

Modellierung, Simulation und Optimierungsverfahren

Dr. Colin W. Glass

Institut für Höchstleistungsrechnen

23.04.2014

Modell Definition

Definition

Ein **Modell** ist ein künstlich geschaffenes Objekt, das wesentliche Merkmale, Beziehungen und Funktionen eines zu untersuchenden Objektes (Originals) in vereinfachter Form wiedergibt, nachbildet und damit den Prozess der Informationsgewinnung über dieses Objekt erleichtert [T. I. Ören]

Anmerkung:

Wir interpretieren Objekt sehr allgemein.

Wir interpretieren das erste "und" als "und/oder"

System

Definition

Ein System besteht aus einer Menge von Objekten, die durch Relationen verbunden sind. Es wird von seiner Umgebung durch Systemgrenzen getrennt. Die Umgebung kann nur durch definierte Relationen mit dem System interagieren. Für die Modellierung des Systems werden ausschließlich die definierten Relationen berücksichtigt.

Klassen

Definition

Als Klasse wird in der Mathematik und Mengenlehre eine Zusammenfassung von Objekten bezeichnet, die alle eine logische Eigenschaft erfüllen.

Ein Vergleich mit der Definition von Modell zeigt: Objekte durch Klassen zu repräsentieren resultiert in einem Modell.

Klassen

Etwas allgemeiner:

Definition

Eine Klasse fasst Dinge zusammen, die einer Reihe von Bedingungen genügen. In einer Klasse werden im Allgemeinen Dinge zusammengefasst, die in ihren Merkmalen gleich oder ähnlich sind.

Klassen

Triff eine Unterscheidung. [Heinz von Förster]

Ziel: Ein Verfahren, welches Instanzen einer Sache in Klassen einteilt.

- Per se bekannt (Klassierung) ...
- ... oder muss erst konstruiert werden (Klassifizierung) ...
 - auf der Basis von Theorien/Annahmen (Deduktiv)
 - auf der Basis von Daten (Induktiv)

Relation: Allgemein

Definition

Als Relation wird im Allgemeinen eine bestimmte Beziehung zwischen Objekten bezeichnet.

Eine Relation kann folglich vielerlei Gestalten annehmen. Z.B. kann eine Relation bei agentenbasierten Modellen die Auswirkung des Verhaltens von einem Agenten auf einen anderen sein.

Relation: Mathematik

Im Sinne der Mathematik: Eine Relation R ist eine Menge von n -Tupeln. Dinge, die in der Relation R zueinander stehen, bilden ein n -Tupel $\in R$.

Das heisst: quantifizieren. Jeder "Ursache" wird eine eindeutige "Wirkung" zugeordnet. (eine "Ursache" + eine "Wirkung" $\hat{=}$ ein 2-Tupel)

Geschrieben werden Relationen als $(x,y) \in R$, oder xRy .

Relation: Mathematik

Wichtige Eigenschaften von Relationen:

reflexiv	$\hat{=}$	$(x,x) \in R$	
irreflexiv	$\hat{=}$	$(x,x) \notin R$	
transitiv	$\hat{=}$	$(x,y) \in R \wedge (y,z) \in R$	$\Rightarrow (x,z) \in R$
intransitiv	$\hat{=}$	$(x,y) \in R \wedge (y,z) \in R$	$\Rightarrow (x,z) \notin R$
symmetrisch	$\hat{=}$	$(x,y) \in R$	$\Rightarrow (y,x) \in R$
asymmetrisch	$\hat{=}$	$(x,y) \in R$	$\Rightarrow (y,x) \notin R$

Es gibt natürlich viele weitere Eigenschaften. Es gibt ein grosses Wissen bzgl. Klassierung von Relationen.

Funktionen

Eine Funktion (oder Abbildung) ist eine Relation zwischen zwei Mengen, die jedem Element der einen Menge (Definitions Menge) genau ein Element der anderen Menge (Zielmenge) zuordnet.

Wichtige Eigenschaften:

- injektiv: jedes Element der Zielmenge hat höchstens ein Urbild
- surjektiv: jedes Element der Zielmenge hat mindestens ein Urbild
- bijektiv: jedes Element der Zielmenge hat genau ein Urbild

P.s: Funktion $\hat{=}$ linkstotale und rechtseindeutige Relation P.p.s: Urbild $\hat{=}$ ein Element $\in$ Definitions Menge, welches auf das Element abgebildet wird, dessen Urbild es ist.

Funktionen

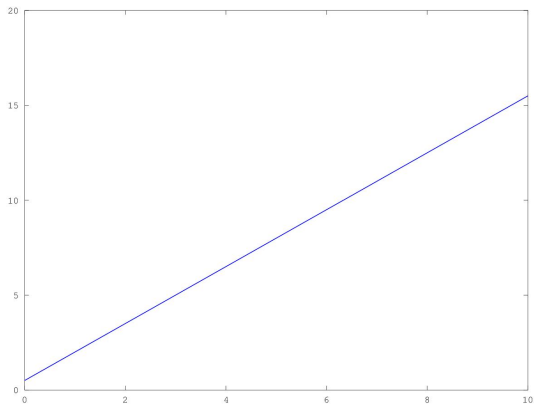
Weitere Eigenschaften:

- periodisch
- stetig
- differenzierbar
- monoton
- konvex/konkav
- ...

Funktion: Linear

Schätzungsweise häufigster Fall (proportional). $y = a + b * x$

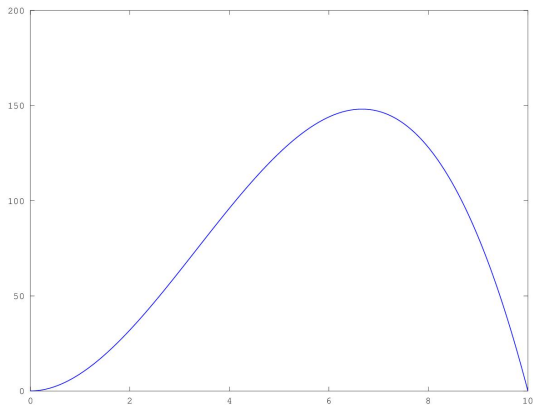
$$y = 0.5 + 1.5 * x$$



Funktion: Polynom

$$y = a + b * x + c * x^2 + d * x^3 \dots$$

$$y = 10 * x^2 - x^3$$

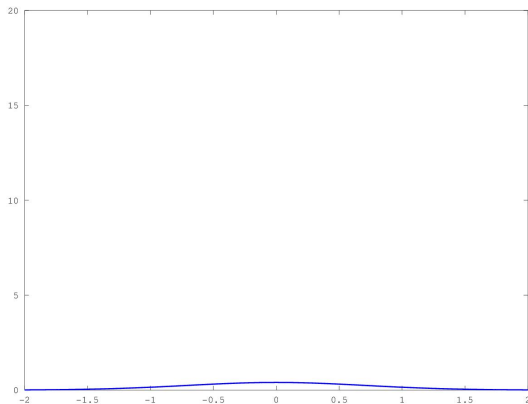


Damit kriegt man schon so manches gut abgebildet.

Funktion: Delta Funktion

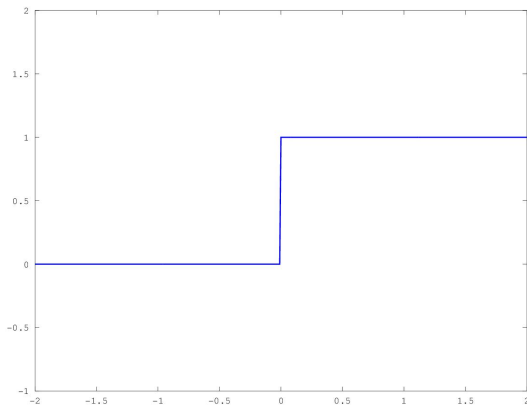
$$\delta(A) = \begin{cases} 1 & \text{if } 0 \in A \\ 0 & \text{else} \end{cases}$$

$$\text{Approximation: } \delta_\sigma(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\sigma} e^{-\frac{x^2}{\sigma^2}} \quad \sigma \rightarrow 0$$



Funktion: Heaviside

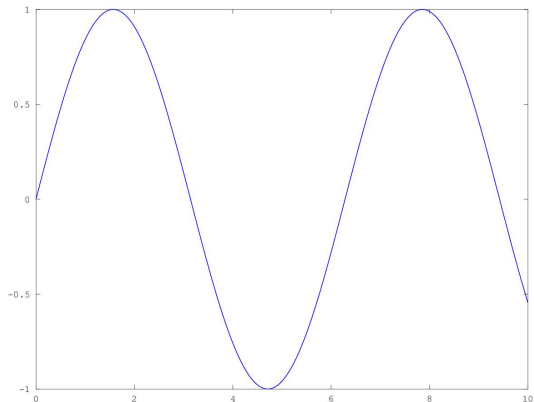
$$H(x) = \int_{-\infty}^x \delta(s) ds = \begin{cases} 0 & : x < 0 \\ 1 & : x \geq 0 \end{cases}$$



Funktion: Trigonometrisch (Sinus)

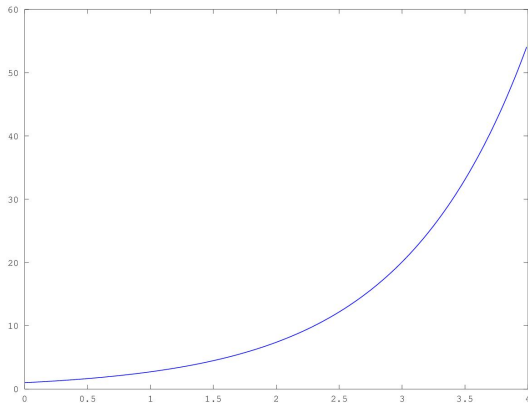
$$y = \sin(x) \quad \text{oder}$$

$$y = \frac{1}{2i}(e^{ix} - e^{-ix})$$



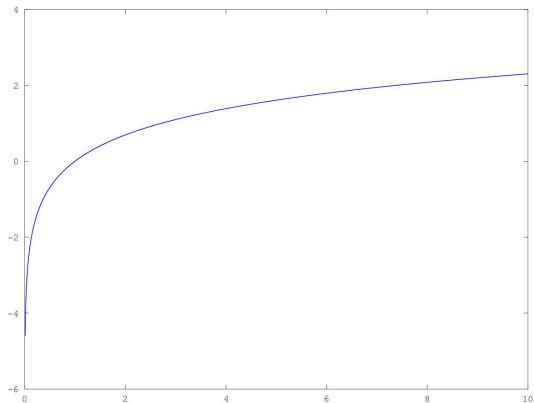
Funktion: Exponential

$$y = e^x$$



Funktion: Logarithmus

$$y = \log(x)$$



Basiswechsel

Oft ist es von Vorteil, die Basis in der man Funktionen darstellt, zu wechseln.

Zwei speziell mächtige und entsprechend berühmte Methoden sind:

- Taylorentwicklung
- Fourier Analyse

Taylor Entwicklung

$$P_f(x) = f(a) + \frac{f'(a)}{1!}(x-a) + \frac{f''(a)}{2!}(x-a)^2 + \dots + \frac{f^{(n)}(a)}{n!}(x-a)^n + \dots$$

$$P_f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(a)}{n!}(x-a)^n$$

Polynome: unendliche Basis

Man kann sich die Taylor Entwicklung folgendermassen vorstellen: Jede Funktion kann durch ein Polynom n-ter Ordnung repräsentiert werden. Wir versuchen dieses Polynom zu bestimmen.

n-te Ableitung $\hat{=}$ "Welcher Anteil hat der n-te Term", denn die Terme geringerer Ordnung werden zu 0 abgeleitet.

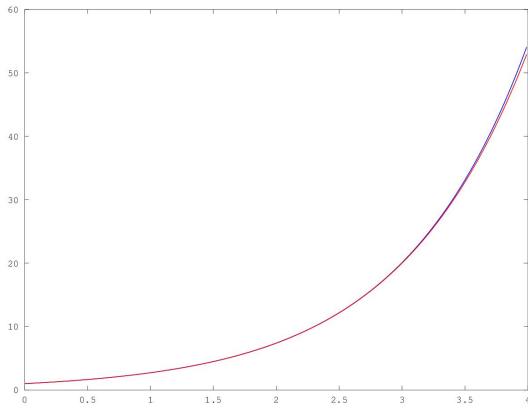
Durch Division mit $n!$ kriegt man die Vorfaktoren der Ableitungen kompensiert.

Taylor Entwicklung: Exponential

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots$$

Taylor Entwicklung: Exponential

$$y = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \frac{x^5}{5!} + \frac{x^6}{6!} + \frac{x^7}{7!} + \frac{x^8}{8!}$$



Fourier Analyse

$$\mathcal{F}\{x(t)\} = \hat{x}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x(t) e^{-i\omega t} dt$$

Cosinus/Sinus: Orthonormalbasis

Selbes Spiel wie mit Taylor, bloss diesmal mit Schwingungen: jede Funktion kann durch unendlich viele Schwingungen repräsentiert werden. Skalarprodukt mit Schwingung einer gegebenen Frequenz: "Wie gross ist der Anteil der Schwingung mit Frequenz $= \omega$ ".

Denn: die Interferenz mit allen in der Funktion enthaltenen Schwingungen anderer Frequenz mittelt sich raus (bei $\int_{-\infty}^{\infty}$).

Fourier Analyse

Schwingung1: $\omega_1 = 2\pi$

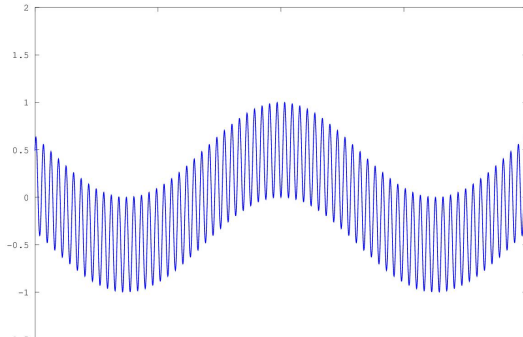
Schwingung2: $\omega_2 = 2\pi * 1.05$

Schwingung1*Schwingung2 ergibt eine Schwebung.

Fourier: aufintegrieren von $-\infty$ nach ∞ , d.h. bei ungleichen Frequenzen:

Schwebung $\rightarrow$ Integral $= 0$.

Folglich filtert die Fourier Analyse alle Frequenzen $\neq \omega$ raus.



Periodisch: Fourierreihe

Ist die Funktion periodisch, können nur die Grundschiwingung und Oberschwingungen $\neq 0$ sein. Wir machen unsere Überlegungen anhand dieses einfacheren Falls. Periode $T > 0$, $\omega = \frac{2\pi}{T}$, $k = 1, 2, 3, \dots$

$$f(t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} (a_k * \cos(k\omega t) + (b_k * \sin(k\omega t)))$$

Wobei:

$$a_k = \frac{2}{T} \int_c^{c+T} f(t) * \cos(k\omega t) dt$$

$$b_k = \frac{2}{T} \int_c^{c+T} f(t) * \sin(k\omega t) dt$$

Fourierreihe



Quelle: Lucas V. Barbosa

Agentenbasierte Modelle

Im Gegensatz zu anderen Arten der Modellierung haben in der agentenbasierten Modellierung die Objekte (Agenten) Entscheidungs- oder Handlungsmöglichkeiten. Das Systemverhalten resultiert aus dem Verhalten der Agenten. Wenn es dabei zu Effekten auf der Systemebene kommt, die nicht unmittelbar aus den Entscheidungsalgorithmen der Individuen ableitbar sind, spricht man von Emergenz.

Selbst aus sehr simplen Entscheidungs- oder Handlungsmöglichkeiten kann ein hochkomplexes System entstehen.

Agentenbasierte Modelle

Anwendungen sind zahlreich und dies ist eine schnell wachsende Disziplin.

- Trampelpfade (Ein Agent (Student) will abkürzen, speziell wenn er in Eile ist. Je ausgeprägter der Trampelpfad, desto eher nutzt ihn der Student.)
- Segregation (Ein Agent hält sich gerne in der Nähe von ähnlichen Agenten auf.)
- Kulturelle Diffusion (Agenten verbreiten Kulturgut. Agenten nehmen Kulturgut auf, wenn es einen Vorteil bietet.)
- Spieltheorie (Agenten wollen ihren Nutzen maximieren, der systemweite Nutzen kann aber nur durch Kooperation maximiert werden, z.B: Prisoner's Dilemma.)

Agentenbasierte Modelle sind speziell in den Sozialwissenschaften (Wirtschaft zählen wir da mal mit rein) ein extrem mächtiges Werkzeug.

Spieltheorie

Relationen bei agentenbasierten Modellen sind intuitiv zugänglich. Die entsprechende Modellierung lässt sich gut nachvollziehen.

Die Spieltheorie untersucht das Verhalten von Agenten in einem "Spiel". Die Spiele müssen beileibe nicht lustig sein.

In der Spieltheorie werden Kombinationen von Entscheidungen verschiedener Parteien auf Nutzen der Parteien abgebildet.

Strategisches Spiel: Prisoner's Dilemma

Szenario: Zwei Bandenmitglieder (A,B) sind in Untersuchungshaft. Sie werden getrennt verhört. Die Beweislage ist nicht hinreichend für eine Verurteilung. Wenn keiner gesteht, kann die Justiz bloss eine geringere Anklage durchbringen.

- Keiner gesteht: je 2 Jahre
- Einer gesteht (verpfeift den anderen): 1 bzw. 7 Jahre
- Beide gestehen: je 5 Jahre

Die Summe beider Strafen ist folglich 4, 8, 10 Jahre Haft.

P.s: Wie so oft bei hypothetischen Prisoner's Dilemmata sind die Zahlen aus dem Hut gezaubert. Sie sind jedoch für die Auswahl einer Strategie eigentlich von grosser Bedeutung.

P.p.s: Üblicherweise wird vorausgesetzt, dass die Summe beider Strafen mit Anzahl Geständnissen steigt.

Strategisches Spiel: Prisoner's Dilemma

Der "Nutzen" ist hier natürlich eine Verringerung der Strafe.

System: 2 Parteien

Relationen über die **Systemgrenze:** Strafe

Vereinfachung:

- Zwei Entscheidungsmöglichkeiten
- Vollkommene Information (die Parteien kennen die Nutzenmatrix)
- Symmetrische "Strafmatrix".
- Nutzen linear mit Strafe! (Folglich: Nutzen verhält sich für beide Parteien gleich - Dies wird oft vergessen)

Strategisches Spiel: Prisoner's Dilemma

Strategien ohne Berücksichtigung des zweiten Spielers (keine Relation zwischen Strategien der Spieler):

- Maximierung des Erwartungswertes des Nutzens.
- Maximierung des Nutzen im Worst Case (möglichst guter schlimmster Fall).
- Maximierung des Nutzen im Best Case (möglichst guter bester Fall).

Alle diese Strategien führen zur Entscheidung: Gestehen (verpfeifen).
Wenn die Bewertung anders wäre, könnte der erste Fall anders ausfallen.

Strategisches Spiel: Prisoner's Dilemma

Strategien mit Berücksichtigung des zweiten Spielers:

Kaum berücksichtigt ein Spieler die Tatsache, dass der andere Spieler ebenfalls eine Entscheidung trifft, sieht die Sache anders aus.

Vertrauen + Loyalität = nicht gestehen

Misstrauen + Loyalität = gestehen(?)

Vertrauen + Disloyalität = gestehen

Misstrauen + Disloyalität = gestehen

Hier bringen wir folglich Relationen zwischen den Spielern ein, die es vorher nicht gab.

Neue Vereinfachung: Vertrauen und Loyalität haben nur zwei Zustände.

Strategisches Spiel: Prisoner's Dilemma

Strategien mit Berücksichtigung des zweiten Spielers + viele Wiederholungen. (Iterated Prisoner's Dilemma, IPD)

Durch die Wiederholungen ergibt sich die Möglichkeit, Relationen zwischen der jetzigen Entscheidung und dem Resultat der vorherigen herzustellen.

Es gibt Wettbewerbe, bei das Szenario (inkl. Anzahl Wiederholungen) festgelegt wird und Teilnehmer Strategien einsenden können.

Diese Strategien werden dann zufällig zusammengewürfelt und ausgewertet.

Strategisches Spiel: Prisoner's Dilemma

Bekannte Strategien sind:

- Erster Zug kooperieren, alle weiteren Züge entsprechen dem, was der Gegner im vorherigen tat (Tit for Tat).
- Kooperieren bis der Gegenspieler ein Mal nicht kooperiert.
- Nie kooperieren
- "Win Stay, loose Shift" (Pavlov)
- Immer kooperieren
- ...

Sehr oft gewinnt Tit for Tat, Pavlov hat auch gute Karten.
Das Ergebnis hängt jedoch extrem von Szenario ab.

P.s: Neue Vereinfachung für IPD: Die Spieler haben nur die Historie als Information über einander zur Verfügung.

Strategisches Spiel: Prisoner's Dilemma

Überdenken von Vereinfachungen:

Nutzen verhält sich **nicht** linear mit Strafe?:

Für einen Spieler ist z.B. eine Strafe von 2 Jahren und mehr gleich schlimm, da er nur noch zwei Jahre zu leben hat.

- Die Nutzenmatrix ist plötzlich nicht mehr symmetrisch

Strategisches Spiel: Prisoner's Dilemma

Überdenken von Vereinfachungen:

Unvollkommene Information?:

Ein Spieler kann auch vermuten, dass z.B. die Strafe von 2 Jahren und mehr für seinen Gegenspieler gleich schlimm.

- Die Spieler haben eine neue Relation: Vermutungen zur gegnerischen Nutzenmatrix.
- Die strategische Wahl hat einen neuen Einfluss.

Er kann diese Annahme als Zufallsvariable betrachten

- Bayesian Decision Rule

Strategisches Spiel: Prisoner's Dilemma

Überdenken von Vereinfachungen:

Loyalität und Vertrauen haben zwei Zustände (ja/nein)? sind definiert auf dem Wertebereich $[0,1]$:

- Die Abbildung von Loyalität und Vertrauen auf ein Verhalten bedarf einer Funktion.
- Dafür kann viel genauer quantifiziert werden.

Spieltheorie: Nash Equilibrium

Ein Spiel ist dann in einem **Nash Equilibrium**, wenn kein Spieler durch eine Änderung seines Verhaltens seinen Nutzen erhöhen kann.

Ein Nash Equilibrium ist ein stabiler Zustand des Spiels.

Bei PD: beide gestehen.

Das **Prisoner's Dilemma** ist folglich exemplarisch für Systeme, bei welchen das **Nash Equilibrium** den **geringsten Gesamtnutzen** hat.

Spieltheorie

Die vorherigen Überlegungen aus der Spieltheorie sind perfekte Beispiele deduktiv entworfener Modelle.

Aus den fundamentalsten, simpelsten Modellen werden komplexere Modelle aufgebaut und zwar nur dann, wenn ein Effekt auf Basis des simplen Modells nicht erklärt werden kann (Occam's Razor).

In weiteren Schritten könnten auch induktiv gewonnene Information in die Modellierung zurückfliessen.

Anmerkung: Iterated Prisoner's Dilemma

Das Iterated Prisoner's Dilemma ist ein mächtiges Modell für die Erklärung evolutionär entstandener, komplexer Verhaltensmuster.

Eine sehr interessante Ausführung dazu findet sich z.B. in "The Selfish Gene, Richard Dawkins"

Optimierung

Zufallsvariablen: Nur wenige Optimierungsverfahren kommen ohne Zufallsvariablen aus.

Funktionen: Die Evaluierungsfunktion bildet die Lösungen auf Fitness ab.

Agenten: Viele sehr erfolgreiche Optimierungsverfahren abstrahieren Lösungen als Agenten, die sich analog zu einem natürlichen System verhalten (Evolutionäre Algorithmen, Schwarmalgorithmen, Ameisenalgorithmus ...)

Occam's Razor: Occam

Numquam ponenda est pluralitas sine necessitate.

”Eine Mehrheit darf nie ohne Not zugrunde gelegt werden.”

[William of Occam (1287 – 1347)]

Occam's Razor: Newton

We are to admit no more causes of natural things than such as are both true and sufficient to explain their appearances. Therefore, to the same natural effects we must, so far as possible, assign the same causes.

[Isaac Newton (1642 - 1727)]

Occam's Razor: Russel

Whenever possible, substitute constructions out of known entities for inferences to unknown entities.

[Bertrand Russell (1872 – 1970)]

Occam's Razor

Occam's Razor wird quer durch die Disziplinen zur Bewertung konkurrierender Modelle bzw. Theorien angewendet.

"Wenn zwei Theorien den selben Sachverhalt gleich gut beschreiben, dann ist die einfachere Theorie vorzuziehen."

"Einfacher": weniger Annahmen (Entitäten, Parameter, u.Ä.)