf die Minimumsuche. Auf dem Weg von einem beliebigen Unbekanntenvektor zum globalen Minimum müssen mehrere Frequenzen gleichzeitig verändert werden, um lokale Maxima der Zielfunktion zu überwinden.

Numerische Untersuchungen haben ergeben, daß die Erfolgsrate¹⁷ gesteigert werden kann, indem unterschiedlich viele Frequenzen verändert werden. Erfolgversprechend erweist sich die Konstruktion von m^* Frequenzen je Iterationsschritt, wobei m^* eine ganzzahlige Zufallszahl im Bereich $[1; m]$ ist.

Die Frequenzen sind unterschiedlich stark miteinander korreliert. Es bietet sich daher die Möglichkeit, erst eine kleine Gruppe $\mathbf{g} = \{f_1, f_2, \dots, f_{m^*}\}$ zu suchen. Nach Beendigung der Suche wird die Gruppe mit der Formel

$$y_i^* = y_i - v_i = y_i - \sum_{k=1}^{m^*} (A_k \sin(f_k x_i) + B_k \cos(f_k x_i)) \quad (109)$$

von den Meßdaten abgezogen. Man erhält den um m^* Frequenzen reduzierten Beobachtungsvektor \mathbf{y}^* . Anschließend wird in der Datenreihe \mathbf{y}^* nach weiteren Frequenzen gesucht. Dieser Vorgang wird solange wiederholt, bis die Amplituden eine bestimmte Schranke unterschreiten. Mit dieser Methode können sehr schnell brauchbare Lösungen gefunden werden, selbst wenn die Anzahl der Frequenzen im Modell hoch ist.

5.6 Erweiterung des funktionalen Modells durch Polynome

Selten lassen sich Zeitreihen nur durch harmonische Schwingungen darstellen. Physikalisch bedingt treten nicht harmonische Effekte wie beispielsweise Bias und Trend auf. Das funktionale Modell (89) wird daher um ein allgemeines Polynom erweitert. Aus (82) ergibt sich für die Momente erster Ordnung (Erwartungswert E , Kofaktoren V und C) der Beobachtungsgleichungen die Form

$$E\{y_i\} = a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 + \dots + A_1 \sin(f_1 x_i) + B_1 \cos(f_1 x_i) + A_2 \sin(f_2 x_i) + \dots \quad (110i)$$

$$V\{y_i\} = p_{ii} \sigma^2, C\{y_i y_j\} = p_{ij} \sigma^2. \quad (110ii)$$

Die Koeffizienten a_k des Polynoms, ebenso die Koeffizienten A_k und B_k der harmonischen Schwingung sind fixe unbekannte Parameter, welche linear auftreten. Lediglich die fixen unbekanntenen Frequenzen treten nichtlinear auf.

Das heuristische Optimierungsverfahren wird durch die Erweiterung des Modells nicht beeinflusst. Mit Einbezug eines Polynoms wird die Anzahl der Unbekannten für die Heuristik nicht größer. Das lineare Gleichungssystem (88), daß bei jeder Auswertung der Zielfunktion zu lösen ist, wird mit den entsprechenden Gleichungen ergänzt. Ist p der Polynomgrad und M die Anzahl der Frequenzen im Modell, so ergeben sich $p + 2M$ Normalgleichungen. In der Praxis besteht das Polynom häufig nur aus den ersten zwei Gliedern, dem Bias a_0 und dem Trend a_1 . In den Abschnitten (5.1 - 5.5) wurde aus Gründen der Übersichtlichkeit auf den Einbezug von Polynomen verzichtet.

¹⁵ Gleichung (108) ist das Ergebnis umfangreicher numerischer Tests. Die Formel stellt lediglich einen Richtwert dar.

¹⁶ Der Wert 5 wurde empirisch ermittelt und ist ebenfalls ein aus Tests gewonnenes Ergebnis.

¹⁷ Anteil der neu konstruierten Punkte, die ein neues Optimum bilden

5.7 Kombination des heuristischen Verfahrens mit Gradientenmethoden

Gradientenmethoden benötigen zur Bestimmung eines Minimums weniger Rechenaufwand als heuristische Verfahren. Jedoch werden mit Hilfe der Gradientenverfahren lediglich lokale Minima gesucht (Kap. 3). Da das globale Minimum ein Element aus der Menge der lokalen Minima ist, wird der Einsatz der lokalen Optimierung hilfreich sein.

Es bieten sich mehrere Möglichkeiten zur Integration der lokalen Methoden in ein heuristisches Optimierungssystem:

a) Singlestart

Erst nach Beendigung des heuristischen Verfahrens wird das lokale Verfahren angehängt, mit der Hoffnung, daß das Ergebnis der Heuristik schon ein Element des Attraktionsgebietes des globalen Minimums ist.

b) Multistart

Nach jedem Schritt wird ein lokales Verfahren gestartet und dessen Ergebnis zur Grundlage der folgenden Schritte. Ein Iterationsschritt ist zwar rechenintensiv, jedoch sind insgesamt weniger Rechenschritte nötig, weil jeder zufällige Punkt innerhalb des Attraktionsgebietes des globalen Minimums zur globalen Lösung führt.

c) „Optistart“

Nur wenn durch die Heuristik ein neues Optimum gefunden wurde, wird ein lokales Verfahren gestartet. Diese Methode stellt ein Kompromiß aus dem wenig effektiven Singlestart und dem zeitaufwendigen Multistart dar.

In Abb. 22 ist das Attraktionsgebiet der Funktion Q dargestellt. In diesem einfachen Fall enthalten Meßdaten und Zielfunktion eine einzige harmonische Schwingung. Zu erkennen sind in der Abbildung auch die lokalen Minima neben dem Attraktionsgebiet der globalen Lösung.

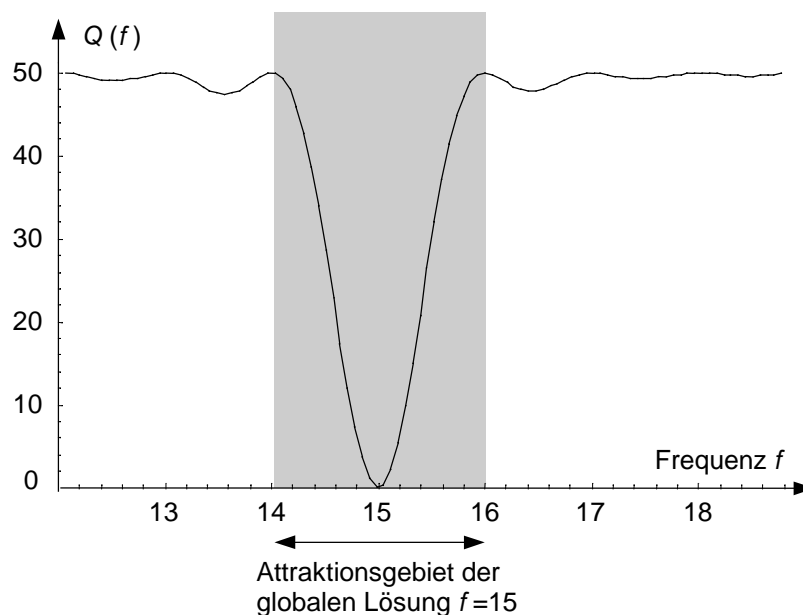


Abb. 22: Zielfunktion Q mit einer harmonischen Schwingung im Datenmaterial

In den Beispielen im Kapitel 6 wurden hauptsächlich das Gauß-Newton-Verfahren und Newton-Raphson-Verfahren eingesetzt. Die Zuverlässigkeit der Verfahren ist bei schlechten Näherungswerten mangelhaft, was sich aber kaum auf das heuristische Optimierungssystem auswirkt, da unbrauchbare Lösungen ohnehin sofort verworfen werden. Entscheidend ist, daß die Verfahren relativ wenig Rechenzeit in Anspruch nehmen, so daß auch ein Multistart effizient anwendbar wird.

Die nichtlinearen Beobachtungsgleichungen (82) werden durch Bildung der Ableitung

$$\frac{\partial v_i(\bar{f}_k)}{\partial f_k} = \frac{\partial A_k(\bar{f}_k)}{\partial f_k} \sin(\bar{f}_k x_i) + A_k x_i \cos(\bar{f}_k x_i) + \frac{\partial B_k(\bar{f}_k)}{\partial f_k} \cos(\bar{f}_k x_i) - B_k x_i \sin(\bar{f}_k x_i) \quad (111)$$

linearisiert. Mit großem Rechenaufwand verbunden ist die Berechnung der Ableitungen A_k und B_k nach f_k . Zur Vermeidung dieser Ableitungen werden außer den Frequenzen f_k auch A_k und B_k als Unbekannte in die Ausgleichung eingeführt. Die zur Bildung des linearen Normalgleichungssystems notwendigen Ableitungen ergeben sich dann zu

$$\begin{aligned} \frac{\partial v_i(\bar{f}_k)}{\partial \bar{f}_k} &= A_k x_i \cos(\bar{f}_k x_i) - B_k x_i \sin(\bar{f}_k x_i) \\ \frac{\partial v_i(\bar{f}_k)}{\partial A_k} &= \sin(\bar{f}_k x_i) \quad \frac{\partial v_i(\bar{f}_k)}{\partial B_k} = \cos(\bar{f}_k x_i). \end{aligned} \quad (112)$$

Die Normalgleichungen lassen sich direkt aufstellen, ohne das Rechenschema $\mathbf{N} = \mathbf{A}^T \mathbf{A}$ verwenden zu müssen. Dadurch werden unnötige Rechenoperationen vermieden. Prinzipiell läßt sich jedes lokale Verfahren verwenden. Recht effizient sind das Newton-Raphson-Verfahren Gleichung (23), das modifizierte Newton-Raphson-Verfahren Gleichung (25) oder das Gauß-Newton-Verfahren (30), auf das sich im folgenden bezogen wird.

Nach Berechnung der Unbekannten eines Gauß-Newton-Iterationsschrittes wird der Funktionswert der Zielfunktion (89) berechnet und mit der Qualität der Näherungswerte verglichen. Ist die Qualität der neuen Frequenzen besser, so kann der Gauß-Newton-Schritt als erfolgreich betrachtet werden. Die neu berechneten Frequenzen dienen dann als Näherungswerte für den folgenden Gauß-Newton-Iterationsschritt. Die Iteration wird beendet, wenn ein neuer Schritt eine Verschlechterung der Qualität oder keine nennenswerte Verbesserung der Qualität mit sich bringt. Eine Übersicht befindet sich in Tabelle 9.

Das Newton-Raphson-Verfahren erweist sich dem Gauß-Newton-Verfahren gegenüber als gleichwertig, jedoch ist die Implementierung aufwendiger, da m^2 zweite Ableitungen gebildet werden müssen. Als sinnvoll hat sich auch die Hinzunahme einer Schrittweitenregelung erwiesen. Falls ein Iterationsschritt eine Verschlechterung der Qualität mit sich bringt, wird das Verfahren nicht gleich abgebrochen, sondern es wird getestet, ob ein Iterationsschritt mit z.B. halber Schrittweite erfolgreich ist.

zu behandelnder Fall	Gauß-Newton-Verfahren beenden oder fortfahren	NEU akzeptieren oder verwerfen
$F(\text{ALT}) - F(\text{NEU}) < 0$	beenden	verwerfen
Berechnung von NEU numerisch instabil	beenden	verwerfen
NEU außerhalb des Definitionsbereiches	beenden, evtl. Randwerte untersuchen	verwerfen
$F(\text{ALT}) - F(\text{NEU}) > \varepsilon$	fortfahren	akzeptieren
$0 < F(\text{ALT}) - F(\text{NEU}) < \varepsilon$	beenden	akzeptieren
ALT	= alte Konfiguration der Unbekannten (heuristisch erzeugte Näherungswerte für Ausgleichung)	
NEU	= neue Konfiguration (Ergebnis eines Gauß-Newton-Iterationsschrittes)	
ε	= positive Konstante	

Tabelle 9: mögliche Resultate eines Gauß-Newton-Schrittes

Mit der Einbindung einer Gradientenmethode läßt sich die Effizienz der heuristischen Optimierung um ein vielfaches steigern. Der Gewinn an Effizienz bei zusätzlichem Einsatz der Gradientenmethoden wird an den Rechenbeispielen (Kapitel 6.1) dokumentiert.

5.8 Fehlerschätzung

Die Fehlerrechnung für die berechneten Modellparameter ist nicht vom Lösungsweg abhängig. Die Art des Verfahrens, mit dem die Parameter gewonnen wurden, spielt keine Rolle. Sobald eine Parameterschätzung vorliegt, kann die in der Geodäsie übliche Fehlerrechnung durchgeführt werden. Voraussetzung für deren Anwendbarkeit ist eine vollständige Modellbildung, so daß die Residuen frei von Systematiken sind.

Nachdem die unbekannt Frequenzen mit Hilfe eines heuristischen Verfahrens ermittelt wurden, ergeben sich die Schätzung der Varianzkomponente $\hat{\sigma}^2$ vom Typ BIQUUE¹⁸ ("best invariant quadratic uniformly unbiased estimation") zu

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-m} \hat{\mathbf{v}}^T \mathbf{P} \hat{\mathbf{v}} \quad (113)$$

und die Varianz-Kovarianzmatrix (Dispersionsmatrix) der geschätzten Parameter

$$\mathbf{D}\{\hat{f}_j\} = \mathbf{N}^{-1} \hat{\sigma}^2. \quad (114)$$

Die Residuen v_i lassen sich aus (72) gewinnen. Die Differenz $n - m$ entspricht der Anzahl Überbestimmungen.

Anhand der mittleren Fehler lassen sich die einzelnen Frequenzen auf Zuverlässigkeit hin untersuchen. Sind einige mittlere Fehler deutlich größer, so sind die entsprechenden Frequenzen ungenau bestimmt. In diesem Fall muß das heuristische Lösungsverfahren untersucht und eventuell mit anderen Steuerparametern neu gestartet werden. Die Ursache kann auch ein unvollständiges funktionales Modell sein. Wenn das funktionale Modell nicht durch Vergrößerung der Anzahl Frequenzen vervollständigt werden kann, so müssen andere Funktionen zur Eliminierung von Systematiken herangezogen werden.

Die mittleren Fehler der Amplituden und Phasen lassen sich durch Fehlerfortpflanzung gewinnen. Die Funktionen $A = A(f)$ und $\varphi = \varphi(f)$ werden dabei zugrunde gelegt.

¹⁸ Weitere Details sind in GRAFAREND, SCHAFFRIN (1993) zu finden.

6 Heuristische Optimierung der Frequenzen an Testdaten

6.1 Vergleich verschiedener Strategien

Anhand einer künstlich erzeugten Zeitreihe soll die Wirkungsweise der heuristischen Frequenzanalyse veranschaulicht werden. Das im vorangegangenen Kapitel beschriebene Modell wird dabei zugrunde gelegt.

Zeitreihe 1

Die Zeitreihe 1 simuliert Meßdaten eines Sensors, dessen Signal aus der Überlagerung von fünf verschiedenen harmonischen Schwingungen besteht. Ziel ist es, anhand der Daten vorhandene Frequenzen zu schätzen. In Tabelle 10 sind die wichtigsten Eckdaten des Datensatzes festgehalten.

Die Frequenzen der harmonischen Schwingungen sind willkürlich gewählt und liegen alle im Hauptalias, der den Frequenzbereich 0 bis 50 einschließt. Die Frequenzen 9.0 und 9.1 liegen dicht beieinander. Die beiden Frequenzen sind schwieriger zu finden, da sie sich im Intervall der aufgezeichneten Daten um lediglich ein zehntel ihrer Phasenlage verschieben. In Tabelle 11 sind die Amplituden, Frequenzen und Phasen der fünf überlagerten harmonischen Schwingungen festgehalten.

Anzahl der Beobachtungspaare	100
Anzahl der Überlagerten Schwingungen	5
zufällige Fehler	keine
Gleichabständigkeit	ja
Intervall	$0-2\pi$
Bias	0

Tabelle 10: Charakteristika der Zeitreihe 1

Amplitude	Frequenz	Phasenlage
1.0	4.5	0.0
1.0	6.5	1.0
1.0	9.0	1.5
1.0	9.1	2.0
1.0	15.5	2.5

Tabelle 11: harmonische Schwingungen der Zeitreihe 1

Abbildung 23 veranschaulicht die Beobachtungspaare (x, y) graphisch. Jeder Punkt entspricht einer Beobachtung.

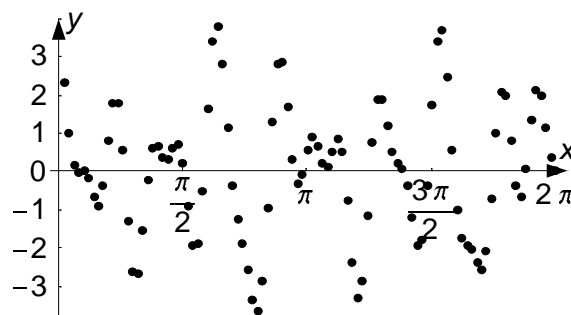


Abb. 23: graphische Darstellung der Zeitreihe

Fourieranalyse

Die Zeitreihe 1 wurde einer Fourieranalyse ohne Überbestimmungen unterzogen. Folglich ergeben sich 50 Amplituden der Frequenzen 1,2,3,...,50. In Abb. 24 sind die Amplituden der Fourierfrequenzen graphisch dargestellt.

Im Vergleich zum Fourierspektrum sind in Abb. 25 die tatsächlich im Datensatz enthaltenen Frequenzen mit den entsprechenden Amplituden abgebildet. Die Fourierfrequenzen entsprechen nicht der Realität. Insbesondere sind die folgenden Effekte zu beobachten:

1. Dicht bei einander liegende Frequenzen verschmelzen miteinander. Die Frequenzen 9.0 und 9.1 finden sich im Fourierspektrum in der Frequenz 9.0 mit einer Amplitude von 1.7 wieder.
2. Einzelne Frequenzen, die nicht ganzzahlig sind, verteilen sich auf viele Fourierfrequenzen. Beispielsweise wird die Frequenz 15.5 in die Fourierfrequenzen 15 und 16 mit Amplituden von etwa 0.6 aufgeteilt.
3. Die Anzahl der Parameter zur Darstellung der Daten ist zu groß.
4. Die Fourierfrequenzen spiegeln die Daten nur an den Stützstellen wieder. Der Verlauf des Fouriermodells zwischen den Datenpunkten ist in Abb. 26 als Ausschnitt wiedergegeben. Die durch Addition aller Fourierfrequenzen entstandene Kurve entspricht nicht dem zugrunde gelegten Modell. Der unregelmäßige Kurvenverlauf zwischen den Datenpunkten ist physikalisch nicht zu begründen.

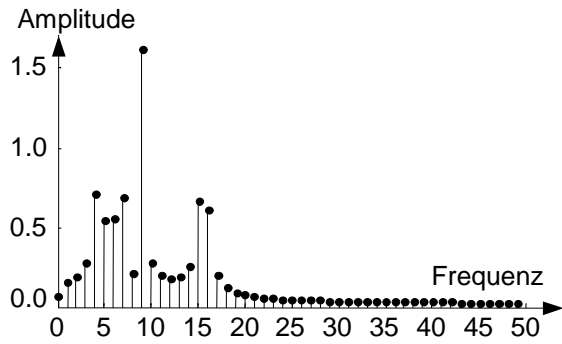


Abb. 24: Fourierspektrum der Zeitreihe 1

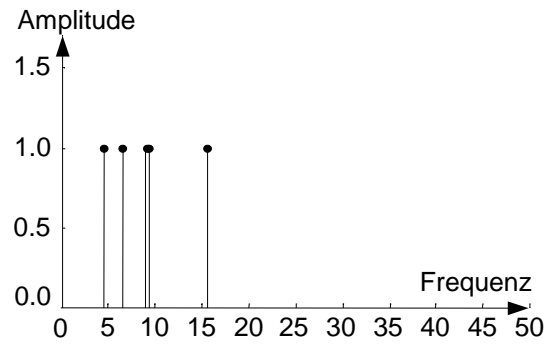


Abb. 25: tatsächliche Frequenzen der Zeitreihe 1

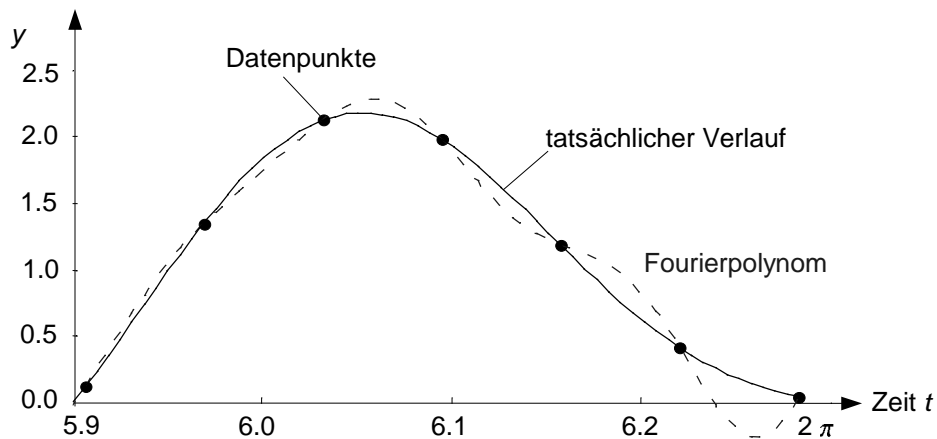


Abb. 26: Detailansicht des Fourierpolynoms und der tatsächlichen Funktion gemäß Tabelle 11

Lokales Optimierungsverfahren

Der Versuch, ein multimodales Problem allein mit Hilfe lokaler Optimierungsverfahren zu lösen, birgt in sich schon einen Widerspruch, so daß von vorne herein mit dem Mißerfolg des Verfahrens gerechnet werden muß. Wegen der häufigen Anwendung lokaler Verfahren soll dennoch kurz darauf eingegangen werden.

Das Ergebnis ist von den vorgegebenen Startwerten abhängig. Je nach Vorgabe der Näherungswerte wird ein lokales Minimum der Zielfunktion erreicht oder es kommt zur Divergenz.

Das die Daten am besten beschreibende Resultat wurde erzielt, als die fünf amplitudenstärksten Frequenzen der Fourieranalyse als Startwerte dienten. Das Gauß-Newton-Verfahren konvergierte in diesem Fall nach 3 Iterationen in einem lokalen Minimum mit einer Residuenquadratsumme von 0.245. Das globale Minimum mit der Residuenquadratsumme 0.0 wurde nicht erreicht. Das Ergebnis enthält nicht die Frequenzen 9.0 und 9.1. Wie in Abb. 27 erkennbar, sind die dicht beieinander liegenden Frequenzen zu einer Frequenz mit der Amplitude 1.8 verschmolzen. Dafür gibt es eine zusätzliche Frequenz von 15.4, die in den Daten gar nicht vorhanden ist.

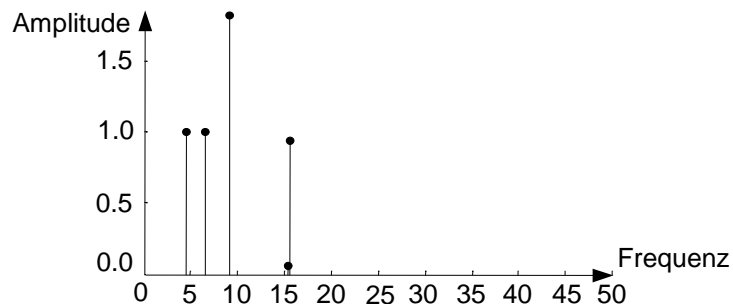


Abb. 27: Ergebnis des Gauß-Newton-Verfahrens mit Näherungswerten aus der Fourieranalyse

Das Problem der Analyse von Frequenzen aus Meßdaten kann mit einem lokalen Optimierungsverfahren nicht befriedigend gelöst werden.

Vergleich verschiedener heuristischer Strategien

Mit Hilfe der heuristischen Optimierung kann die globale Lösung des Problems gefunden werden. Das Ergebnis entspricht exakt der Tabelle 11 und ist mit den harmonischen Schwingungen, durch die der Datensatz erzeugt wurde, identisch. Nicht nur die Frequenzen und Amplituden, auch die Phasenlagen können aus der Zeitreihe 1 mit Hilfe der heuristischen Optimierung wieder identifiziert werden.

Von Interesse ist auch die Wahrscheinlichkeit, mit der die globale Lösung herbeigeführt werden kann. Da der Schwierigkeitsgrad der Optimierungsaufgabe nicht hoch ist, läßt sich die globale Lösung mit einer sehr hohen Wahrscheinlichkeit finden.

Um jedoch die Effizienz verschiedener Verfahren miteinander vergleichen zu können, wurde die Anzahl der Schritte soweit herabgesetzt, daß die Trefferquote wesentlich weniger als 100% betrug. Die einzelnen Strategien wurden jeweils 100 Mal gestartet. Die Ergebnisse sind den Tabellen 12-14 zusammengefaßt. Nicht die Anzahl der Iterationsschritte wurde konstant gehalten, sondern die Rechenzeit. Die Vergleiche dienen nur einer groben Abschätzung der Effizienz verschiedener Strategien, denn die Rechenzeit ist von weiteren Faktoren, beispielsweise der Implementation, dem Compiler und dem Rechner abhängig.

Verwendete Zeitreihe		Datensatz 1				
Anzahl der Programmstarts		je 100				
Anzahl der Modellfrequenzen		5				
Liniensuchalgorithmen		keine				
heuristisches Verfahren		Hill Climbing				
Näherungswerte		keine				
zusätzliches Gradientenverfahren	Strategie	Anzahl Schritte	globale Lösung gefunden [%]	minimale $\Sigma \mathbf{v}^T \mathbf{v}$	mittlere $\Sigma \mathbf{v}^T \mathbf{v}$	maximale $\Sigma \mathbf{v}^T \mathbf{v}$
Funktion Z (75) ohne Gradientenverfahren	keine	3000	0	92.6	195.4	285.3
Funktion Q (90) ohne Gradientenverfahren	keine	1000	0	0.21	17.7	57.2
Newton-Raphson	Singlestart	1000	22	0.00	5.9	55.3
Gauß-Newton	Singlestart	1000	27	0.00	6.5	59.2

Tabelle 12: Bedeutung des zusätzlichen Einsatzes eines Gradientenverfahrens

Aus Tabelle 12 wird ersichtlich, daß erst mit der Einbindung einer Gradientenmethode das globale Minimum gefunden wird. Die Art des lokalen Verfahrens spielt keine entscheidende Rolle, wenn das Gradientenverfahren erst nach der heuristischen Optimierung gestartet wird (Singlestart-Verfahren).

Das Starten des lokalen Verfahrens nach jedem Schritt (Multistart-Verfahren) brachte keine Verbesserung der Effizienz (Tabelle 13). Da das lokale Verfahren den Rechenaufwand eines heuristischen Iterationsschrittes in diesem Fall verzehnfacht, wurde die Anzahl der Rechenschritte entsprechend verringert.

Ferner wird in Tabelle 13 ersichtlich, daß sich Newton-Raphson für das Multistart-Verfahren nicht eignet. Die zufälligen Werte der Unbekannten sind weit von den Minima entfernt. Das Newton-Raphson-Verfahren divergiert in diesem Fall häufig.

Anzahl der Programmstarts		je 100				
heuristisches Verfahren		Hill Climbing				
zusätzliches Gradientenverfahren	Strategie	Schritte	globale Lösung gefunden [%]	minimale $\Sigma \mathbf{v}^T \mathbf{v}$	mittlere $\Sigma \mathbf{v}^T \mathbf{v}$	maximale $\Sigma \mathbf{v}^T \mathbf{v}$
ohne	ohne	1000	0	0.21	17.72	57.24
Newton-Raphson	Multistart	100	3	0.00	44.62	110.45
Gauß-Newton	Multistart	100	24	0.00	8.72	48.24
Newton-Raphson	„Optistart“	1000	51	0.00	1.36	30.69
Gauß-Newton	„Optistart“	1000	67	0.00	0.41	33.45

Tabelle 13: verschiedene Strategien bei Einbindung eines Gradientenverfahrens

Ein deutlicher Gewinn an Effizienz wird erzielt, falls nur dann ein lokales Verfahren gestartet wird, wenn durch die Heuristik ein neues Optimum gefunden wurde. Der dadurch gewonnene Gewinn an Rechenzeit erlaubt eine größere Anzahl an Rechenschritten. In Tabelle 13 wird diese Strategie als „Optistart“ bezeichnet.

In Tabelle 14 werden heuristische Strategien miteinander verglichen. Das Hill Climbing Verfahren schneidet relativ schlecht ab. Threshold Accepting und Simulated Annealing liefern annähernd gleich gute Ergebnisse. Allerdings sind die heuristischen Parameter S und T empirisch zu ermitteln. Für ein anderes Optimierungsproblem müssen die Parameter neu eingestellt werden. Beim einfachen Hill Climbing Verfahren ist es nicht notwendig, S und T an das Problem anzupassen. Mit $T=0$ wurden nur neue Optima akzeptiert und mit $S = \text{maximal}$ bleibt der Definitionsbereich der Unbekannten uneingeschränkt.

Da diese Arbeit die Entwicklung eines Optimierungssystems zum Ziel hat, bei dem der Anwender nicht eingreifen muß, wird in zukünftigen Beispielen keine Anpassung der heuristischen Parameter vorgenommen, trotz einer suboptimalen Effizienz.

Anzahl der Programmstarts		je 100					
Strategie		„Optistart“					
zusätzliches Gradientenverfahren		Gauß-Newton					
verwendetes heuristisches Verfahren	Verlauf von T	Verlauf von S	Schritte	globale Lösung gefunden [%]	minimale $\Sigma \mathbf{v}^T \mathbf{v}$	mittlere $\Sigma \mathbf{v}^T \mathbf{v}$	maximale $\Sigma \mathbf{v}^T \mathbf{v}$
Hill Climbing	$T = 0$	$S = \text{max.}$	1000	67	0.00	0.41	33.45
Threshold Accepting	$1 \rightarrow 0$	$100 \rightarrow 5$	1000	92	0.00	0.02	0.75
Simulated Annealing	$1 \rightarrow 0$	$100 \rightarrow 5$	1000	93	0.00	0.18	11.07
Hill Climbing + spezielle Strategie	$T = 0$	$S = \text{max.}$	202	100	0.00	0.00	0.00

Tabelle 14: verschiedene heuristische Verfahren

Das in der letzten Zeile der Tabelle 14 dargestellte Verfahren verwendet eine Strategie, bei der nicht gleich alle Frequenzen auf einmal gesucht werden. Die Optimierungsaufgabe 1 konnte mit diesem Algorithmus am erfolgreichsten gelöst werden. Nach allen 100 Programmstarts wurde das globale Optimum gefunden. Der Algorithmus ist in Tabelle 15 beschrieben.

<p>setze Anzahl Frequenzen für Vektor $\mathbf{u} := 0$</p> <p>wiederhole</p> <p style="padding-left: 20px;">$f = \text{optimiere}(\mathbf{b} - \mathbf{u})$ mit zufälligem Startwert</p> <p style="padding-left: 20px;">$\mathbf{u} = \mathbf{u} + f$</p> <p style="padding-left: 20px;">$\mathbf{u} = \text{optimiere}(\mathbf{b})$ mit Startwerten \mathbf{u}</p> <p>bis entweder</p> <p style="padding-left: 20px;">vorgegebene Anzahl Frequenzen erreicht</p> <p>oder bis</p> <p style="padding-left: 20px;">keine signifikante Verbesserung von Q mehr</p>	<p>\mathbf{u} ist ein Vektor mit Frequenzen,</p> <p>f ist eine Frequenz,</p> <p>\mathbf{b} ist ein Vektor mit Beobachtungen</p> <p>Definition der Subtraktion $\mathbf{b} - \mathbf{u}$: Die harmonischen Schwingungen des Vektors \mathbf{u} werden mit den entsprechenden Amplituden von den Daten abgezogen</p> <p>Definition der Addition $\mathbf{u} + f$: Die Frequenz f wird in den Vektor \mathbf{u} aufgenommen. Die Anzahl Frequenzen von \mathbf{u} erhöht sich entsprechend.</p> <p>optimiere ist der heuristische Algorithmus, dessen Ergebnis die Frequenz(en) sind, mit denen die Daten (im Argument) optimal modelliert werden.</p>
--	--

Tabelle 15 : Suchstrategie für Frequenzen mittels stufenweisem Hinzufügen einzelner Schwingungen

6.2 Behandlung von Datenlücken

Während der Datenaufnahme kommt es nicht selten vor, daß ein Sensor zeitweise keine Daten registriert oder aus anderen Gründen bestimmte Abschnitte einer Zeitreihe nicht auswertbar sind.

Um einen solchen Fall zu simulieren, wurden die Beobachtungspaare Nr.10 bis Nr.19 aus dem Datensatz 1 entfernt. Der neue Datensatz 1a (Abb. 28) enthält folglich 90 Beobachtungen mit einer Datenlücke von 10 Registrierungen.

In Abb. 29 wird deutlich, daß die heuristische Optimierung für den Datensatz 1a (mit Datenlücke) exakt das gleiche Ergebnis liefert wie für den Datensatz 1 (ohne Datenlücke) (siehe Abb. 25).

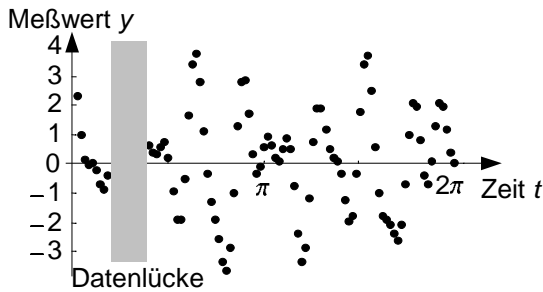


Abb. 28: Datensatz 1a

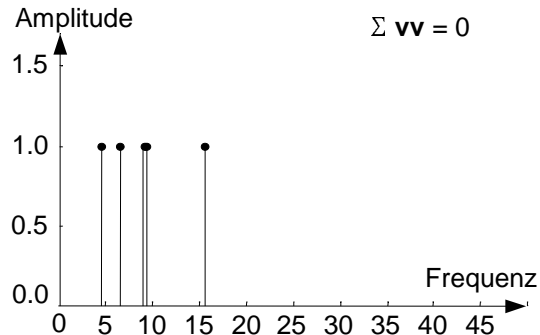


Abb. 29: heuristisch ermittelte Frequenzen der Zeitreihe 1a

Im Gegensatz zu gleichabständigen Daten ist die Normalgleichungsmatrix der Fourieranalyse vollbesetzt. Eine Fourierreihe mit 45 Gliedern liefert aufgrund von numerischen Instabilitäten kein brauchbares Ergebnis. Es entstehen sogenannte „Sidelobes“, d.h. unrealistische Amplituden, wie in Abb. 30 deutlich zu erkennen ist.

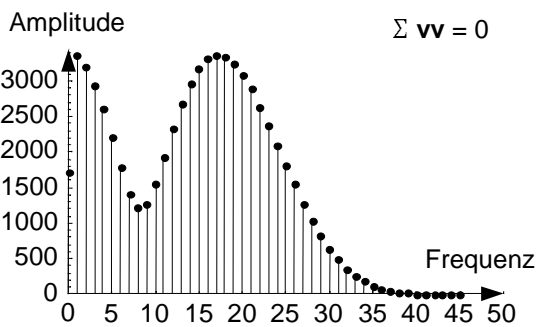


Abb. 30: Fourierspektrum der Zeitreihe 1a

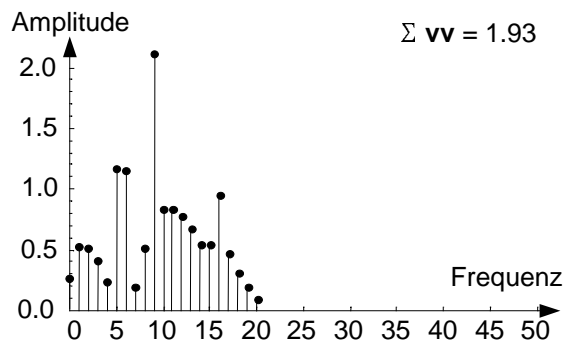


Abb. 31: Fourierspektrum von Datensatz 1a mit 2x20 Koeffizienten

Um den Sidelobes vorzubeugen, sollte die Fourierreihe im gewählten Beispiel aus maximal 20 Gliedern, bzw. 40 Unbekannten bestehen. Das Ziel, alle Frequenzanteile bis $f = 45$ zu finden, kann damit nicht erreicht werden. In Abb. 31 ist das Amplitudenspektrum für die Fourierreihe mit 20 Gliedern abgebildet. Auch diese Fourierreihe approximiert die Zeitreihe mit Datenlücke relativ schlecht, insbesondere weicht das Fourierpolynom zwischen den Stützstellen von dem tatsächlichen Verlauf ab. Abschließend kann festgestellt werden, daß die Fourierreihe im Falle nicht gleichabständiger Beobachtungen noch weniger in der Lage ist, die vorhandenen Frequenzen der Daten zu modellieren.

Um dennoch mit Hilfe der Fourierreihe lückenhaftes Datenmaterial auswerten zu können, wurden verschiedene Methoden zur Stabilisierung des Normalgleichungssystems entwickelt. Allerdings laufen alle Versuche darauf hinaus, das zu Grunde gelegte Datenmaterial zu verändern, indem die Datenlücken durch fiktive Beobachtungen ersetzt werden.

XU (1992, S. 22 - 24) entwickelte eine Methode der iterativen Spektralanalyse, bei der zunächst die fehlenden Daten y_i durch fiktive Beobachtungen ergänzt werden. Dadurch entsteht das Normalgleichungssystem in Form einer Diagonalmatrix. Im ersten Iterationsschritt wird die Datenlücke durch Nullen ergänzt. Im Beispiel entsteht aus Datensatz 1a der Datensatz 1b. Führt man mit dem neu entstandenen Datensatz eine Fourieranalyse durch, so erhält man das Fourierspektrum gemäß Abb. 32. Dieser Fourierpolynom (Abb. 33, gestrichelte Linie) approximiert an der Datenlücke die fehlenden Daten (durchgezogene Linie) in keiner Weise.

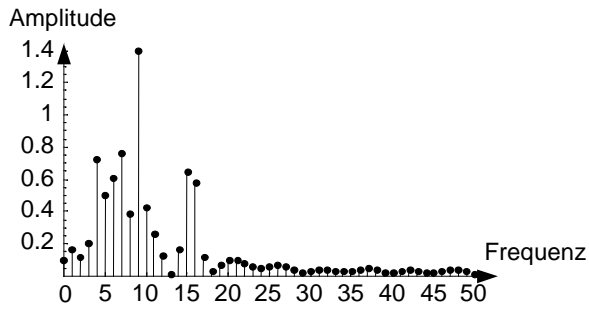


Abb. 32: Fourierspektrum von Datensatz 1b (Datenlücke mit Nullen ausgefüllt)

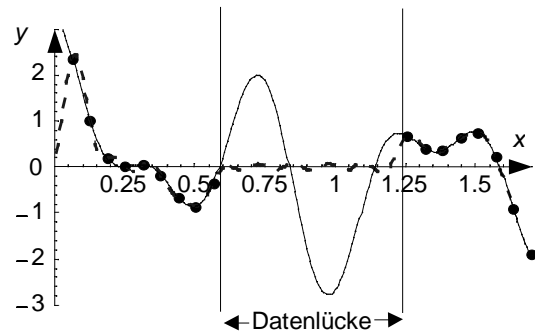


Abb. 33: Verfahren von XU vor erster Iteration: gestrichelt; theoretischer Datenverlauf: durchgezogen

Im iterativen Verfahren werden nun mit Hilfe der langwelligen Frequenzanteile der Fourierreihe die fehlenden Daten neu berechnet und erneut einer Fourieranalyse unterzogen. Das Ergebnis, siehe Abb. 34 und 35, modelliert jedoch nicht den tatsächlichen Verlauf an der Datenlücke. Auch zwischen den Datenpunkten weicht das Fourierpolynom vom theoretischen Verlauf stark ab; siehe Abb. 36. Das Ergebnis des iterativen Verfahrens hängt davon ab, welche Frequenzen als signifikant betrachtet werden. Eine Konvergenz ist nicht garantiert.

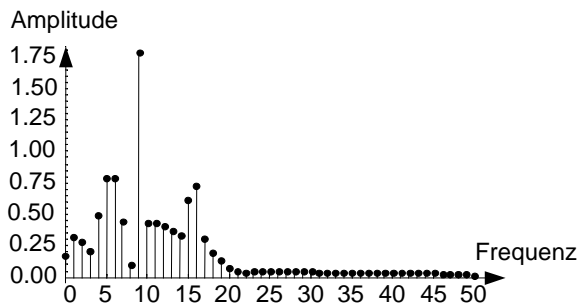


Abb. 34: Fourierspektrum nach 20 Iterationen

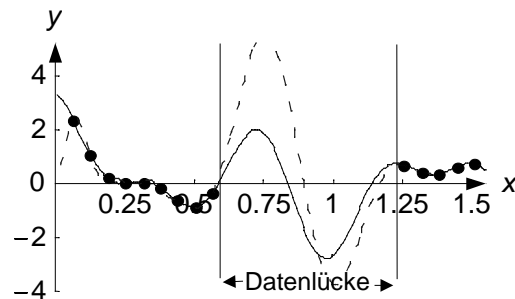


Abb. 35: Verfahren von XU nach 20 Iterationen: gestrichelt; theoretischer Datenverlauf: durchgezogen

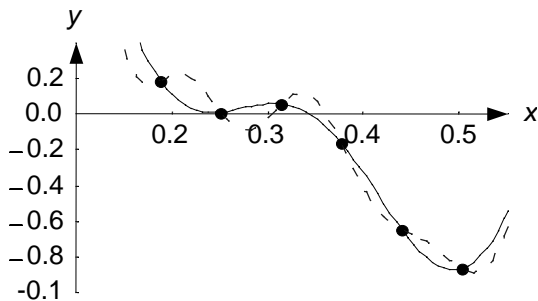


Abb. 36: Detailansicht nach 20 Iterationen; Polynom: gestrichelt; theoretischer Datenverlauf: durchgezogen

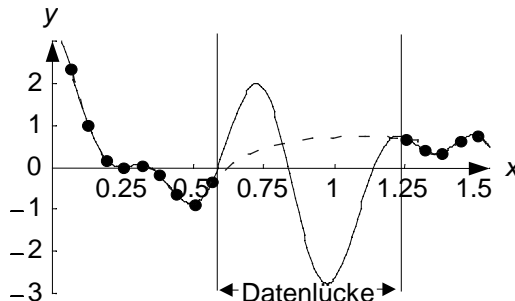


Abb. 37: Interpolation durch kubische Splines: gestrichelte Linie

Der Kurvenverlauf an der Datenlücke kann auch durch kubische Splines interpoliert werden (siehe Abb. 37). Weitere Möglichkeiten, den Datenverlauf in der Datenlücke zu präzisieren sind unter den Namen Kalman-Filter und Bayes'sches Verfahren bekannt. Je nach Größe der Datenlücke und Art des verwendeten Verfahrens lassen sich mehr oder weniger gute Näherungswerte zum Füllen der Datenlücke finden. Dient das Ergänzen der Datenlücke zur Stabilisierung bzw. Orthogonalisierung des Normalgleichungssystems für eine Fourieranalyse, so ist das „Erfinden“ von Daten nicht gerechtfertigt, denn die „erfundenen“ Daten liefern fehlerhafte Ergebnisse. Das künstliche „Schließen“ von Datenlücken ist für die heuristische Optimierung nicht notwendig (siehe Abb.29).

6.3 Ergebnisse der heuristischen Optimierung

Anhand einer zweiten Zeitreihe soll gezeigt werden, daß die heuristische Optimierung praxisnahe Probleme lösen kann. Es wird ein Weg zur Bewertung der Ergebnisse aufgezeigt.

Zeitreihe 2

Die zweite Zeitreihe unterscheidet sich von der ersten durch folgende Kriterien:

- zufällige Fehleranteile in den Beobachtungen
- unterschiedliche Amplituden der harmonischen Schwingungen
- eine größere und unbekannte Anzahl von überlagerten Frequenzen.

Durch das Hinzufügen zufälliger Fehler mit einer Standardabweichung von 0.1 Einheiten, sind Residuen in der gleichen Größenordnung zu erwarten. Folglich führt der Modellansatz mit den ursprünglichen Frequenzen zu einem globalen Minimum, dessen Residuenquadratsumme größer als 0 ist. Die Tabellen 16 und 17 geben die Eckdaten der Zeitreihe 2 an.

Anzahl der Beobachtungspaare	100
Anzahl der überlagerten Schwingungen	10
weißes Rauschen mit Standardabweichung	± 0.1
Datenlücken	ja
Intervall	$0-2\pi$

Tabelle 16: Charakteristika der Zeitreihe 2

Amplitude	Frequenz	Phasenlage
0.2	4.0	0.0
0.5	6.5	1.0
1.0	9.0	1.5
1.0	9.3	2.0
1.0	15.5	2.5

Amplitude	Frequenz	Phasenlage
1.5	21.5	0.0
2.0	23.0	0.0
0.5	31.0	0.5
0.1	35.5	0.0
1.0	47.0	0.5

Tabelle 17: harmonische Schwingungen der Zeitreihe 2

Minimierung der Anzahl Modellparameter

Die Anzahl der Schwingungen in der Zeitreihe wurde als unbekannt angenommen. Aus diesem Grund wurde die heuristische Optimierung mit unterschiedlicher Anzahl harmonischer Schwingungen im Modell durchgeführt. Wie in Abb. 38 und Abb. 39 zu erkennen ist, nimmt die Residuenquadratsumme zwischen 0 und 10 Modellfrequenzen stark ab. Das Hinzufügen weiterer Parameter im Modell verkleinert die Residuen nicht mehr signifikant.

Zur Modellierung der Zeitreihe mit Hilfe von Fourierpolynomen sind wesentlich mehr Modellparameter nötig. Um eine Residuenquadratsumme von 0.73 zu erzielen, sind 10 heuristisch ermittelte Frequenzen oder aber 47 Fourierfrequenzen notwendig.

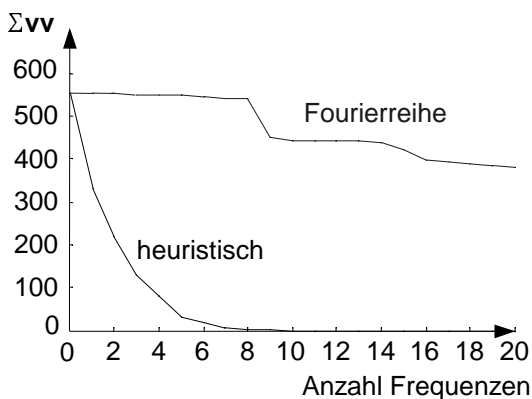


Abb. 38: Residuenquadratsumme in Abhängigkeit der Parameter Anzahl

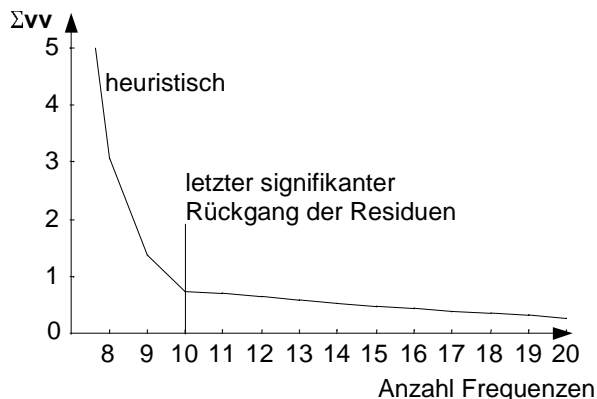


Abb. 39: vergrößerter Ausschnitt der Residuenquadratsummen

Bestimmung der Modellparameter und Bewertung der Ergebnisse

Die heuristische Optimierung wurde mit 12 Frequenzen durchgeführt, obwohl sich nur 10 überlagerte Schwingungen in den Daten befinden. Damit soll die Wirkung eines Modellansatzes mit einer geschätzten Anzahl Frequenzen simuliert werden. Die Darstellung des Ergebnisses erfolgt in Tabelle 18, sortiert nach den mittleren Fehlern der Frequenzen. Die Frequenzen und Amplituden unterscheiden sich von den Parametern, mit der die Zeitreihe generiert wurde, erwartungsgemäß im Bereich ihrer mittleren Fehler. Die Abweichungen resultieren daraus, daß nach dem Hinzufügen zufälliger Fehler die generierten Frequenzen nicht mehr exakt die globale Lösung repräsentieren.

Die zwei zusätzlichen Schwingungen (fett) sind durch ihren großen mittleren Fehler der Frequenzen und ihrer kleinen Amplituden eindeutig erkennbar. Mit Hilfe von Signifikanztests können diese Frequenzen automatisiert gefunden und eliminiert werden.

Die Schwingungen 9.0 und 9.3 (kursiv) besitzen einen großen mittleren Fehler in ihren Amplituden. Der Grund dafür liegt darin, daß die Frequenzen dicht bei einander liegen und damit stark korreliert sind. Diese Tatsache macht sich durch entsprechend hohe Werte in der Kovarianzmatrix **Q** bemerkbar.

Das tatsächliche Amplitudenspektrum der Daten (Abb. 40) unterscheidet sich nur unwesentlich von den durch die heuristische Optimierung gewonnenen Frequenzen (Abb. 41). Klassische Spektralanalyseverfahren sind nicht in der Lage, ein annähernd gutes Spektrum zu liefern; insbesondere sei auf die stark korrelierten Schwingungen hingewiesen, die, trotz des geringen Frequenzunterschiedes von 0.3, mit Hilfe der Heuristischen Optimierung noch eindeutig identifiziert werden können.

Frequenzen				Amplituden			
generierte Frequenz	Frequenz mittels Heuristik	Differenz $\Delta f = \text{Soll} - \text{Ist}$	mittl. Fehler $m_i = Q_{ii} \sqrt{\frac{\sum vv}{n-u}}$	generierte Amplitude	Amplitude mittels Heuristik	Differenz $\Delta a = \text{Soll} - \text{Ist}$	mittl. Fehler $m_i = Q_{ii} \sqrt{\frac{\sum vv}{n-u}}$
21.50	21.50	+0.00	±0.00	1.50	1.49	+0.01	±0.01
23.00	23.00	+0.00	±0.00	2.00	2.01	-0.01	±0.01
15.50	15.49	+0.01	±0.01	1.00	1.02	-0.02	±0.02
31.00	30.98	+0.02	±0.01	0.50	0.49	+0.01	±0.02
47.00	47.00	+0.00	±0.01	1.00	0.98	+0.02	±0.02
6.50	6.51	-0.01	±0.02	0.50	0.50	+0.00	±0.03
9.00	9.04	-0.04	±0.03	1.00	1.18	-0.18	±0.26
9.30	9.28	+0.02	±0.04	1.00	1.04	-0.04	±0.27
4.00	3.93	+0.07	±0.04	0.20	0.18	+0.02	±0.01
35.50	35.53	-0.03	±0.07	0.10	0.11	-0.01	±0.01
-----	25.05	-----	±0.17	-----	0.04	-----	±0.02
-----	40.20	-----	±0.21	-----	0.04	-----	±0.01

Tabelle 18: generierte Schwingungen im Vergleich mit den Ergebnissen der heuristischen Optimierung

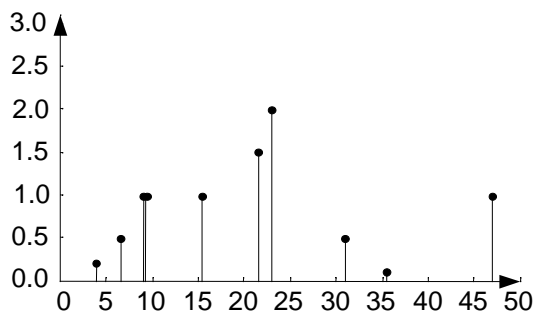


Abb. 40: Frequenzen in der Zeitreihe 2

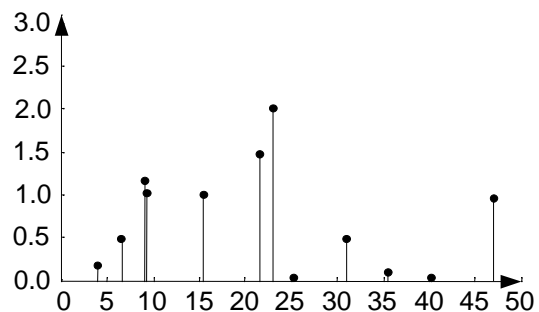


Abb. 41: 12 Frequenzen durch heuristische Optimierung

Power und Spektrale Energie

Numerische Instabilitäten der Normalgleichungsmatrix führen zu großen, sich teilweise gegenseitig auslöschenden Amplituden, die auch als Sidelobes bezeichnet werden. Modelle mit solchen Amplituden bilden den Verlauf

zwischen den Datenpunkten besonders schlecht ab. In der Literatur findet man häufig die quadrierten Amplituden als spektrale Dichte definiert, deren Aufsummierung

$$S = \sum_{k=1}^M a_k^2 \quad (115)$$

proportional zu der Energie mechanischer Wellen ist. Als Maß für das Vorhandensein von Sidelobes ist die Summe der Amplitudenbeträge ebenfalls geeignet. Die spektrale Energie E eines Modells sei gemäß (116) definiert.

$$E = \sum_{k=1}^M |a_k| \quad (116)$$

Während die Frequenzen, mit der die Zeitreihe 2 generiert wurde, eine Energie von $E = 8.8$ aufweisen, liefert die Lösung der heuristischen Optimierung $E = 9.2$. Der Grund dafür ist auf die Veränderung des Datenmaterials durch Hinzugabe von zufälligen Fehlern zurückzuführen, denn ohne den Anteil zufälliger Fehler in den Daten liefert die heuristische Optimierung $E = 8.8$. Die Energie der Fourierreihe bis einschließlich Koeffizient 47 beträgt $E = 13.5$. Das entspricht 53% mehr spektraler Energie, als im ursprünglichen Datenmaterial vorhanden war. Daraus wird ersichtlich, daß sich die Fourierfrequenzen gegenseitig aufheben. Auch dieser Umstand trägt dazu bei, die Fourierreihe zur Modellierung von Schwingungen in Zeitreihen in Frage zu stellen.

7 Anwendung der heuristischen Spektralanalyse bei der Trennung geodätisch-geophysikalischer Signale in Altimeterdaten

7.1 Einleitung zur Altimetermessung

Mit Hilfe eines Satellitenaltimeters ist die Beobachtung der momentanen Meeresoberfläche möglich. Die Beobachtungsgröße R des satellitengestützten, aktiven Mikrowellensensors ist - nach dem Anbringen einiger Korrekturen - der vertikale Abstand zwischen Satellit und Meeresoberfläche. Die an dieses Signal anzubringenden Korrekturen lassen sich in drei Kategorien einteilen: Instrumentaleffekte, Signalausbreitungseffekte, sowie Gezeiten- und Auflasteffekte.

Möchte man Aussagen über die Variation von Meeresströmungen treffen, so muß die Beobachtungsgröße R zunächst um die ellipsoidische Höhe h des Satelliten, die Geoidundulation N und den stationären Anteil der Meerestopographie ζ_s reduziert werden. Es ergibt sich die sogenannte reduzierte Altimetermessung

$$\eta = h - [R + N + \zeta_s]. \quad (117)$$

In dieser Untersuchung ist die eigentliche Zielgröße der zeitlich variable Anteil der Meerestopographie ζ_v . Da ζ_v nicht von den fehlerhaften Korrektur- und Reduktionsgrößen zu trennen ist, ergibt sich der Zusammenhang

$$\eta(\phi, \lambda, t) = \{ \zeta_v(\phi, \lambda, t) + P(\phi, \lambda) + C(\phi, \lambda, t_0) + V(t - t_0) \} + \{ z_A + g_A \}, \quad (118)$$

wobei ϕ und λ die geographische Breite und Länge sind. Die zufälligen Fehler sind mit z_A und die groben Fehler mit g_A bezeichnet. Letztere sind im Preprocessing zu eliminieren. Die systematischen Fehler teilen sich in drei Kategorien auf:

1. Permanente Fehler P . Sie fallen bei Differenzbildung heraus.
2. Konstante Fehler C . Sie treten bei Differenzbildung in den Kreuzungspunkten auf, da sie von der Orientierung der Satellitenbahnbögen abhängen.
3. Variable Fehler V . Sie treten stets in allen Differenzbildungen auf.

STUBENVOLL (2000, Kap. 6) entwickelte das sogenannte Alongtrack-/Crossover-Verfahren, eine Auswertestrategie zur Elimination verschiedener Modellfehler. In einem ersten Schritt werden Alongtrack-Differenzen zu einer Nullepoche gebildet. Da in diesen Differenzen keine Fehler der Kategorien P und C enthalten sind, lassen sich die variablen Bahnfehler der Kategorie V modellieren. Die langwelligen Bahnfehler unterscheiden sich von den hochfrequenten Partialtiden und den hochgradig irregulären Ozeanvariationen $\Delta\zeta_v$ im Frequenzspektrum. Zur Elimination der Bahnfehler werden verschiedene funktionale Modelle angesetzt. In Abschnitt 7.3 wird der Versuch unternommen, einzelne Schwingungen direkt zu identifizieren und mit der von STUBENVOLL (2000, S. 61) favorisierten Fourieranalyse zu vergleichen.

In einem zweiten Schritt, dem sogenannten Zeitreihenschritt werden für jeden Punkt $P(\phi, \lambda)$ alle verfügbaren Beobachtungen nach signifikanten Residualtiden untersucht (Abschnitt 7.4).

Im dritten Auswerteschritt, auf den in dieser Arbeit nicht weiter eingegangen wird, werden die Crossover-Differenzen aller Zyklen einer „Geschlossenen Analyse“ unterzogen.

7.2 Verwendete ERS-1 Altimeterdaten

Die verwendeten Daten stammen von einem ERS-1 Altimetersatelliten innerhalb des Zeitraums 1. Januar bis 4. April 1994, bzw. einer Zeitspanne von 93 Tagen. Da der Altimetersatellit auf einer *Exact Repeat Mission* flog, entstanden Wiederholungsmessungen im Abstand der Zyklusperiode von 3 Tagen. Jedem Zyklus wurde eine Epochenummer zugeordnet. Von den insgesamt 31 Zyklen mit den Epochenummern 296 bis 326 flossen 29 in die Auswertung ein.

Der ERS-1 Satellit flog einen 43/3 Tage-Orbit, d.h. 43 Umläufe je Zyklus. Ein Erdumlauf des Satelliten dauert demnach 3/43 Tage, bzw. 6026 Sekunden. Die Hauptorbitelemente ($i = 98,5^\circ$, $a = 7153$ km, $e = 0.001$) charakterisieren einen tief geflogenen, annähernd kreisförmigen Orbit.

Die Zeitreihe besitzt große Datenlücken, da beim Überfliegen der Kontinente keine Datenaufnahme stattfinden konnte. Ferner entfallen registrierte Daten bei einer Breite $|\phi| > 75^\circ$, Beobachtungen, die von der europäischen Welt-

raumorganisation ESA mit dem Qualitätsflag „schlecht“ ausgewiesen wurden (Satellit im Manövermodus) und Datenregistrierungen bei einer Wassertemperatur $< 0.5^{\circ}\text{C}$. In den Zyklen 302 und 312 liegen besonders große Datenlücken vor, da innerhalb dieser Epochen Manöver durchgeführt wurden.

An die Beobachtungen R wurden die oben erwähnten Korrekturen angebracht. Vorausgegangen war ein Preprocessing, in dem grobe Fehler identifiziert und entfernt wurden. Ferner wurden die Daten einer gleitenden Mittelwertbildung unterzogen. Das Mittelungsintervall entsprach dabei 80 Sekunden aufgezeichneter Daten. Die Glättung der Daten war unter anderem eine notwendige Voraussetzung für eine stabile Fourieranalyse. Bei Verwendung der heuristischen Frequenzidentifikation kann auf eine Glättung verzichtet werden, so daß weiterhin mit den ursprünglichen und unveränderten Daten gearbeitet werden könnte. Um aber einen Vergleich mit den Ergebnissen aus STUBENVOLL (2000) durchführen zu können, werden in den folgenden Berechnungen die geglätteten Daten verwendet.

Nach dem Preprocessing verbleiben durchschnittlich 21000 Beobachtungen je Zyklus. Der zeitliche Abstand zwischen den einzelnen Beobachtungen liegt bei 5 Sekunden. In einem nächsten Auswerteschritt galt es, die Daten derart zu organisieren, daß auf für die Auswertung erforderliche Wiederholungsmessungen zurückgegriffen werden konnte. Die Alongtrack-Daten wurden für diesen Zweck sogenannten Normalpoints mit konstantem Zeitintervall Δt zugeordnet. Da sich dadurch die Passe aller Zyklen auf das gleiche Normalpoint-Raster beziehen, ist die direkte Differenzbildung der Beobachtungen möglich. Bei allen Differenzbildungen diente der Zyklus 296 als Nullepoche.

Ein Ausschnitt aus der Zeitreihe der Alongtrack-Differenzen ist in Abb. 42 dargestellt. Die Datenlücken erklären sich durch das Überfliegen von Kontinenten bzw. Breiten mit $|\phi| > 75^{\circ}$. Das abgebildete Zeitfenster von ca. zwei Stunden entspricht drei Bahnbögen des Satelliten. Die Meßwerte zeigen eine Variabilität von ca. 2 dm. Die mittlere Variabilität dieser Zyklusdifferenz beträgt 9.4 cm. Deutlich erkennbar sind periodische Einflüsse in verschiedenen Frequenzbereichen. Besonders auffällig ist die dominierende Schwingung von 1 cpr mit der Periode von 1.67 Stunden. Die Bezeichnung „cpr“ bedeutet hierbei „cycle per revolution“ und entspricht der Frequenz von einer Schwingung je Satellitenumlauf.

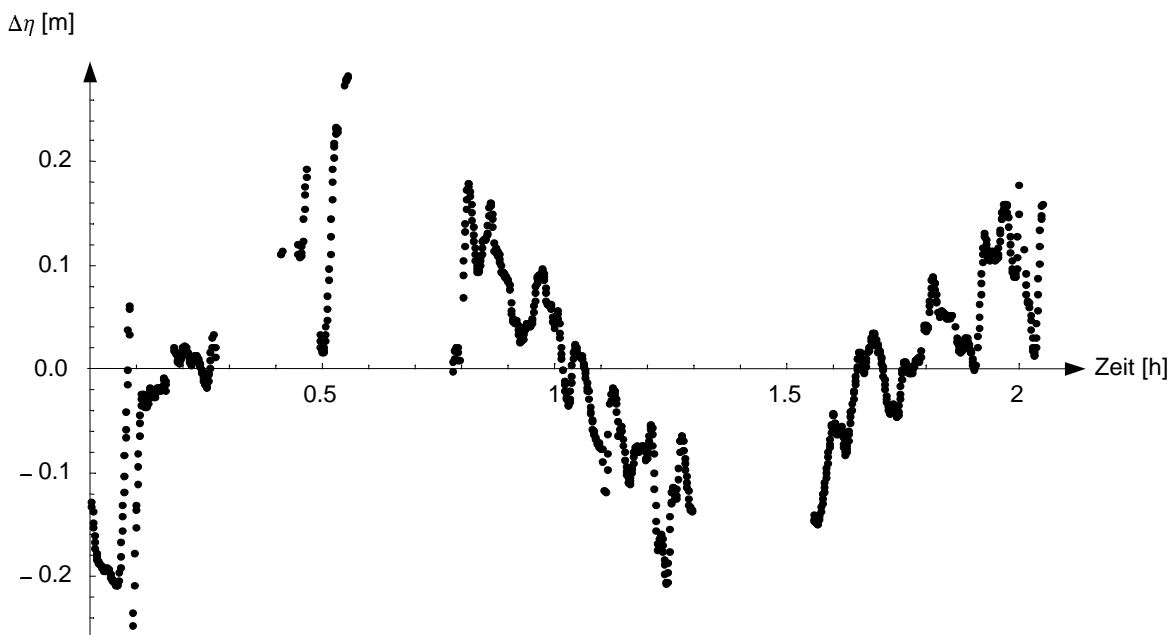


Abb. 42: Zyklusdifferenz 296-297; Passe Nr.1 bis 3

7.3 Ergebnisse der heuristischen Optimierung (Alongtrack-Schritt)

Ziel dieses Auswerteschrittes ist die Modellbildung der radialen Bahnfehler des Satelliten. Die gemeinsame Grundüberlegung aller empirischen Modellbildungen beruht auf der Tatsache, daß die Bahnfehler einen glatten Verlauf aufweisen. Aus diesem Grund werden Polynome niedrigen Grades oder langwellige Schwingungen zur Erfassung dieser Fehler angesetzt.

Vergleich verschiedener funktionaler Modelle

Für die Modellbildung der Alongtrack-Differenzen werden einerseits klassische Modelle herangezogen und andererseits neue funktionale Modelle, die sich mit Hilfe einer heuristischen Methode berechnen lassen. In Anlehnung an STUBENVOLL (2000, S. 60) wurden die klassischen Modelle (1 - 5) untersucht.

Ansatz Nr.		Ansatz	mittlere Abweichungen [cm]	erzielte Verbesserung [cm]	Anzahl Parameter
2		Analytische Lösung	9.2	0.2	4
6	H 2	Identifizierung von 2 Frequenzen	7.7	1.7	6
6	H 5	Identifizierung von 5 Frequenzen	6.9	2.5	15
5		Gemischtes Modell	6.8	2.6	98
6	H10	Identifizierung von 10 Frequenzen	6.4	3.0	30
3		Fourierapproximation mit 48 Gliedern	6.2	3.2	96
1		Short-Arc-Lösung	6.1	3.3	129
4		Fourierapproximation mit 60 Gliedern	5.8	3.6	121
6	H20	Identifizierung von 20 Frequenzen	5.8	3.6	60
6	H30	Identifizierung von 30 Frequenzen	5.8	3.6	90
6	H40	Identifizierung von 40 Frequenzen	5.7	3.7	120

Tabelle 19: Übersicht der funktionalen Modelle, sortiert nach ihren resultierenden mittleren Abweichungen am Beispiel der Zyklusdifferenz 297-296

1. Short-Arc-Lösungen

Für jeden einzelnen Pass werden die $\sin(u)$ und $\cos(u)$ Komponenten angesetzt, wobei u das Argument der Breite ist. Um den enormen Sprüngen an den Passübergangsstellen (bis zu 20 cm) entgegenzuwirken, müssen weitere Bedingungen an den Sprungstellen in Form von Pseudobeobachtungen eingeführt werden. Das funktionale Modell für jeden Pass besitzt vier Parameter und hat die Form

$$f = a \cos(u) + b \sin(u) + c \Delta t. \quad (119)$$

Für diesen Ansatz ergeben sich bei 43 Passen je Zyklus $43 \cdot 3 = 129$ Parameter. Die Modellverbesserungen (Tabelle 19) sind zwar signifikant, jedoch geringer im Vergleich zu den anderen Modellen.

2. Analytische Lösung

Bei der analytischen Lösung soll eine physikalische Erklärung des dominierenden 1 cpr Bahnfehler-Anteils gefunden werden. Die Störkräfte, wie der Sonnenstrahlungsdruck und der Deep-Resonanzeffekt, welche hauptsächlich zum Fehlverhalten von $\sin(u)$ und $\cos(u)$ führen, werden untersucht. Die geringen Modellverbesserungen machen jedoch deutlich, daß mit diesem Ansatz keine direkte physikalische Ursache aufgedeckt werden kann (STUBENVOLL 2000, S. 61).

3. Fourierreihe

Bahnfehler mit Frequenzen höher 2 cpr treten nicht mehr signifikant auf; die Fourierreihe ist also spätestens bei dem $M = 2 \cdot 43 = 86$ -ten Glied abzurechnen. Außerdem ist ein früher Abbruch der Reihe ratsam, um nicht die Variation der Meerestopographie, die eigentliche Zielgröße, zu modellieren und anschließend zu eliminieren. STUBENVOLL (2000, S. 60) betrachtete den Ansatz

$$f = \sum_{k=1}^{48} (A_k \cos(kx_i) + B_k \sin(kx_i)), \quad (120)$$

wobei x_i die auf das Intervall $[0; 2\pi]$ normierten Zeitpunkte sind. Bei einer Datenlänge von einem Zyklus ergibt sich für $k=43$ ein cpr. Durch das Modell (120) ergeben sich $2 \cdot 48 = 96$ Unbekannte. Die mittleren Abweichungen können damit deutlich verringert werden (Tabelle 19).

4. Fourierreihe mit 60 Frequenzen und Erweiterung um eine Konstante

Der Fourieransatz

$$f = a_0 + \sum_{k=1}^{60} (A_k \cos(kx_i) + B_k \sin(kx_i)), \quad (121)$$

besitzt 121 unbekannte Parameter. Die mittleren Variabilitäten können mit diesem Ansatz, im Gegensatz zu (120), nochmals um 4 mm verbessert werden. Das Modell stellt einen Kompromiß zwischen Größe der Restabweichungen und Vermeidung von Aliasingeffekten dar. Der Ansatz (121) wurde von STUBENVOLL (2000, S. 61) favorisiert. Dieser Ansatz wird für den Vergleich mit dem neuen Modell (122) herangezogen.

5. Gemischte Modelle

Ein solcher Ansatz besteht aus der Kombination von analytischen Funktionen und Fourierfrequenzen (120) ohne die dominierende Frequenz 1 cpr. Die resultierenden mittleren Veränderungen sprechen jedoch eher gegen dieses Modell (STUBENVOLL 2000, S. 61).

6. Identifizierung von Frequenzen (heuristischer Ansatz)

Aus rein rechentechnischen Gründen wurden bisher lediglich „gleichabständige“ Frequenzen betrachtet. Dieses Modell besteht aus der Überlagerung von harmonischen Schwingungen mit beliebigen, ganzrationalen Frequenzen. Zwecks Ermöglichung eines Vergleiches mit (121) wurde die Definitionsmenge für die Frequenzen auf das Intervall $[0; 60]$ beschränkt. Das funktionale Modell lautet

$$f = \sum_{k=1}^M (A_k \cos(f_k x_i) + B_k \sin(f_k x_i)) \text{ mit } f_k \in [0; 60], \quad (122)$$

wobei M die Anzahl der Schwingungen und x_i die auf das Intervall $[0; 2\pi]$ normierten Daten sind. Betrachtet werden die Modelle mit $M=2, 5, 10, 20, 30$ und 40 . Die Anzahl der Parameter beträgt $3M$. In Bezugnahme auf die verwendete Rechenmethodik wird diesen Ansätzen der Buchstabe „H“ für heuristische Optimierung beigefügt.

Aus Tabelle 19 und Abb. 43 wird ersichtlich, daß die Identifizierung von Frequenzen mit Hilfe der heuristischen Rechentechnik den klassischen Ansätzen überlegen ist. Zur Modellbildung der Zeitreihe kann die Anzahl der Frequenzen wesentlich reduziert werden. Die Ansätze mit 2, 5 und 10 harmonischen Schwingungen reichen jedoch nicht aus, um alle Periodizitäten zu erfassen. Der Grund liegt hauptsächlich darin, daß die Periodizitäten teilweise keine exakten harmonischen Schwingungen sind. Mit ca. 20 Frequenzen wird das Niveau der mittleren Restabweichungen von 5.8 cm erreicht. Das entspricht etwa den mittleren Abweichungen, des Fouriermodells vom Grad 60, siehe Abb. 44. Modelle mit 30 bzw. 40 Schwingungen führen zu keiner signifikanten Verbesserung der Residuen mehr.

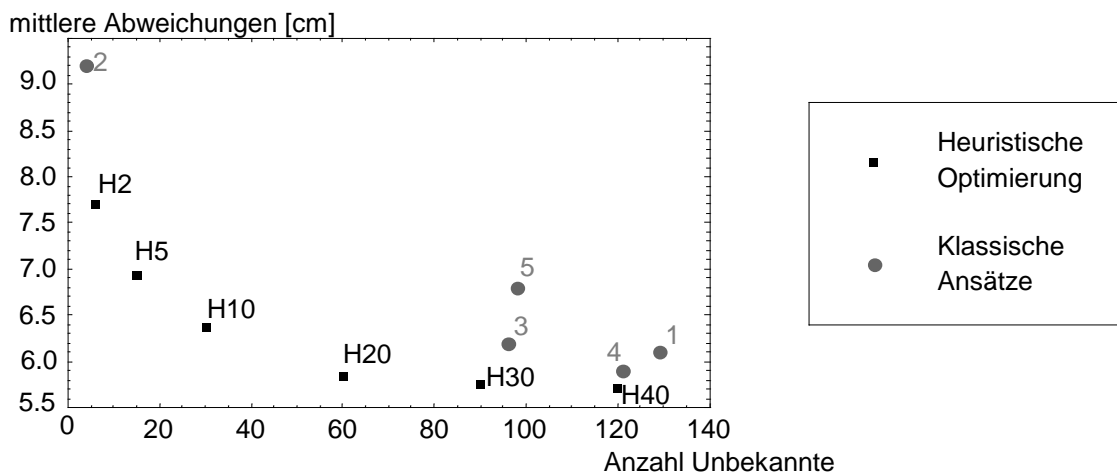


Abb. 43: Vergleich der funktionalen Modelle in Abhängigkeit der Anzahl der Parameter und resultierenden mittleren Abweichungen

Aufgrund großer Schwingungsanteile im Bereich $f=43$, führt die Fourierreihe erst mit dem 43-ten Glied zu einer relevanten Verringerung der Residuen, während die Datenkonsistenz mit Hilfe der Suche ganzrationaler Frequen-

zen schon mit wenigen Schwingungen im Modell erheblich steigert werden kann. In Abb. 44 sind die mittleren Abweichungen exemplarisch für die Zyklusdifferenz 297-296 dargestellt.

Mit Hilfe der heuristischen Optimierung wurde für alle Zyklusdifferenzen eine Frequenzsuche durchgeführt. In jeder Zyklusdifferenz konnten die mittleren Abweichungen bei 20 Modellfrequenzen um 1.5 bis 3.5 cm verringert werden und erreichten damit etwa den gleichen Gewinn an Datenkonsistenz wie die Fourierreihe bis zum Entwicklungsgrad 60. Die starken Schwankungen im a priori-Fehler zwischen aufeinander folgenden Zyklusdifferenzen wurden dabei stark reduziert. Eine größere Anzahl Modellfrequenzen brachte zwar keinen signifikanten Gewinn an Datenkonsistenz, jedoch eine weitere, leichte Glättung der a posteriori-Fehlerkurve (Abb. 45).

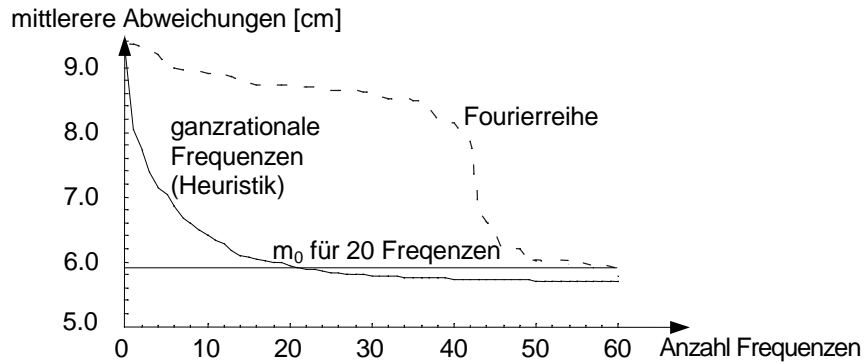


Abb. 44: Mittlere Abweichungen in Abhängigkeit der Anzahl Schwingungen am Beispiel der Zyklusdifferenz 297-296; Fourierfrequenzen: gestrichelt; heuristisch ermittelte Frequenzen: durchgezogen

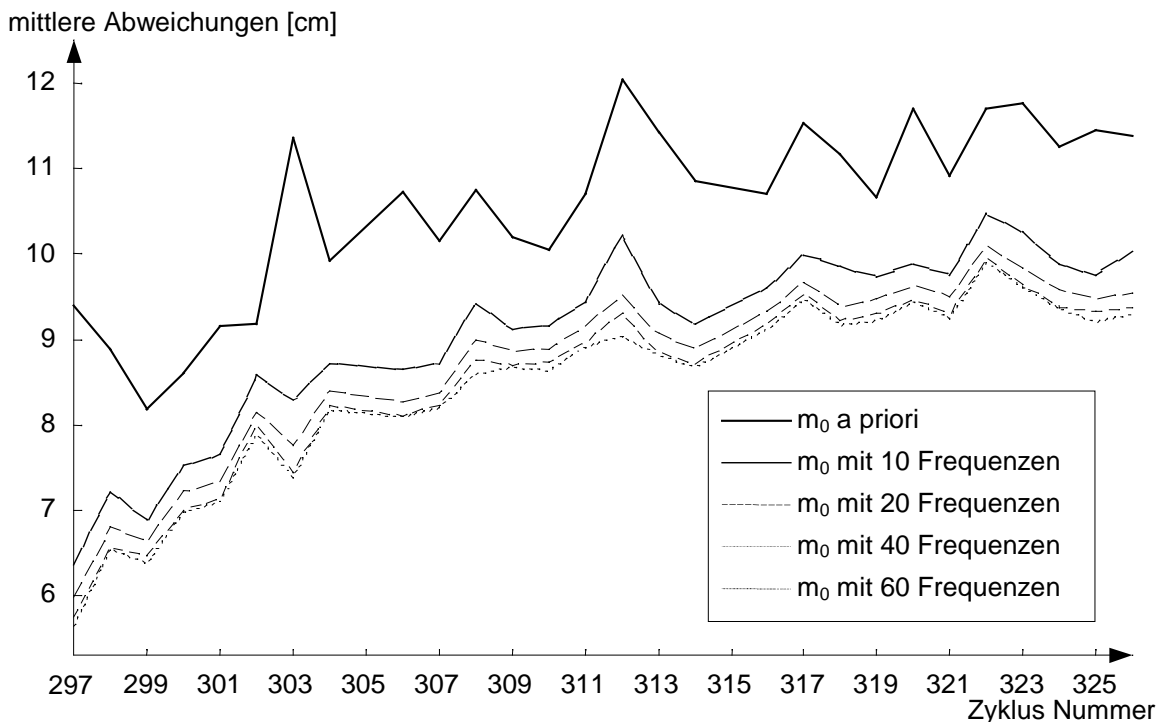


Abb. 45: Datenkonsistenz aller Zyklen: a priori-Fehler (fett) , a posteriori-Fehler für 10, 20, 40 und 60 Frequenzen

Die Restabweichungen reduzierten sich im Mittel aller Zyklen bei 10 Frequenzen um 1.5 cm und ab 20 Frequenzen um 2.0 cm gegenüber den Zyklusdifferenzen selbst, siehe Tabelle 20.

Anzahl Frequenzen	0	10	20	40	60	60 (Fourierreihe)
Mittel aus allen Zyklen [cm]	10.6	9.1	8.6	8.5	8.5	8.6
Differenz zu 0 Frequenzen [cm]	--	1.5	1.9	2.0	2.1	2.0
Gewinn an Datenkonsistenz [%]	--	14.2	22.7	23.9	25.0	23.6

Tabelle 20: Mittelwerte aus den Abweichungen aller Zyklen

Identifikation einzelner Frequenzen im Powerspektrum

Das Powerspektrum der Fourierreihe ist in Abb. 46 am Beispiel der Zyklusdifferenz 297-296 dargestellt. Durch die große Anzahl äquidistanter Frequenzen lassen sich nur schwer Aussagen über einzelne Schwingungsanteile treffen. Erkennbar ist lediglich ein breites Frequenzband um 1 cpr bei $f = 43$.

Die heuristische Suche nach 5 „optimalen“ Frequenzen (Abb. 47) identifiziert die bedeutenden Schwingungen der Bahnfehlerkorrekturen dieser Zyklusdifferenz. Alleine durch das Anbringen dieser 5 signifikanten Frequenzen kann eine enorme Modellverbesserung erreicht werden. Die Modellverbesserung der Fourierreihe mit 60 Gliedern übertrifft den Ansatz mit 5 Frequenzen lediglich um 30%. Diese Tatsache motiviert, die physikalischen Ursachen der Schwingungen zu ergründen. In anderen Zyklusdifferenzen tauchen die Frequenzen ebenfalls auf, wobei die Amplituden jedoch variieren.

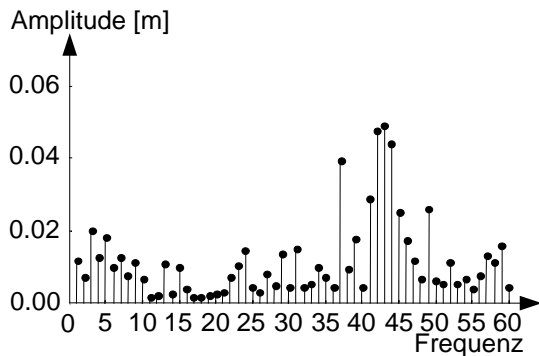


Abb. 46: Fourierreihe mit 60 Frequenzen; Zyklus 297;
 $m_0 = 5.8 \text{ cm}$, $E = 0.70 \text{ m}$

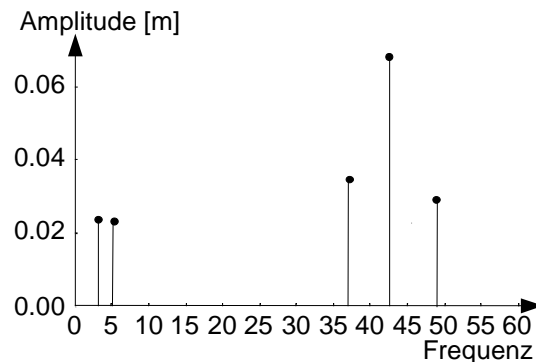


Abb. 47: Die 5 „optimalen“ Frequenzen; Zyklus 297;
 $m_0 = 6.9 \text{ cm}$; $E = 0.17 \text{ m}$

Werden 20 Frequenzen mit Hilfe der heuristischen Optimierung ermittelt, so entsteht das Powerspektrum in Abb. 48. Bei gleich großen Restabweichungen ist die Summe aller Amplitudenbeträge wesentlich geringer als bei der Fourierreihe. Das Modell der Bahnfehler besitzt damit etwa die halbe spektrale Energie. Die einzelnen Frequenzen und deren Oberschwingungen sind noch deutlich zu erkennen.

Die Suche nach 60 Frequenzen (Abb. 49) liefert zusätzliche kleine Amplituden, über die keine physikalischen Aussagen mehr getroffen werden können.

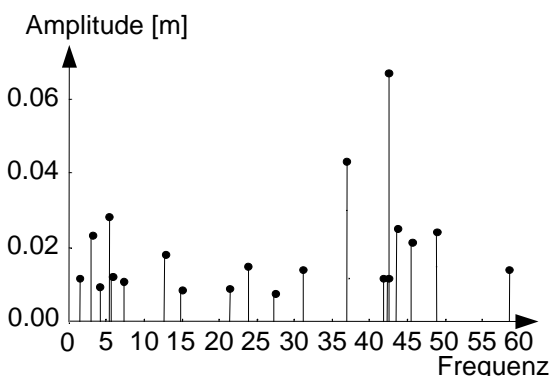


Abb. 48: heuristische Optimierung mit 20 Frequenzen;
 $m_0 = 5.8 \text{ cm}$; $E = 0.37$

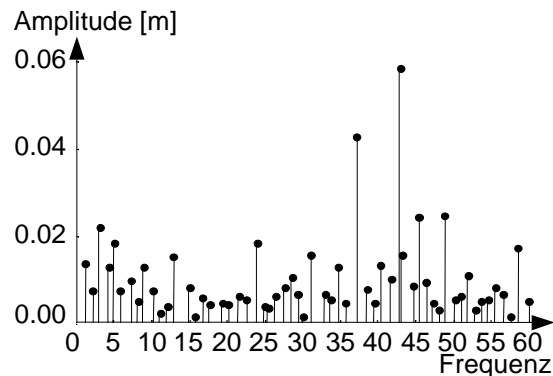


Abb. 49: heuristische Optimierung mit 60 Frequenzen;
 $m_0 = 5.7 \text{ cm}$; $E = 0.60$

Ergebnisse bei großen Datenlücken

In einigen Zyklen, wie z.B. auch im Zyklus 302, liegen größere Datenlücken vor. Daß die Berechnung von 60 Fourierfrequenzen numerisch instabil ist, belegt STUBENVOLL (2000, S. 63) und Abb. 50. Der auftretende Powerberg im Bereich der Frequenzen 35/43 cpr bis 60/43 cpr mit Amplituden von 20 cm ist nicht realistisch.

Mit Hilfe der heuristischen Optimierung konnte das Problem gelöst werden. Der Ansatz mit 20 Frequenzen (Abb. 51) zeigt Amplituden von maximal 6 cm. Dieses Spektrum beweist, daß sich die tatsächlichen Periodizitäten des Zyklus 302 nicht von den Spektren anderer Zyklen abheben. Die in allen Zyklen auftretenden Frequenzen 3, 6, 24, 28, 43 und 58/43-cpr konnten mit ihren üblichen Amplituden von 2 bis 6 cm identifiziert werden. Die

Steigerung der Datenkonsistenz ist mit dem Resultat aus der Fourierreihe etwa gleich hoch. Die spektrale Energie ist jedoch um das 5-fache geringer.

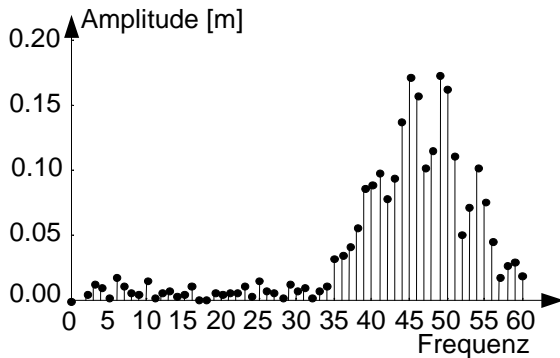


Abb. 50: Powerspektrum der Fourierreihe; Zyklus 302; 60 Frequenzen; $m_0 = 7.9$ cm; $E = 2.43$ m

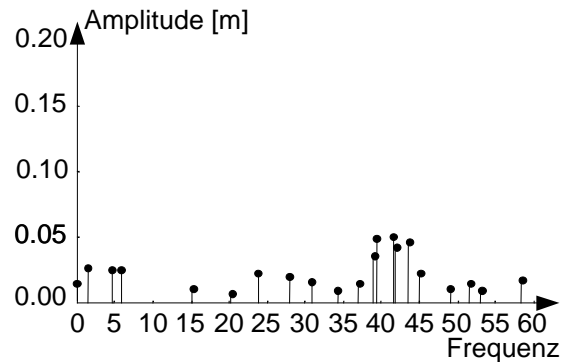


Abb. 51: Spektrum durch heuristische Optimierung; Zyklus 302; 20 Frequenzen; $m_0 = 8.1$ cm; $E = 0.48$ m

Abb. 52 zeigt das Powerspektrum des Zyklus 302 bei $M=50$ Frequenzen. Die kleinen Amplituden zeigen, daß keine numerischen Instabilitäten auftreten. Erst bei mehr als 50 Modellfrequenzen treten Sidelobes auf, die als unrealistisch einzuschätzen sind.

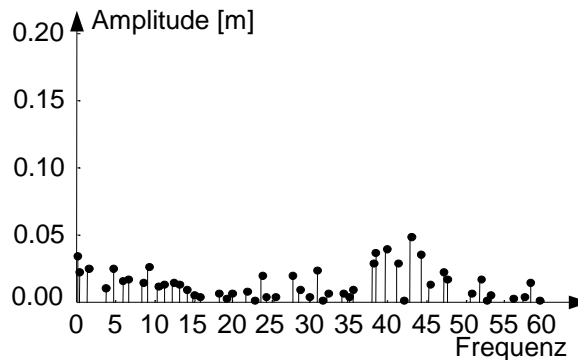


Abb. 52: Spektrum durch heuristische Optimierung Zyklus 302; 50 Frequenzen; $m_0 = 7.9$ cm; $E = 0.82$ m

Identifikation einzelner Frequenzen

Faßt man das Ziel ins Auge, Periodizitäten physikalisch zu interpretieren, ist die eindeutige Identifikation einzelner Frequenzen notwendige Voraussetzung. Zu diesem Zweck werden die gefundenen Frequenzen aller Zyklen gemeinsam ausgewertet, wobei für jeden Zyklus eine heuristische Frequenzsuche mit einer bestimmten Anzahl Schwingungen erfolgt. Das Resultat ist in Abb. 53 graphisch dargestellt. Deutlich erkennbar sind einzelne Frequenz-Gruppen. Zwischen diesen Gruppen sind Bereiche, in denen sich keine Schwingungen oder lediglich solche mit unbedeutenden Amplituden befinden, wie beispielsweise im Frequenzbereich 15 bis 20/43-cpr mit Amplituden < 1 cm.

Das Hauptaugenmerk sei auf die sich klar abzeichnenden Frequenz-Gruppen gelegt. Abbildung 54 zeigt eine Detailansicht des Spektrums im Frequenzbereich 22.5 bis 25/43-cpr. In diesem Graph ist jeder Zyklus durch genau einen Frequenzpunkt repräsentiert. Die Punktwolke legt den Schluß einer zufälligen Verteilung nahe, so daß die mittlere Frequenz und die dazugehörige mittlere Amplitude inklusive deren mittlere Fehler bestimmt werden können.

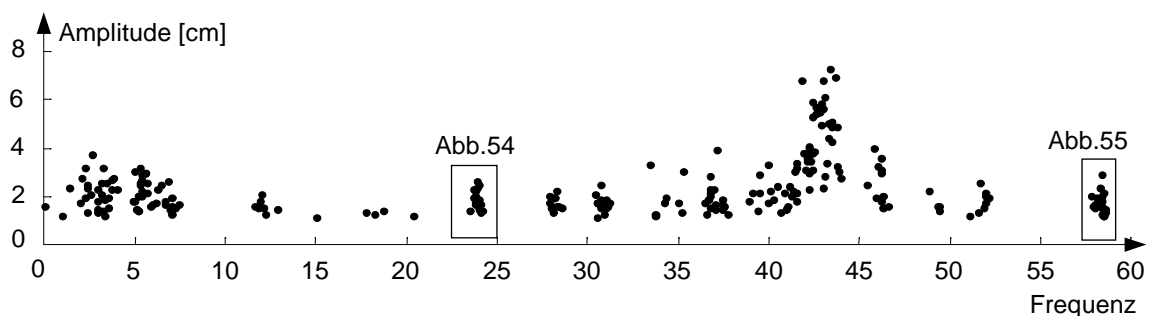


Abb. 53: Frequenzen aller Zyklen bei $M=10$ Schwingungen je Zyklus

Auch aus den Frequenzhaufen bei 3, 6, 24, 28, 30 und 58/43-cpr lassen sich mittlere Frequenzen einschließlich ihrer Amplituden, Phasenlagen und mittleren Fehler ermitteln. Unter Verwendung von 20 Modellfrequenzen zeigen sich zusätzlich noch signifikante Schwingungen bei $f = 12, 37$ und $52/43$ -cpr. Die mittleren Fehler der Frequenzen variieren stark. Während die Frequenzen 23.9 und $30.9/43$ -cpr einen mittleren Fehler von $0.17/43$ cpr haben, variieren die Frequenzen 3, 6 und $43/43$ -cpr von Zyklus zu Zyklus stärker. Daraus läßt sich vermuten, daß diese Periodizitäten zeitlich variabel sind.

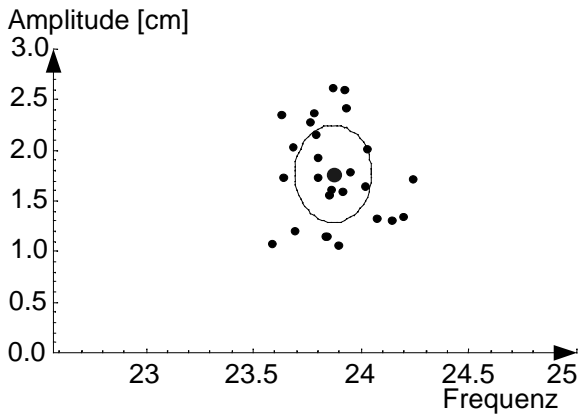


Abb. 54: Detailausschnitt des Spektrums aus Abb. 53; Mittelwert der eindeutig identifizierbaren Frequenz 23.9 und dessen Fehlerellipse.

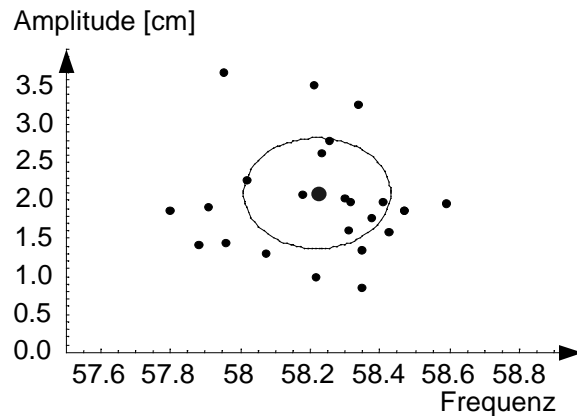


Abb. 55: Detailausschnitt des Spektrums aus Abb. 53; Mittelwert der eindeutig identifizierbaren Frequenz 58.2 und dessen Fehlerellipse

Tabelle 21 zeigt das Ergebnis der heuristischen Frequenzanalyse. Erstmals gelingt es, die Frequenzen mit Nachkommastellen anzugeben. Auffällig ist die Frequenzfolge 3, 6, 12 und $24/43$ -cpr. Die Frequenz $3/43$ -cpr entspricht einer Schwingung pro Tag, 6, 12 und $24/43$ -cpr entsprechen einer Schwingung innerhalb von 12, 6 und 3 Stunden. Hierbei handelt sich vermutlich um Oberschwingungen der Tagesfrequenz. Ein nicht sinusförmiges, periodisches Signal der Tagesfrequenz könnte die Ursache sein. Sowohl die Bahnfehler des Satelliten, als auch das Tidenmodell sollten daraufhin überprüft werden.

Eindeutig erkennbar ist auch die Frequenz eines Satellitenumlaufs von $43/43$ -cpr und dessen großer Amplitude von etwa 4 cm. Die Interpretation der übrigen Frequenzen muß den Bahntheoretikern bzw. den Ozeanographen überlassen werden.

Frequenzen [$1/43$ cpr]		Amplituden [cm]	
Frequenz	mittlerer Fehler	Amplitude	mittlerer Fehler
3.0	± 0.11	2.1	± 0.12
5.9	± 0.14	2.1	± 0.10
12.0	± 0.08	1.4	± 0.09
23.9	± 0.03	1.8	± 0.09
28.2	± 0.07	1.7	± 0.09
30.8	± 0.04	1.6	± 0.06
37.0	± 0.09	1.9	± 0.15
43.0	± 0.10	4.3	± 0.21
58.2	± 0.04	2.0	± 0.15

Tabelle 21: gemittelte Frequenzen, die in allen Zyklen auftauchen und deren mittlere Fehler

Tabelle 22 stellt die Variabilität der Frequenzen und Amplituden eines Zyklus dar (entspricht dem mittleren Fehler der Einzelbeobachtung). Während die Frequenzen lediglich um 0.2 bis $0.8/43$ -cpr variieren, sind die Amplituden großen Schwankungen bis zu 1.2 cm unterworfen.

Frequenzen [1/43 cpr]		Amplituden [cm]	
Frequenz	mittlerer Fehler	Amplitude	mittlerer Fehler
3.0	±0.6	2.1	±0.6
5.9	±0.8	2.1	±0.5
12.0	±0.3	1.4	±0.4
23.9	±0.2	1.8	±0.5
28.2	±0.2	1.7	±0.3
30.8	±0.2	1.6	±0.2
37.0	±0.4	1.9	±0.6
43.0	±0.6	4.3	±1.2
58.2	±0.2	2.0	±0.7

Tabelle 22: Frequenzen, die in allen Zyklen auftauchen und die mittleren Fehler der Frequenzen eines Zyklus

Spektrale Energie

Die spektrale Energie wurde gemäß (116) als die Summe aller Amplituden eines Modells definiert. Verglichen werden zwei Modelle, deren Residuenquadratsumme annähernd gleich groß ist: Die Fourierreihe mit 60 Frequenzen und die mit Hilfe der heuristischen Optimierung gewonnenen 20 „optimalen“ Frequenzen.

In Abb. 56 ist die spektrale Energie der beiden Modelle für alle Zyklen graphisch dargestellt. Es fällt auf, daß das Fouriermodell meist den doppelten Wert an spektraler Energie liefert. Daraus kann gefolgert werden, daß sich die Schwingungen der Fourierreihe teilweise gegenseitig aufheben.

Die herausragenden Peaks der Fourierreihe in den Zyklen 302 und 312 sind das Ergebnis numerischer Instabilitäten, begründet durch größere Datenlücken (siehe auch Abb. 50). Im 20-Frequenz-Modell zeigen sich bei diesen beiden Zyklen ebenfalls etwas größere Amplituden. Eine Erklärung dafür könnte die eigentliche Ursache der Datenlücken sein: In diesen Zyklen wurden Bahnmanöver durchgeführt. Eventuell wurden Meßdaten von der ESA mit dem Qualitätsflag „gut“ ausgewiesen und daher in die Auswertung einbezogen, obwohl der Satellit noch nicht den geforderten Orbit erreicht hatte.

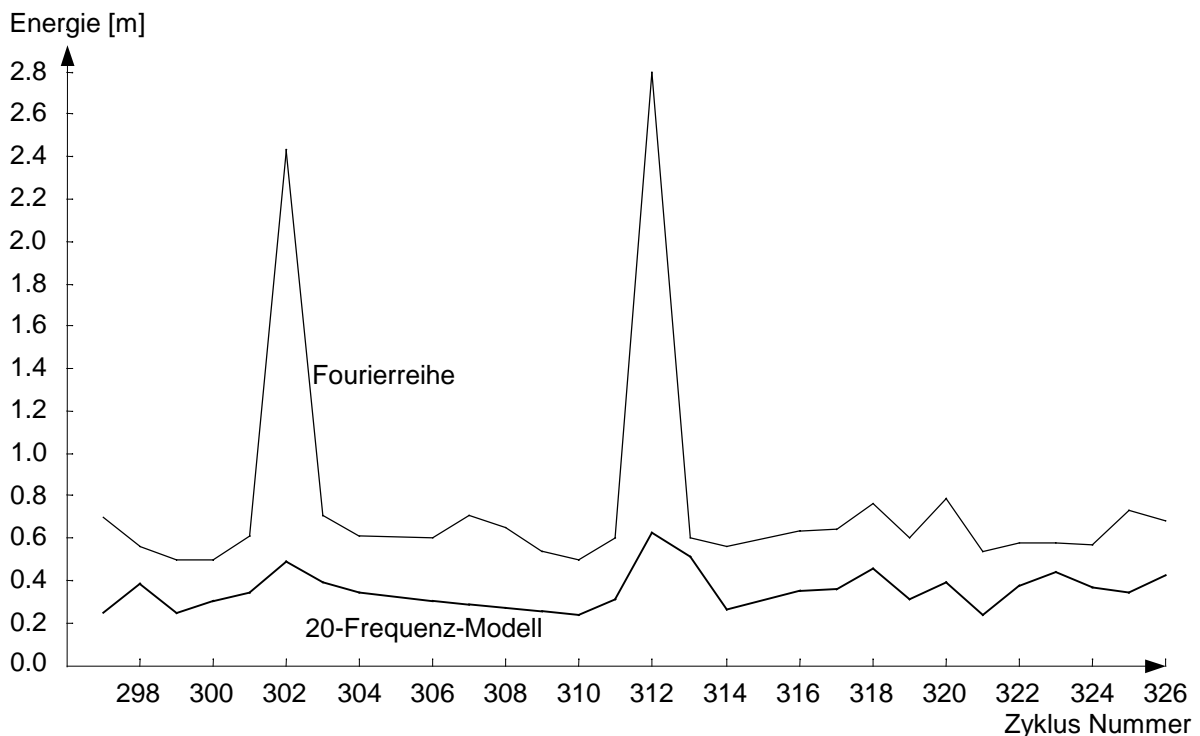


Abb. 56: Spektrale Energie des Fouriermodells (dünne Linie) und des Modells mit 20 ganzrationalen Frequenzen (fette Linie)

7.4 Ergebnisse der heuristischen Optimierung (Zeitreihenschritt)

Im sogenannten Zeitreihenschritt werden die von den variablen Bahnfehlern befreiten Altimeterdaten auf signifikante Ozeansignale hin untersucht. Für jeden Punkt $P(\phi, \lambda)$ wird eine Zeitreihe aufgestellt. Die verfügbaren Daten enthalten insgesamt 25000 Zeitreihen mit maximal 29 Beobachtungen.

Es wurden die zwei funktionalen Modelle (123) und (124) angesetzt. Das erste Modell besteht aus einer harmonischen Schwingung mit einer reellen Frequenz innerhalb des Intervalls 0 bis 10. Die Suche nach höheren Frequenzen ist aufgrund der kurzen Zeitreihen mit 20 bis 29 Beobachtungen nicht zweckmäßig. Das zweite Modell unterscheidet sich vom ersten lediglich darin, daß zwei Schwingungen gesucht werden. Modelle mit mehr als zwei Frequenzen würden aufgrund der geringen Anzahl Beobachtungen zu einer Überparametrisierung führen und wurden daher nicht betrachtet.

$$\eta_{AL} = a_0 + A_k \cos(f_k x_i) + B_k \sin(f_k x_i) \quad \text{mit } f_k \in [0; 10], \quad (123)$$

$$\eta_{AL} = a_0 + \sum_{k=1}^2 (A_k \cos(f_k x_i) + B_k \sin(f_k x_i)) \quad \text{mit } f_k \in [0; 10], \quad (124)$$

Ziel der Analyse war die Untersuchung der Daten auf Residualtiden- und Strömungssignale. Damit sollen Modellfehler des verwendeten Ozeangezeitenmodells (CSR3.0) eliminiert werden. Die wichtigsten Partialtiden sind in der Tabelle 23 aufgelistet. Während die M2 Mondtide die größte Amplitude besitzt, nimmt die Bedeutung der einzelnen Partialtiden in der Tabelle nach unten hin ab. Deren Perioden, die zwischen 12 und 42 Stunden liegen, können in der Zeitreihe jedoch nicht beobachtet werden. Aufgrund der Aufzeichnungsrate im Abstand von 3 Tagen zwischen zwei aufeinander folgenden Beobachtungen, wirken sich statt dessen die Aliasingperioden entsprechend Tabelle 23 aus. Die halbtägige Haupt-Sonnentide ist nicht beobachtbar, da sie exakt sechsmal innerhalb von zwei Aufzeichnungen des Sensors schwingt. Die anderen Partialtiden bilden Aliasingfrequenzen innerhalb des analysierbaren Spektrums, da sie weniger als zehnmal innerhalb des Beobachtungszeitraumes von 90 Tagen schwingen.

Partialtide	Entstehung	Frequenz [°/h]	Aliasingperiode [Tage]	Aliasingfrequenz [1/90 Tage ⁻¹]	Beobachtbarkeit
M2	halbtägige Haupt-Mondtide	28.98	14.76	6.09	siehe Abb. 57
K1	eintägige Haupt-Deklinationstide	15.04	365.24	0.25	¼ Periode
S2	halbtägige Haupt-Sonnentide	30.00	∞	∞	nicht beobachtbar
O1	eintägige Haupt-Mondtide	13.94	14.19	6.34	siehe Abb. 57
P1	eintägige Haupt-Sonnentide	14.96	365.24	0.25	¼ Periode
N2	gr. elliptische Tide 1. Ordnung zu M2	8.44	9.61	9.36	siehe Abb. 57
Mf	Deklinationstide zur konst. Mondtide	1.10	13.66	6.59	siehe Abb. 57
K2	halbtägige Deklinationstide zu M2	30.08	12.6	0.49	½ Periode

Tabelle 23: Übersicht über die wichtigsten Partialtiden und ihrer Aliasingperioden mit ERS-1 (43/3)

Mit Hilfe ganzzahliger Frequenzen gestaltet sich die Identifikation einzelner Partialtiden äußerst schwierig. Es liegen lediglich die Frequenzzahlen 1, 2, 3, ..., 10 vor, so daß die Interpretation des Resultates gewagt erscheint. Vor allem das zu erwartende jährliche Signal mit der Frequenzzahl 0.25 kann nicht gefiltert werden. STUBENVOLL (2000, S. 67) behalf sich damit, den Jahresgang als linearen Trend zu modellieren. Tatsächlich aber besteht das Signal wegen der Länge des Beobachtungszeitraumes von 3 Monaten aus einer viertel Periode, die durchaus nicht linear verläuft.

Für jede der 25000 Zeitreihen wurde eine heuristische Frequenzsuche mit den Modellen (123) und (124) durchgeführt. Alle gefundenen Frequenzen wurden auf ihre globale Häufigkeit hin untersucht. Dabei ergab sich keineswegs eine gleichförmige Verteilung der Frequenzen. Die Abbildungen 57 und 58 belegen, daß der Frequenzbereich zwischen 0 und 2 wesentlich häufiger vertreten ist. Vor allem tritt ein Peak bei der Frequenz 0.25 hervor, die einer einjährigen Periode entspricht. Offensichtlich handelt es sich um saisonale Signale der Ozeane. Gleichzeitig

stimmt diese Periode mit den Aliasingfrequenzen der Partialtiden K1 und P1 überein. Sie könnten ebenfalls mitverantwortlich für das signifikante Auftreten der Jahresfrequenz sein.

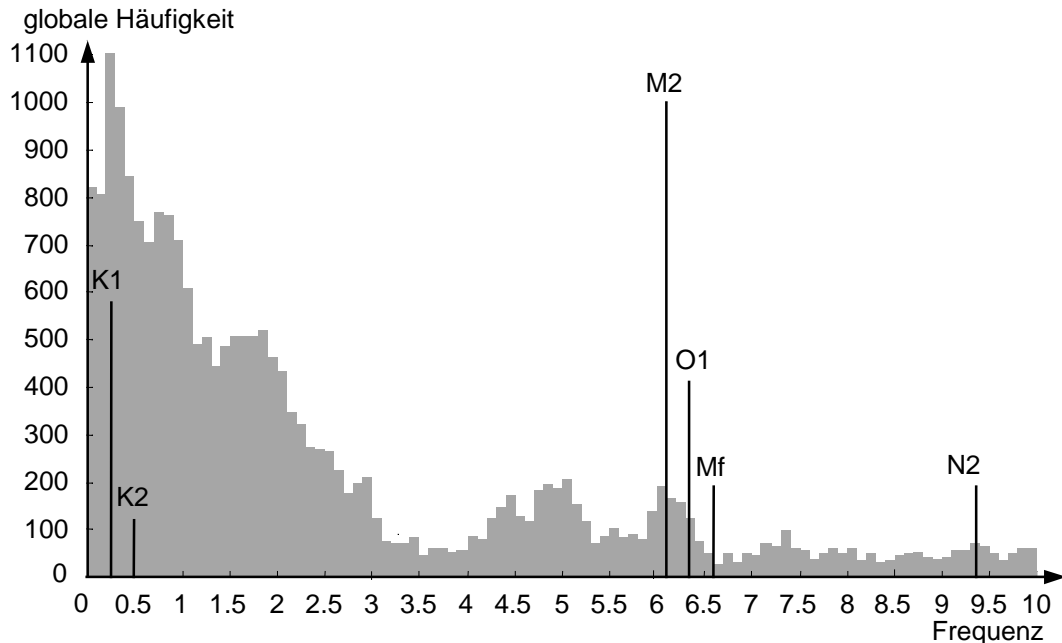


Abb. 57: Globales Auftreten der Frequenzen aus Modell (123) sowie die wichtigsten Partialtiden (die Höhe ist proportional zu ihrer Amplitude)

Die mit Abstand größte Partialtide ist die halbtägige Haupt-Mondtide M2. Deren etwa 15-tägige Aliasingperiode entspricht der Frequenzzahl 6.09. Genau diese Frequenz tritt signifikant häufig auf, so daß ein Fehler des Tidenmodells nicht auszuschließen ist. Detaillierte Aussagen können getroffen werden, wenn das Auftreten der Frequenz in Abhängigkeit von Länge und Breite untersucht wird. Es fällt dabei auf, daß die Frequenz vor allem im Küstenbereich vorkommt. Da das Gezeitenmodell im Flachwasserbereich < 2000m unzuverlässig ist, wird der Verdacht einer M2-Residualtide erhärtet.

Bei den nächst größeren Partialtiden O1 und N2 treten noch leicht erhöhte Häufigkeiten auf, die keine gesicherte Aussage über vorhandene Residualtiden zulassen. Kleinere Partialtiden von unter 19% von M2 zeigen sich bei der Häufigkeitsverteilung nicht mehr.

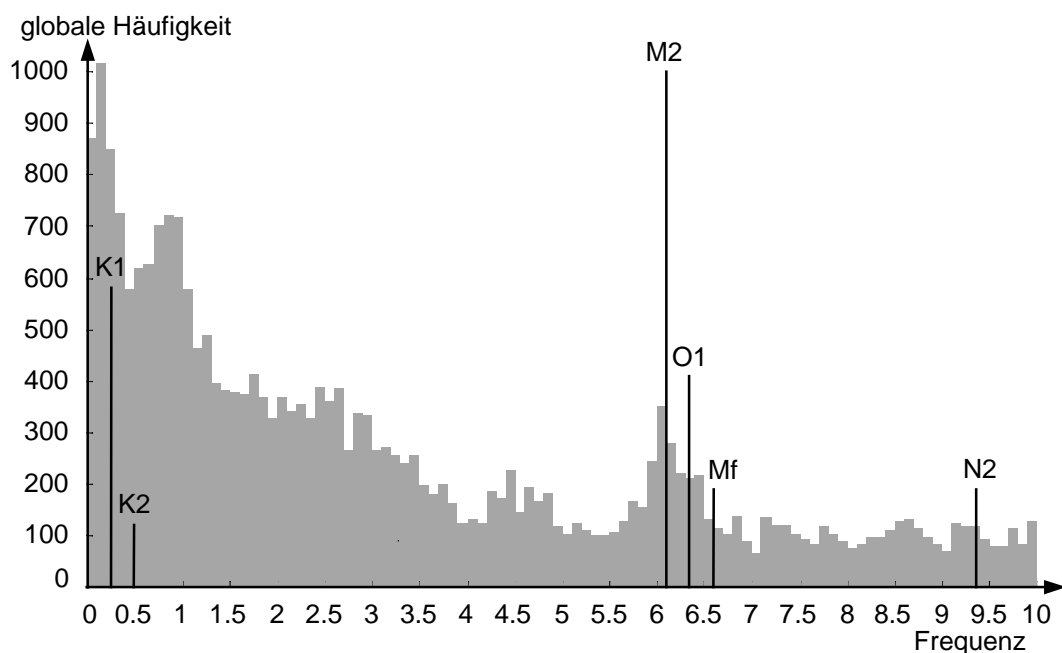


Abb. 58: Globales Auftreten der Frequenzen aus dem Modell mit zwei Schwingungen (124); sowie die wichtigsten Partialtiden (die Höhe ist proportional zu ihrer Amplitude)

Abb. 59 zeigt die Häufigkeitsverteilung der gefundenen Amplituden des Modells (124). Den Hauptanteil nehmen Amplituden zwischen 2 und 5 cm ein. Geographisch liegen diese Amplituden überwiegend auf den offenen Ozeanen, während die größeren Amplituden verstärkt in Küstennähe auftreten.

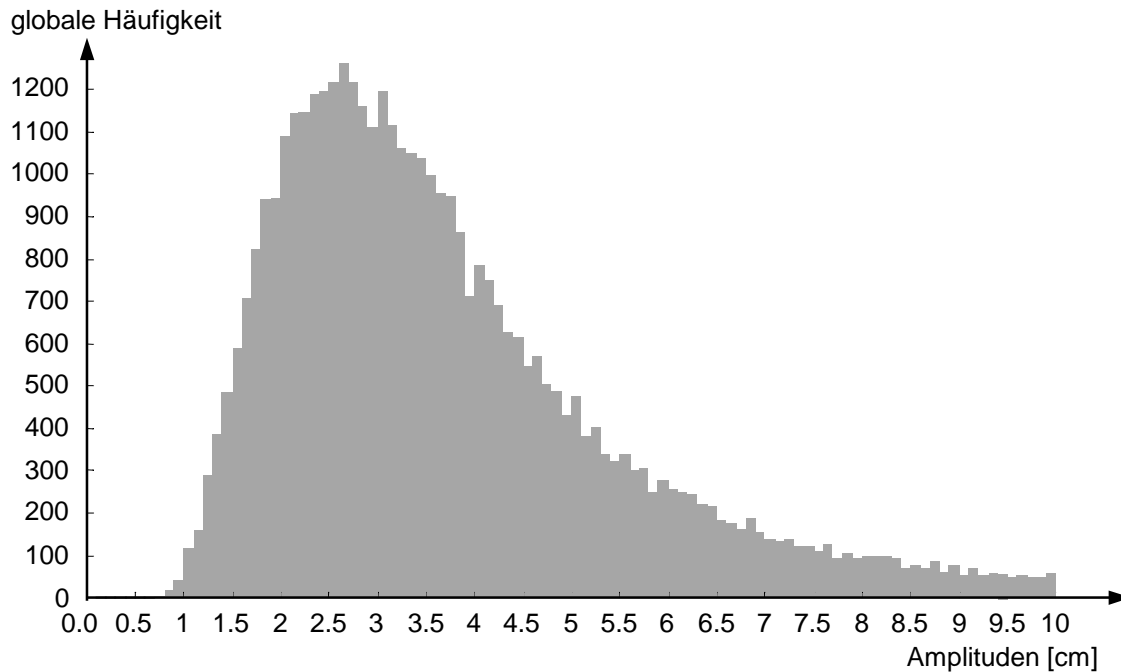


Abb. 59: Globale Häufigkeitsverteilung der Amplituden des Modells (124)

Nach Abzug der gefundenen Frequenzen von den Daten ergeben sich Variabilitäten von ± 4.3 cm für das Modell mit einer harmonischen Schwingung und ± 3.6 cm bei zwei Modellfrequenzen. Obwohl kein Trend angesetzt wurde, liegen die mittleren Abweichungen damit unter dem Niveau des ganzzahligen Frequenzmodells mit zusätzlichem linearen Trend.

8 Zusammenfassung

Ziel der Arbeit ist der Einsatz globaler Optimierungsverfahren in der Geodäsie und die daraus resultierende Ausweitung der funktionalen Modelle. Um die Notwendigkeit globaler Verfahren zu motivieren, bedarf es eines tiefen Einblicks in die klassische Ausgleichung. Häufig wird in der Ausgleichungsrechnung lediglich eine durch Näherungswerte vorgegebene Lösung entlang des Gradienten geringfügig korrigiert. Wegen der vergleichbar „winzigen“ Verschiebung von Unbekannten spricht man auch von lokaler Optimierung. Die lokalen Optimierungsverfahren versagen, wenn keine Näherungslösung verfügbar ist und eine nichtlineare, multimodale Zielfunktion vorliegt. Von einem multimodalen Problem kann gesprochen werden, wenn mehrere lokale Minima existieren. In diesem Fall liefern die Gradientenverfahren eine von den Startwerten abhängige, unter Umständen suboptimale Lösung. In der Regel ist jedoch nur die globale Lösung als absolutes Minimum der Zielfunktion von Bedeutung. Für Probleme dieser Klasse muß deshalb eine globale Minimumsuche durchgeführt werden. Die globalen Optimierungsverfahren sind in der Literatur auch unter den Namen heuristische, probabilistische oder randomisierte Verfahren bekannt, da die Auswahl der Punkte, an denen Funktionswerte berechnet werden, zufällig erfolgt. Bei der lokalen Optimierung erübrigt sich die zufällige Suche nach Punkten, weil ein Vektor mit den Näherungswerten schon vorgegeben sein muß. Kombiniert man lokale und globale Optimierung und bringt alle verfügbaren a priori-Informationen ein, so läßt sich ein Optimierungssystem aufbauen, daß für eine sehr große Problemklasse brauchbare Resultate liefert.

Es lassen sich viele Beispiele für globale Optimierungsprobleme in der Geodäsie finden. Üblicherweise existieren Meßwerte und ein entsprechendes Modell, das die physikalischen Zusammenhänge über die Beobachtungen mit Hilfe von Funktionen beschreibt. Durch die Minimierung einer Norm (in der Regel die L_2 -Norm) ergibt sich eine Zielfunktion, die je nach Wahl des funktionalen Modells mehr oder weniger kompliziert ist. Im einfachsten Fall handelt es sich um eine konvexe Zielfunktion, deren Minimum sich leicht berechnen läßt. Trigonometrische oder logarithmische Modellfunktionen, sowie hochgradige Polynome führen zu multimodalen Zielfunktionen. Sobald keine ausreichenden Näherungswerte vorhanden sind, ist eine Linearisierung sinnlos und die lokale Optimierung nicht mehr anwendbar.

Ein Beispiel für ein globales Optimierungsproblem ist die Spektralanalyse von Zeitreihen für unbekannte Frequenzen. Im klassischen Fouriermodell legt man die Frequenzen von vorne herein fest und berechnet lediglich die Amplituden. Die Festlegung auf bestimmte Frequenzen begründet sich in der Geradlinigkeit der Berechnung. Sind die Frequenzen bekannt, bleibt für die Bestimmung der übrigen Unbekannten lediglich ein lineares Problem, das zur Gruppe der geschlossenen Lösungen gezählt werden kann. Werden die Frequenzen jedoch als unbekannte Parameter betrachtet, ergibt sich ein „hochgradig“ nichtlineares Problem. Auf dieses Problem ist nur ein globales Lösungsverfahren erfolgreich anwendbar.

Der Aufbau der heuristischen Spektralanalyse beginnt mit der Festlegung einer bestimmten Anzahl harmonischer Schwingungen und der Begrenzung des Definitionsbereichs der unbekanntenen Frequenzen. Die Wahl der Intervallgrenzen ist beliebig, jedoch nur zwischen 0 und der Nyquist-Frequenz sinnvoll. Anschließend wird eine Kombination von Frequenzen mit heuristischen Methoden konstruiert. Nach der Konstruktion liegt ein mit Werten gefüllter Unbekanntenvektor vor. Es erfolgt die Bewertung des Vektors durch Einsetzen in die Zielfunktion und Berechnung der Qualität. Daraufhin wird mit Hilfe eines Ersetzungsoperators entschieden, ob der konstruierte Vektor verworfen, oder aber der Liste gespeicherter Vektoren hinzugefügt wird. Die Schritte Konstruktion, Bewertung und Ersetzung werden solange wiederholt, bis sich ein Satz mit optimal auf die Daten angepaßten Frequenzen ergibt. Die Bestimmung der Amplituden und Perioden ist ein lineares Problem und daher geschlossen möglich.

Das Modell mit nicht postulierten Frequenzen wird auf künstlich erzeugte Testdaten angewendet. Die Testdatensätze enthalten eine diskrete Zeitreihe mit sich überlagernden, harmonischen Schwingungen. Mit Hilfe des neu eingeführten Modells lassen sich die Frequenzen der Schwingungen wieder exakt aus den vorliegenden Daten extrahieren. Die Lösung der heuristischen Optimierung stimmt mit den Parametern, die zur Generierung der Testdaten dienten, exakt überein. Anhand der erzeugten Daten zeigt sich, daß die globale Lösung des nichtlinearen Problems gefunden wurde. Die Effizienz eines Verfahrens hängt im wesentlichen von der Einbindung lokaler Verfahren ab. Eine physikalisch begründete Anzahl an Modellfrequenzen läßt sich bei Hinzunahme einzelner Schwingungen durch die signifikante Änderung des Funktionswertes der Zielfunktion abschätzen.

Das Modell mit unbekanntenen Frequenzen wurde auf geodätisches Datenmaterial angewendet. Trotz einer großen Dateninkonsistenz der verwendeten Altimeterdaten, lassen sich einige Periodizitäten identifizieren. An die Stelle von 2×60 Fouriergliedern treten 20 optimierte Frequenzen. Etwa die Hälfte dieser Frequenzen konnte in allen Zyklen des Satelliten identifiziert werden. Aufgrund der geringen Anzahl an Frequenzen bleibt die Berechnung der Amplituden auch beim Vorhandensein großer Datenlücken stabil. Es zeigen sich minimale Restklaffungen mit nur

wenigen Modellparametern. Diese Indizien weisen darauf hin, daß es sich bei dem Modell um einen funktionalen Zusammenhang handelt, der die physikalisch verursachten Schwingungen direkt beschreibt. Eine physikalisch begründete Interpretation einzelner Frequenzen wird ermöglicht.

Ausblick

Der Einsatz globaler Optimierungsverfahren für geodätische Zwecke steht erst am Anfang. Während der Entwicklung des in dieser Arbeit vorgestellten Frequenzmodells zeigte sich, daß es in der Geodäsie viele weitere funktionale Modellzusammenhänge gibt, deren Berechnung problematisch ist.

Erfolgsversprechend wäre die Ausdehnung der Frequenzidentifikation auf höhere Dimensionen. Beispielsweise ließen sich die auftretenden Periodizitäten der Polbewegung modellieren. Auch besteht die Möglichkeit, digitale Geländemodelle mit Hilfe einer zweidimensionalen Frequenzanalyse darzustellen. Gerade im Bereich zweidimensionaler Anwendungen ließe sich mit neuen Modellen eine Vielzahl von Parametern zur Beschreibung einer Struktur einsparen. Äquivalent zu den Fourierkoeffizienten kommen beispielsweise die hochgradig entwickelten Kugelfunktionskoeffizienten zur Beschreibung des Gravitationspotentials der Erde einer Überparametrisierung gleich. Eine physikalische Deutung der Kugelfunktionskoeffizienten ab dem 3. Grad ist nicht möglich.

Nicht immer sind Periodizitäten in Zeitreihen reine harmonische Schwingungen. Oftmals sind sie zeitabhängig und lassen sich besser mit Hinzunahme von Exponentialfunktionen beschreiben, die auch unter dem Namen Wavelets bekannt sind. Aus der Überlagerung verschiedener Wavelets resultiert eine nichtlineare, multimodale Zielfunktionen. Die Berechnung bestmöglich angepaßter Wavelets wäre mit Hilfe globaler Optimierungsverfahren möglich.

Durch die Einführung der neuen Modelle werden die globalen Optimierungsverfahren in der geodätischen Forschung und Lehre an Bedeutung gewinnen.

Literaturverzeichnis

- ALBERTZ, J. (1989): „Evolution und Evolutionsstrategien in Biologie, Technik und Gesellschaft“, Schriftenreihe der Freien Akademie, Band 9, S. 9 - 24
- APEL, M.; TEUBER, S. (1996): „Rechnergestützte Routenoptimierung mittels Simulated Annealing und Threshold Accepting“, FB Versorgungstechnik, FH Braunschweig/Wolfenbüttel
- BRAUN, H. (1997): „Neuronale Netze: Optimierung durch Lernen und Evolution“, Springer-Verlag, Berlin
- BJÖRCK A.; GERMUND, D. (1972): „Numerische Methoden“, R. Oldenbourg Verlag, München, Wien
- BRONSTEIN, I.; SEMENDJAJEW K. (1989): „Taschenbuch der Mathematik“, Teubner Verlagsgesellschaft, Leipzig
- BUCHBERGER B. (1965): „Ein Algorithmus zum Auffinden der Basiselemente des Restklassenringes nach einem nulldimensionalen Polynomideal“, Dissertation der Universität Innsbruck
- CASPARY, W.; LOHSE, P.; VAN MIERLO, J. (1991): „Non-Linear Adjustment“, in: National Report of Germany on the Geodetic Activities in the years 1997 - 1991“Handbook of Numerical Analysis, Amsterdam, Deutsche Geodätische Kommission, Reihe B, Nr.294, München, S. 131 - 133
- DUECK, G.; SCHEUER, T. (1990): „General Purpose Optimization Algorithm Appearing Superior to Simulated Annealing“, Journal of Computational Physics, Band 90, Heft 1, S. 161-175
- FRIEDRICH, W. (1999): „Inversion geophysikalischer Daten“, Online Vorlesungsskript des Institutes für Geophysik, Universität Stuttgart, S. 3 (Mathematische Grundlagen), im Internet veröffentlicht unter der Adresse: <http://www.geophys.uni-stuttgart.de/skripten/inv/node3.html>
- GAUß, C. F. (1809): „Theoria motus corporum coelestium in sectionibus conicis solem ambientium“
- GRAFAREND, E. W.; SCHAFFRIN, B. (1989): „The geometry of nonlinear adjustment -The Planar Trisection Problem“, Festschrift für Torben Krarup, Geodaetisk Institute, Kobenhagen, No.58, S. 149-172
- GRAFAREND, E. W.; SCHAFFRIN, B. (1990): „The planar Trisection Problem and the Impact of Curvature on non-linear least-squares Estimation“, Computational Statistics & Data Analysis 12, S. 187-199, North-Holland
- GRAFAREND, E. W.; SCHAFFRIN, B. (1993): „Ausgleichung in linearen Modellen“, Wissenschaftsverlag, Mannheim, Leipzig, Wien Zürich
- GRAFAREND, E. W.; LOHSE, P. (1991): „The minimal distance mapping of topographic surface onto the (reference) ellipsoid of revolution“, in manuscripta geodaetica Vol.16: S. 92-110, Springer-Verlag
- GRONEK, M. (1997): „Pseudo-Zufallszahlengeneratoren und ihr Einfluß auf das Verhalten von Evolutionsstrategien“, Universität Dortmund
- GUSE, F. (1996): „Auswertung von Messungen mit Optimierungsverfahren - demonstriert an Interferometrie und Ellipsometrie“, (Diss.) Schriftenreihe Berichte der Technischen Optik, Nr.33, Berlin
- HESSER, J. (1992): „Parameteroptimierung bei genetischen Algorithmen“, (Diss.) Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg
- KOSMOL, P. (1989): „Methoden zur numerischen Behandlung nichtlinearer Gleichungen und Optimierungsaufgaben“, B. G. Teubner Verlag, Stuttgart
- KRABS, W. (1983): „Einführung in die lineare und nichtlineare Optimierung für Ingenieure“, B. G. Teubner Verlag, Stuttgart
- KRUEL, T. (1992): „Analyse nichtlinearer Systeme, Chaos und Rauschen“, (Diss.) Julius-Maximilians-Universität Würzburg
- LAARHOVEN, P.J.M. van; AARTS, J.H. (1988): „Simulated Annealing: Theory and Applications“, D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, Netherlands
- LEVENBERG, K. (1944): „A method for the solution for certain nonlinear problems in least-squares“, The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics Vol. 2, S. 164 - 168

- LINNIK, J.W. (1961): „Methode der kleinsten Quadrate in moderner Darstellung“, VEB, Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin
- LOHSE, P. (1994): „Ausgleichsrechnung in nichtlinearen Modellen“, (Diss.) Deutsche Geodätische Kommission, Reihe C, Nr.429, München
- LOUIS, K. (1989): „Inverse und schlecht gestellte Probleme“, Teubner Verlag, Stuttgart
- MAUTZ, R. (1999): „Solving non-linear Adjustment Problems by heuristic Optimisation“, Proceedings of the Third Turkish-German Joint Geodetic Days, Istanbul, Vol.2, S. 791 - 797
- MOSTELLER, F. (1973): „Periodicities and Moving Averages“, in: Statistics by Example, Reading, Massachusetts, Addison-Wesley Verlag
- NOLTE, A. (1997): „Finite Time Bounds for Simulated Annealing“, (Diss.) Hundt Druck GmbH, Köln
- OTTO, T. (1994): „Reiselust, Travelling Salesman - eine neue Strategie für eine alte Aufgabe“, in: Magazin für Computer und Technik, Heft 1, Verlag Heinz Heise GmbH & Co KG, Hannover
- PRESS, W. H. (1992): „Numerical recipes in C“, Chapter 10: Minimization of Functions, Cambridge University, Cambridge.
- RECHENBERG, I. (1989): „Evolutionsstrategie - Optimierung nach Prinzipien der biologischen Evolution“, in: Schriftenreihe der Freien Akademie, Band 9, S. 25 - 72
- SALMON, G. (1888): „Analytische Geometrie der Kegelschnitte“, B. G. Teubner Verlag Leipzig.
- SCHLITTGEN, R.; B. H.J. STREITBERG (1984): „Zeitreihenanalyse“, Kapitel 1: Beschreibung von Zeitreihen, R. Oldenbourg Verlag München Wien.
- SCHWEFEL, H. (1975): „Evolutionsstrategie und numerische Optimierung“, (Diss.), Berlin
- SCHWEFEL, H. (1989): „Natürliche Intelligenz in evolutionären Systemen“, Schriftenreihe der Freien Akademie, Band 9, S. 151 - 164
- SCHWEHM, M. (1996): „Globale Optimierung mit massiv parallelen genetischen Algorithmen“, (Diss.), Universität Erlangen-Nürnberg
- SCHWETLICK, H. (1979): „Numerische Lösung nichtlinearer Gleichungen“, R. Oldenbourg Verlag, München, Wien
- SINGER, P. (1995): „Die Berechnung von Minimalflächen, Seifenblasen, Membrane und Pneus aus geodätischer Sicht“, (Diss.), Deutsche Geodätische Kommission, Reihe C, Nr. 448, München
- STUBENVOLL, R. (1995): „Helmerttransformation zwischen terrestrischen und GPS-Netzen und die Bestimmung relativer Geoidundulation“, Technische Universität Berlin
- STUBENVOLL, R. (2000): „Alongtrack-/Crossover-Verfahren und Spektralanalyse zur Trennung geodätisch-geophysikalischer Signale in Altimeterdaten“, (Diss.), Deutsche Geodätische Kommission, Reihe C, Nr. 524, München
- TEUNISSEN, P. (1990): „Nonlinear least squares“, in manuscripta geodaetica Vol.15: S.137-150, Springer-Verlag
- TÖRN, A.; ŽILINSKAS, A. (1988): „Global Optimization“, Kapitel 4, in: Lecture Notes in Computer Science, Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York
- UMLAND, T. (1996): „Über heuristische Verfahren zur Lösung des Färbungsproblems“, VDI-Verlag, Fortschrittberichte Reihe 10: Informatik / Kommunikationstechnik, Nr. 411, Düsseldorf
- VAN DER WAERDEN, B. L. (1967, S. 163 - 166): „Algebra – zweiter Teil“, Heidelberger Taschenbücher Band 23, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York
- XU G. (1992): „Spectral Analysis and Geopotential Determination“, (Diss.), Deutsche Geodätische Kommission, Reihe C, Nr. 397, München
- ZURMÜHL, R. (1965): „Praktische Mathematik für Ingenieure und Physiker“, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, New York

Symbolverzeichnis

Mengen

B	boolesche Zahlen $\{0,1\}$
N	natürliche Zahlen $\{1,2,3,4,\dots\}$
Z	ganze Zahlen $\{\dots-2,-1,0,1,2,\dots\}$
R	reelle Zahlen
C	komplexe Zahlen
D	Definitionsmenge
L	Lösungsmenge
L_ε	approximative Lösungsmenge
$L_{\gamma,\varepsilon}$	probabilistische Lösungsmenge
A	Attraktionsgebiet eines lokalen Minimums

Variablen, Vektoren, Matrizen¹⁹

		Erläuterung in Kapitel
m	Anzahl der unbekannt Parameter	2.1
n	Anzahl der Beobachtungen	2.1
$\mathbf{u}; u$	Vektor mit unbekannt Parameter; einzelne Unbekannte	2.1
\mathbf{x}, \mathbf{y}	Beobachtungspaare mit Meßwerten	2.1
$\mathbf{v}; v$	Residuenvektor; einzelne Residue	2.1
$\mathbf{v}(\mathbf{u})$	Residuenvektor in Abhängigkeit der Unbekannten	3.4
\mathbf{s}	systematische Fehler	2.1
\mathbf{p}	Vektor mit Gewichten	2.1
\mathbf{N}	Normalgleichungsmatrix	2.1
\mathbf{Q}	Kovarianzmatrix	2.1
Q	Qualitätsfunktion	2.1
Δ	wahrer Fehler	2.1
σ^2	Varianz	2.1
μ	Erwartungswert	2.1
$\bar{\mathbf{u}}$	Minimalpunkt einer Funktion	2.1
a, b	allgemeine Koeffizienten	
λ	Eigenwert einer Matrix	Anhang
k	Nummer eines Iterationsschrittes	3
t	Schrittweite eines Iterationsschrittes	3
\mathbf{d}	Richtung eines Iterationsschrittes	3
L	Lipschitz-Konstante	4.1
p	Wahrscheinlichkeit, mit der ein Ereignis eintritt	4.1
q	Anzahl der Punkte auf einer Kante	4.2
H	Anzahl gespeicherter Punkte	4.3
R	Steuerparameter zur Verminderung der Variabilität von Unbekannten	4.5
S	Steuerparameter der maximal möglichen Änderung der Unbekannten	4.5
T	Steuerparameter über die Akzeptanz von Funktionswerten	4.5
\mathcal{K}	Konstruktionsoperator	4.3
\mathcal{E}	Ersetzungsoperator	4.3

¹⁹ Generell sind die Variablen *kursiv*, Vektoren und Matrizen **fett** gedruckt.

\mathbf{P}^*	gespeicherter Punkt	4.5
\mathbf{u}^*	gespeicherter Unbekanntenvektor	4.5
f^*	gespeicherter Funktionswert	4.5
a	Amplitude einer harmonischen Schwingung	5.1
f	Frequenz einer harmonischen Schwingung	5.1
φ	Phasenlage einer harmonischen Schwingung	5.1
M	Anzahl der Frequenzen eines funktionalen Modells	5.1
A	Kosinusanteil einer harmonischen Schwingung	5.2
B	Sinusanteil einer harmonischen Schwingung	5.2
t	Zeitpunkt einer Beobachtung	5.1 / 5.3
x	auf das Intervall $[0; 2\pi]$ normierter Zeitpunkt einer Beobachtung	5.1 / 5.3
a_0	Bias	5.6
m_0	mittlerer Gewichtseinheitsfehler	5.8
E	spektrale Energie	6.3
R	Beobachtungsgröße eines Satellitenaltimeters	7.1
h	ellipsoidische Höhe des Satelliten	7.1
N	Geoidundulation	7.1
η	Altimetermessung	7.1
ζ_s	stationärer Anteil der Meerestopographie	7.1
ζ_v	variabler Anteil der Meerestopographie	7.1
P	permanente Fehler	7.1
C	konstante Fehler	7.1
V	variable Fehler	7.1
ϕ	geographische Breite	7.1
λ	geographische Länge	7.1
i	Inklination	7.2
a	große Halbachse	7.2
e	Exzentrizität	7.2

Abkürzungen

∇	Gradient
∇^2, \mathbf{H}	Hessesche Matrix
∂	partielle Ableitung
\square^{-1}	Inverse
$\ \cdot\ $	Norm
\forall	Allquantor: Aussagen über alle Objekte
\exists	Existenzquantor: Aussagen über irgendein Objekt
cpr	„cycle per revolution“, ein Satellitenumlauf
ESA	„European Space Agency“, die Europäische Raumfahrtagentur
ERS-1	„First European Remote Sensing Satellite“, erster europäische Radarsatellit

Anhang

Hauptkrümmungen

Wird in der klassischen Flächentheorie eine Fläche \mathbb{R}^2 im \mathbb{R}^3 abgebildet, so ergeben sich für jeden Punkt auf der Fläche zwei Hauptkrümmungen. Die Berechnung der m Hauptkrümmungen von Problemen der Dimensionalität m entspricht dem Eigenwertproblem

$$|\mathbf{e}\mathbf{Q}\partial_{uu}^2 f(\mathbf{u}) - \lambda\mathbf{N}| = 0.$$

Die Eigenwerte λ sind dann Hauptkrümmungen der Hyperfläche. Der Vektor \mathbf{e} ist der Normaleneinheitsvektor $\nabla f(\mathbf{u}) / |\nabla f(\mathbf{u})|$ auf der Fläche im Punkt P . Die Matrix \mathbf{Q} entspricht $[\nabla f(\mathbf{u})^\top \nabla f(\mathbf{u})]^{-1}$, während \mathbf{N} mit dem Ausdruck $\nabla f(\mathbf{u})^\top \nabla f(\mathbf{u})$ äquivalent ist.

Zur Berechnung der Hauptkrümmung im Beispiel Kap. 3.4 muß lediglich ein Eigenwert bestimmt werden. Es ergeben sich für das Beispiel die Werte

$$f(u) = \begin{pmatrix} 0.5u^2 + a \\ u \end{pmatrix} \quad \nabla f(u) = \begin{pmatrix} u \\ 1 \end{pmatrix} \quad \partial_{uu}^2 f(u) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$N = u^2 + 1 \quad \mathbf{Q} = \frac{1}{u^2 + 1} \quad \mathbf{e} = \frac{1}{\sqrt{u^2 + 1}} \begin{pmatrix} -1 \\ u \end{pmatrix}$$

und es folgt

$$\lambda = \kappa = -(u^2 + 1)^{-\frac{5}{2}}.$$

Hierbei sei angemerkt, daß die Richtung des Normaleneinheitsvektors \mathbf{e} von der Lage des Beobachtungspunktes bezüglich der Fläche abhängt. Sowohl das Vorzeichen des Normalenvektors als auch das der Hauptkrümmung wird dann negativ, wenn Beobachtungspunkt und Krümmungskreis sich auf verschiedenen Seiten der Fläche befinden.

Das Minimum im Beispiel Kap. 3.4 ist $u = 0$, so daß sich im Minimalpunkt eine Normalkrümmung $\kappa = -1$ ergibt.

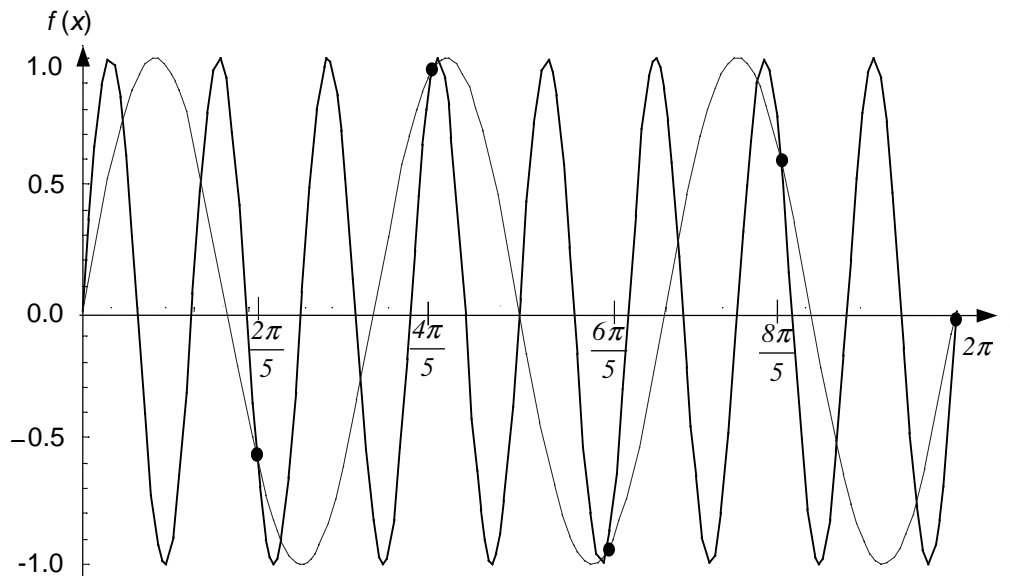
Aliasing

Der sogenannte Aliasing- oder Maskierungseffekt beruht auf der Tatsache, daß die beobachtete Größe in einer Zeitreihe nicht kontinuierlich, sondern nur in konkreten Zeitpunkten vorliegt. Der endliche Abstand zwischen den Meßwerten ist der Grund dafür, daß die Frequenz, mit der ein Signal schwingt, nicht eindeutig bestimmbar ist.

Das Beispiel in der Abbildung zeigt $n = 5$ Meßwerte einer Zeitreihe mit der Abtastrate $2/5\pi$. Die Zeitreihe könnte aus einer harmonischen Schwingung der Funktion $\sin(3t)$ bestehen. Ebenso wäre die Funktion $\sin((3+5)t)$ denkbar, da beide Funktionen an den Beobachtungszeitpunkten die gleichen Funktionswerte besitzen.

Alle Funktionen $\sin((3 + n \cdot z) t)$ mit $z \in \mathbb{Z}$ und $n = \text{Anzahl der Beobachtungen}$ sind Aliases der Funktion $\sin(3 t)$. Generell sind alle Frequenzen $f + n \cdot z$ und $-f + n \cdot z$ Aliases des Hauptalias f . Die Menge aller Frequenzen im Intervall $f \in [0, \dots, n/2]$ wird als Hauptalias bezeichnet. In der Regel interessiert man sich hauptsächlich für den Hauptalias mit seiner Eigenschaft $z = 0$.

Die höchste Frequenz des Hauptalias beträgt $\frac{1}{2} n$. Sie ist die höchste identifizierbare Frequenz und wird als Nyquist-Frequenz bezeichnet.

Verlauf von $\sin(3t)$ und dessen Alias $\sin(8t)$

Orthogonalitätseigenschaften der Sinus- und Kosinusfunktion

Wählt man Basisfunktionen $F(f, x)$ und $G(g, x)$ mit der besonderen Eigenschaft

$$\int_b^a F(f, x)G(g, x)dx = \begin{cases} c & \text{für } f = g \\ 0 & \text{für } f \neq g \end{cases} \text{ mit } f, g \in \mathbb{Z}, \text{ und } f \neq g$$

sind die Funktionen bezüglich des Intervalls $[a; b]$ zueinander orthogonal. Weiterhin seien f und g ganze Zahlen mit $f > 0$ und $g < n/2$ wobei $f \neq g$ gelte. In diesem Fall entfallen die folgenden Summenbildungen

$$\sum_{i=1}^n \sin\left(f \frac{2\pi}{n} i\right) = \sum_{i=1}^n \cos\left(f \frac{2\pi}{n} i\right) = 0$$

$$\sum_{i=1}^n \left[\sin\left(f \frac{2\pi}{n} i\right) \right]^2 = \sum_{i=1}^n \left[\cos\left(f \frac{2\pi}{n} i\right) \right]^2 = \frac{n}{2}$$

$$\sum_{i=1}^n \sin\left(f \frac{2\pi}{n} i\right) \cos\left(f \frac{2\pi}{n} i\right) = 0$$

$$\sum_{i=1}^n \sin\left(f \frac{2\pi}{n} i\right) \sin\left(g \frac{2\pi}{n} i\right) = \sum_{i=1}^n \cos\left(f \frac{2\pi}{n} i\right) \cos\left(g \frac{2\pi}{n} i\right) = \sum_{i=1}^n \cos\left(f \frac{2\pi}{n} i\right) \sin\left(g \frac{2\pi}{n} i\right) = 0.$$

Siehe auch ZURMÜHL (1965, S. 352) sowie SCHLITTEGEN & STREITBERG (1984, S. 405).

Lebenslauf

17.05.1969	geboren in Wiesbaden Eltern: Richard und Charlotte Mautz
1975-1979	Grundschule (Ludwig-Friedrich-Jahnschule in Wiesbaden)
1979-1988	Gymnasium (Oranienschule in Wiesbaden)
1988-1990	Zivildienst
1991-1996	Studium des Vermessungswesens an der TU Darmstadt, Abschluß des Studiums
1996-1997	Freier Mitarbeiter der Firma Siemens im Bereich Freileitungstrassierung (internationale Projekte)
seit dem 24.05.1996	verheiratet mit Guang Chen
seit dem 12.01.1998	Wissenschaftlicher Mitarbeiter mit Lehraufgaben am Institut für Geodäsie und Geoinformationstechnik (Fachgebiet Mathematische, Physikalische und Astronomische Geodäsie)

Danksagung

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. Ing. Lelgemann, der diese Arbeit betreute und mich sehr motivierte. Ebenso sei den Gutachtern Herrn Prof. Dr. Ing. Grafarend und Herrn Prof. Dr. Ing. Gründig gedankt, die mir wertvolle fachliche Hinweise gaben.

Vor allem möchte ich aber Herrn Dr. Ing. Svetozar Petrovic von ganzem Herzen danken. Ohne ihn wäre diese Arbeit nicht zustande gekommen. Er nahm sich immer für mich Zeit, gab mir die entscheidenden Anregungen und Kritikpunkte. Auch sorgte er dafür, daß ich mit meinem wissenschaftlichen Streben nicht ins Nirwana laufe, indem er mich immer wieder auf den rechten Weg lenkte.

Auch meinen lieben Kollegen, Herrn Dipl. Ing. Frank Neitzel, der als Lektor Nachtschichten einlegte, Herrn Dipl. Ing. Hartmut Wziontek, der mir bei vielen Hard- und Softwareproblemen half und Herrn Dr. Ing. Richard Stubenvoll, der mich bei der Altimetrie unterstützte, sei an dieser Stelle aufrichtig gedankt.

Ferner danke ich meiner lieben Frau Guang Chen, meinen Eltern und Frau Kunkel für die Hilfsbereitschaft.