

Struktur und Dynamik eines komplexen Systems
charakterisiert mittels der
Multiresolution-Technik der Signalanalyse
am Beispiel von Relaxationsoszillationen

Diplomarbeit an den Instituten

Biochemie in der medizinischen Fakultät
und Experimenteller und Angewandter Physik
der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel

von
Alexander Krämer

Kiel, Januar 1999

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Einführung	1
1.2	Aufgabenstellung	3
2	Zur Struktur von Systemen	5
2.1	Lineare Systeme	6
2.2	Laplace Transformation und lineare Differentialgleichungssysteme	9
2.3	Die Kinetik chemischer Reaktionssysteme	14
2.3.1	Chemischer Reaktor	21
2.3.2	Analyse eines Systems	22
2.4	Thermodynamische Systeme	23
2.4.1	Tellegens Theorem	24
2.4.2	Konstruktion einer Topologie	26
2.4.3	Die minimale Entropie-Produktion	27
2.4.4	Netzwerke in der Thermodynamik	28
3	Theorie zur Signalanalyse	31
3.1	Generalisierte “frames”	31
3.1.1	Analyse und Synthese kontinuierlicher Signale	31
3.1.2	Resolution of Unity	32
3.1.3	Der Analyse-Operator T	34
3.1.4	Der Metrischer-Operator G	34
3.1.5	Der Synthese-Operator S	35
3.1.6	Der Projektions-Operator P	36
3.1.7	Anmerkungen	36
	Zulassungs-Bedingung für $\{h_m\}$	37
	Wahrscheinlichkeitsdichte und Differenzierbarkeit	37
	Approximationen	38
3.2	Diskrete frames	39
3.2.1	Diskretisierung	39
3.2.2	Skalierung und Abtastrate	40
3.2.3	Analyse und Synthese	40
	Diskretisierung der Zeit	41

	Diskretisierung der Skala	42
3.3	Multiresolution Analysis (MRA)	43
3.3.1	Basis	47
3.3.2	DownSample und UpSample Operatoren	48
3.3.3	Basis System des W -Raumes	50
3.3.4	Rotations-Operator J	51
3.3.5	Filterkoeffizienten	52
3.3.6	“Packet”-Zerlegung	54
4	Experimenteller Teil	56
4.1	Vorarbeiten	56
4.2	Mathematisches Test-System	57
4.2.1	Berechnung des Modellmechanismus	58
	Ermitteln fehlender Variabler	60
	Folgevariable ξ_1 gemessen. Gesucht Steuervariable ξ_2 :	61
	Steuervariable ξ_2 gemessen. Gesucht Folgevariable ξ_1	61
4.2.2	Phasendiagramm Vergleiche	63
4.2.3	Reaktor Sicht	65
4.3	Experimentelles Test-System	66
4.3.1	Experimentelles Modell	67
4.3.2	Differential eines kontinuierlichen Signals: Kommutator- Relation	69
4.3.3	Multi-resolution Analysis (MRA) mit Haar Wavelets als Basis	74
4.3.4	Differential-Gleichungs-System mit der MRA konstruiert	76
4.3.5	Experimentelle Überprüfung der Analyse	76
4.4	Rauschen	83
	“Wavelet Shrinkage”	83
	“Basis Pursuit”	84
5	Diskussion	87
5.1	Deutung von Basen als Prozesse	88
5.2	Quantentheorie und Hilbert-Raum	89
5.3	Anmerkung zur Konstruktion der System-Topologie	90
5.4	Test-Systeme	91
5.4.1	Experimentelles Test-System	91
5.4.2	Mathematisches Test-System	94
5.5	Anmerkung zu physikalischen Realisierungen und <i>frames</i>	95
5.6	Ausblick	98
5.7	Anmerkung zur Konstruktion der System-Topologie	100
5.8	Mathematisches Test-System	101
5.9	Wavelets versus <i>frames</i>	103
5.10	Abstrakte Beschreibung für physikalische Realisierungen	104
5.11	System- <i>frame</i> und Labor- <i>frame</i>	105

5.12	Physikalische <i>frames</i>	105
5.13	Kommutator Maß	105
5.14	Existenz einer Dgl ist nicht notwendig	105
5.15	nicht-stationäres, nicht-lineares und Kausalität	105
5.16	Koordinatentransformation auf die Reale Physik	106
5.17	Connectivity	106
5.18	Ausblick	106
6	Zusammenfassung	108
	Literature	111

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Einführung

Eine zentrale Erkenntnis über lebende Systeme ist, daß sie den physikalischen und chemischen Gesetzmäßigkeiten unterliegen. Mithin auch mit physikalischen und chemischen Methoden analysiert werden können. Diese Erkenntnis hat zur weitreichenden Wissensvermehrung über biologische Systeme in diesem Jahrhundert geführt, und es haben sich ganze Wissenschaftsdisziplinen entwickelt wie Biochemie, Biophysik und neuerlich Zellbiologie, Immunologie sowie Entwicklungsbiologie, in denen spezifisches Wissen und spezifische Methodik zusammengetragen sind. Sie haben inzwischen die Analyseverfahren soweit entwickelt, daß jedem dieser Teilgebiete sogar ein eigenes Spektrum von experimentellen Untersuchungstechniken zugewiesen werden kann.

Alle diese Teildisziplinen gehen davon aus, daß sie sich mit – im allgemeinsten Sinne – Systemen beschäftigen. Die Systeme sind aus Komponenten (Bausteinen) aufgebaut, wie z.B. Aminosäuren oder Nukleotide in der Biochemie, Zellen in der Zellbiologie, Antikörper in der Immunologie oder Organe in der Entwicklungsbiologie, die aufgrund ihrer spezifischen Wechselwirkung eine bestimmte Funktion erfüllen, und die dazu beiträgt, daß sie in ihrer Umgebung existieren können. Die Bausteine sind in den biologischen Systemen in vielfältiger Weise vernetzt. Im Gegensatz zu den klassischen Disziplinen der Physik und Chemie, wo häufig die Dynamik entscheidend ist, spielt in diesen komplexen Systemen die Vernetzung die vorherrschende Rolle. Die Vernetzung der Zellen im Gehirn stellt hierfür ein extremes Beispiel dar. Es gibt nur wenige Zelltypen (Neuronen), die aber hochgradig vernetzt sind. Die Funktionalität des Systems ist dennoch in der Vernetzung (der Connectivity) zu suchen.

Die biologischen Systeme besitzen noch eine weitere wichtige Eigenschaft. Sie können nur in einer bestimmten Umgebung existieren. Sie sind umgebungsabhängig, weil sie aus der Umgebung Stoffe aufnehmen und an diese abgeben müssen. Diese Eigenschaft charakterisiert sie als "offene" Systeme, d.h. als Systeme, durch

die ein permanenter Fluß fließen muß. Die Theorie der Thermodynamik irreversibler Prozesse zeigt [Hak83] und [Pri47], daß vernetzte, offene Systeme, durch die ein ständiger Fluß fließt, negative Entropieproduktionsdichten aufweisen können. Wechselt ein System von positiver zu negativer Entropieproduktion, ändert sich sein Systemverhalten erheblich. So beginnt ein vorher zeitlich stationäres System danach mit konstanter Amplitude zu schwingen. Die nicht-linearen Oszillationen werden häufig nur von einem Sub-System des Systems ausgeführt, während sich das Restsystem zeitlich noch stationär verhält.

Biologische Systeme besitzen als weitere charakteristische Eigenschaft Sensoren (“Sinne”), mit denen sie Parameter der Umgebung messen. Die Meßwerte werden dann in geeigneter Weise umgesetzt, so daß das System auf die Umgebung reagieren kann. Ein besonderer Sensor, der ihnen eigen ist, ist ein Speicher. In dem Speicher sind üblicherweise Ereignisse aus der Vergangenheit der Umgebung niedergelegt, die bei Bedarf wieder aktiviert werden können, wie es von der Erbsubstanz bekannt ist. Hierin unterscheiden sich die klassischen Systeme der Physik und Chemie von biologischen. Sie haben nur ein Erinnerungsvermögen an ihre Umgebung über einen infinitesimal kurzen Zeitraum, so daß ihr Verhalten durch Differentialgleichungen beschrieben werden kann. Den Differentialgleichungen liegt meist ein Modell zugrunde, aus dem sie abgeleitet werden können. Das Problem besteht dann darin, Lösungen des Differentialgleichungssystems zu finden. Bei komplexen biologischen Systemen liegt die Problemstellung häufig so, daß das System beobachtet (d.h. gemessen) werden kann und aus den Beobachtungsergebnissen Rückschlüsse auf das System bzw. die Systemstruktur gezogen werden müssen. Daher sind in diesem Bereich auch vorzugsweise Analysemethoden zu finden, die Aussagen über die Struktur bzw. die Vernetzung (Connectivity) machen. Es sind aus einem Meßsignal die Informationen zu extrahieren, die Aussagen über die Systemstruktur machen, die das Signal erzeugt haben könnte.

In der vorliegenden Arbeit wird versucht, diesem Ziel unter Verwendung der Signalanalyse mit “frames” am Beispiel von Relaxationsoszillation näherzukommen. Dabei wurde wie folgt vorgegangen.

Im Kapitel “Zur Struktur von Systemen” wird für lineare Systeme nochmals aufgezeigt, wie mit Hilfe der Netzwerkfunktion ein Schaltbild für eine elektrische Schaltung ermittelt werden kann, wenn die Antwort auf einen Umgebungsimpuls analysiert wird. Die zentrale Rolle bei der Analyse solcher Systeme spielt die Laplace Transformation (die verallgemeinerte Fouriertransformation). Ihre Eigenschaften bezüglich der Signalanalyse und Systemstruktur sind daher nochmals erwähnt. Über die Möglichkeit, in Ersatzschaltbildern nicht elektrische Elemente (z.B. Lautsprecher) quasi wie elektrische darzustellen, wird die Schaltbilddarstellung von elektrischen auf allgemeine thermodynamische Systeme erweitert, von denen die elektrischen nur ein Spezialfall sind. Das Theorem von Tellegen spielt für die Zerlegung thermodynamischer Systeme in Komponenten bzw. Unterräume eine wichtige Rolle und wird daher hier bezüglich seiner topologischen Eigenschaften und hinsichtlich des Prinzips minimaler Entropieproduktion aufgeführt.

Schließlich wird der Spezialfall chemischer Reaktionssysteme näher abgehandelt, da aus diesem Bereich später ein Modellsystem sowie ein experimentelles System näher untersucht werden sollen.

Im Kapitel “Theorie zur Signalanalyse” wird die Laplace Transformation von Signalen auf die Analyse mit “frames” verallgemeinert. Ein Signal in einem Hilbert-Raum kann in ein Spektrumäquivalent transformiert werden und dann aus dem evtl. manipulierten Spektrumäquivalent wieder vollständig rekonstruiert werden.

Der wesentliche Unterschied zur Laplace Transformation ist, daß bei den “frames” die Basis linear abhängig ist, während sie bei der Laplace Transformation linear unabhängig ist. Die lineare Abhängigkeit der Basisfunktionen bedingt, daß als Orthonormierungskriterium die “resolution to one”-Bedingungen eingeführt werden müssen. Es werden Operatoren definiert, die Funktionsbasen im Hilbert-Raum erzeugen. Die Operatoren, die zur “Multiresolution”-Analyse führen werden besonders beachtet, da sie im folgenden Kapitel angewendet werden. Auch wird auf die Differenzier-, Skalen- und Kommutatoreigenschaft der Operatoren eingegangen.

Im experimentellen Teil wird schließlich die Anwendung auf chemische Reaktionssysteme aufgezeigt. Erst an einem Modellmechanismus aus der Literatur, der den biochemischen Stoffwechselweg der Glycosyse nachbilden soll und dann an experimentellen Meßdaten von einer anorganisch-organischen Reaktion, die unter Bedingungen eines chemischen Reaktors abläuft und nicht-linear oszilliert [FAH95] [EKKO83] [Gol90]. Dabei wird versucht soviel Information wie möglich über die Struktur bzw. den Mechanismus des Systems zu gewinnen.

1.2 Aufgabenstellung

Die vorliegende Arbeit soll einen Beitrag zu theoretischen Analyse von komplexen nicht-linearen Systemen liefern. Dabei geht es darum aus Meßsignalen von einem realen System auf die innere Struktur zu schließen (inverses Problem) [P.C94] [Maa94]. Diese Situation liegt häufig bei biologischen Systemen vor und ist invers zu der der klassischen Naturwissenschaften bei denen die Struktur meist bekannt ist und ein zukünftiges Verhalten vorhergesagt werden soll. Dabei soll wie folgt vorgegangen werden:

- Es soll die System-Theorie bezüglich ihrer dynamischen und topologischen Eigenschaften aufgearbeitet werden.
- Es sollen moderne Verfahren der Signalanalyse (– hier speziell die “Multiresolution”-Analyse –) auf ihre diesbezügliche Anwendbarkeit hin geprüft werden.
- Es soll die Computertauglichkeit der Verfahren ermittelt und getestet werden. Eventuell sind Programme zu ergänzen.

- Es sollen einfache Test-Systeme, z.B: eine nicht-lineare Relaxationsoszillation, aufgebaut werden, für die mathematische und experimentelle Daten erzeugt und ausgewertet werden können.
- Es soll an den Test-Systemen unter Anwendung der Multiresolution-Analyse gezeigt werden,
 1. daß für das Signal ein Phasenraum aufgespannt werden kann [Jia97] [JP95].
 2. daß charakteristische Funktionen (Nullklinen) des beschreibenden Differentialgleichungssystems ermittelt werden können.
 3. daß auch verrauschte Signale ausgewertet werden können.
 4. daß unter der Annahme, das System habe Reaktoreigenschaften, eine Zerlegung in eine Reaktorfunktion des Systems und einen Flußanteil der Umgebung möglich ist.
- Es soll ermittelt werden unter welchen Bedingungen die im voranstehenden Punkt aufgelisteten Thesen erfolgreich sind.
- Es soll aufgezeigt werden, in wie weit Signalanalyse die Struktur eines nicht-linearen Systems aufzuklären vermag.

Es soll hierbei nicht darum gehen Muster in Daten (Bildern) zu erkennen. Vielmehr sollen die Grundprozesse ergründet werden, mit denen die Muster oder Daten erzeugt wurden.

Kapitel 2

Zur Struktur von Systemen

Die Theorie linearer Netzwerke bietet eine Möglichkeit z.B. elektrische Schaltungen zu beschreiben. In diesem Formalismus besteht ein System aus vernetzten Komponenten. Für die beschreibenden Systemvariablen (in diesem Fall Strom und Spannung) kann eine Basis gefunden werden, in der sich die Dynamik formulieren läßt.

In mehreren Schritten wird diese Beschreibung verallgemeinert. Von dem Spezialfall eines elektrischen Systems mit linearem stationärem Verhalten gehen wir zu offenen thermodynamischen Systemen mit nicht-linearem und nicht-stationärem Verhalten über. Die Systemvariablen werden durch generalisierte Flüsse und Potentiale ersetzt und in einer Basis zusammengefaßt. Die Komponenten werden zu generalisierten Prozessen abstrahiert. Der Prozeß wird auf die Dynamik zwischen den Systemvariablen zurückgeführt, die durch physikalische Gesetze verbunden sind. Das gemessene physikalische Signal erscheint dann als sei es durch die vernetzten generalisierten physikalischen Prozesse erzeugt worden.

Zu Beginn betrachten wir im Rahmen der linearen Systemanalyse ein beliebiges elektrisches Netzwerk. Die Beziehung von Topologie und Dynamik des Systems zueinander wird daran verdeutlicht.

Die Eigenschaften von Netzwerkfunktionen werden eine Rolle spielen. Netzwerke können wie für elektrische Schaltungen auch für physikalisch-chemischer Reaktionsprozesse realisiert werden [OPK71]. Mit Betrachtung chemischer Prozesse wird der Übergang in den Bereich der nicht-linearen System mit stationärem Verhalten vollzogen.

In einem weiteren Schritt wird das betrachtete nicht-lineare System zu einem offenen System mit einem Fluß erweitert. Die chemische Reaktion wird zu einem chemischen Reaktor ausgebaut, in dem die dynamischen Reaktionsgleichungen um eine Variable erweitert werden. Diese Variable formuliert Austausch von Energie und Materie zwischen dem Reaktor und seiner Umgehung. Die Variation des Flußparameters bewirkt eine Evolution verschiedener stationärer Gleichgewichtszustände. Diese Entwicklung mündet in einem Bereich, der durch multi-stationäre und instabile Zustände ausgezeichnet ist und nicht mehr durch die linearisieren-

den Onsager-Beziehungen charakterisiert werden kann. Häufig gibt diese, innerhalb eines engen Bereiches des Flusses als Kontrollparameter der Reaktion, ihr stationäres Verhalten auf und beginnt zu oszillieren [FAH95].

Wir gehen in diesem Kontext auf die Aussagefähigkeit verschiedener mathematischer Formalismen ein. Dann versuchen wir einen Ansatz für die Analyse des beobachteten Phänomens zu entwickeln, die eine Aussage über den der beobachteten Reaktion zugrundeliegenden Mechanismus zuläßt.

2.1 Lineare Systeme

Für lineare Systeme sind elektrische Schaltungen ein typisches Beispiel. Sie seien daher auch im Folgenden zur Darstellung gewählt. Ein lineares elektrisches Schaltnetzwerk besteht aus Komponenten (Widerständen, Kapazitäten und Induktivitäten), der Vernetzung der Komponenten und der Dynamik, die den zeitlichen Verlauf der Ströme und Spannungen angibt. Als nächstes werden die Regeln der Vernetzung behandelt.

Der Graph eines Netzwerk zeichnet sich durch Knoten, Zweige und Maschen aus. Ein Zweig wird als eine Strecke dargestellt, dessen Elemente (Endpunkte) als Knoten bezeichnet werden. In einem Netzwerk haben verschiedene Zweige gemeinsame Knoten d.h. sie sind vernetzt bzw. hängen zusammen. Als Weg wird eine zusammenhängende Strecke von Zweigen bezeichnet die einen Anfangsknoten mit einem Endknoten verbindet, insbesondere ist ein Weg bei dem man am Ende wieder zum Ausgangspunkt zurückkehrt eine Masche. Solche Netzwerke behandelt die Graphentheorie und beschreibt ihre Gesetzmäßigkeiten [Wil96] [CD91].

Elektronische Netzwerke ordnen jedem Zweig (Leiter) einen Strom i , der durch ihn fließt und eine Spannung u , die zwischen den beiden Knoten anliegt zu.

Ausgangspunkt für die Analyse eines Netzwerkes sind die zwei Kirchhoffschen Gesetze.

1. Die **Knotenregel** $\sum_{\mu=1}^m i_{\mu}(t) = 0$ besagt:
Alle Ströme, die in oder aus Knoten fließen, heben sich auf.
2. Die **Maschenregel** $\sum_{\nu=1}^n u_{\nu}(t) = 0$ besagt:
Längs eines Weges in einer Masche aus n Zweigen summieren sich die Spannungen zwischen Ausgangsknoten und jeweiligen Endknoten des Weges auf. Am Ende der Masche kehrt der Weg zum Ausgangsknoten zurück. Wegen der Eindeutigkeit sinkt die Spannungs-Differenz hier auf Null.

Durch Einführen von Maschenströmen vereinfacht sich die Darstellung der Stromverteilung im Netzwerk, die sich aufgrund der Knotenregel ergibt. Maschenströme sind lediglich fiktive Ströme, welche entlang geschlossener Wege (Maschen) im Netzwerk fließen können. Für die Vereinfachung ist ein Netzwerk so in Maschen zu zerlegen, daß jeder Zweigstrom durch Überlagerung der Maschenströme

eindeutig dargestellt werden kann. Die Familie der gewählten Maschenströme bildet eine Basis, in der jeder Zweigstrom entwickelt werden kann. So erfüllen die Zweigströme zwangsläufig die Knotenregel, da jeder einfließende Maschenstrom seinen Knoten wieder verläßt.

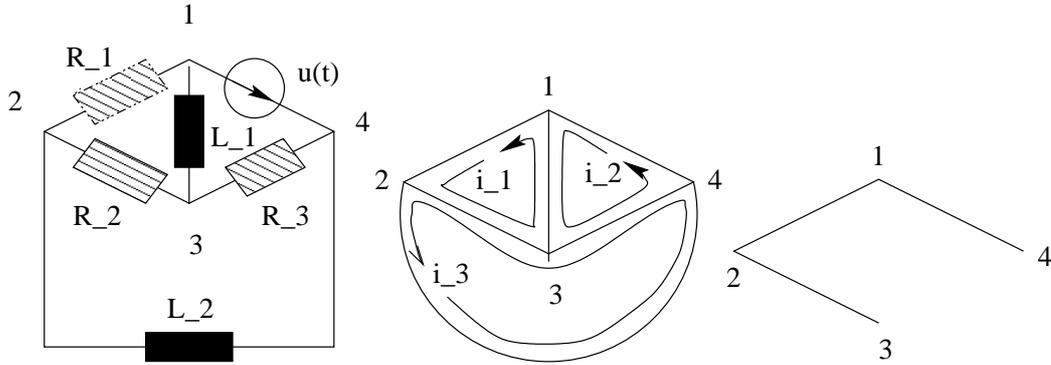


Abbildung 2.1: Elektrische Beispielschaltung. Links Schaltbild: Die Knoten sind von 1 bis 4 nummeriert. R_1, R_2 und R_3 sind Widerstände und L_1, L_2 Induktivitäten. Mitte: Graph der Vernetzung von der Schaltung. i_1, i_2 und i_3 sind Maschenströme. Rechts Baumkomplement des Graphen

Zwischen den Maschenströmen i_1, i_2 und i_3 und den Zweigströmen in Abb. 2.1-Mitte gilt der folgende Zusammenhang.

	i_1	i_2	i_3	
i_{12}	1	0	0	(2-1.1)
i_{23}	1	0	-1	
i_{34}	0	1	-1	
i_{41}	0	1	0	
i_{13}	-1	1	0	
i_{24}	0	0	1	

wobei i_{lk} der Zweigstrom des Zweiges ist, der Knoten l mit Knoten k verbindet.

Das Schema (2-1.1) ist als Matrix-Gleichung zu deuten, wobei die in der Kopfzeile aufgeführten Maschenströme mit der Matrixtabelle zu multiplizieren sind, um die in der linken Spalte stehenden Zweigströme zu erhalten. Die Bezugsrichtung ist durch die Reihenfolge ihrer Indizes festgelegt, $l < k$ ist die positive Bezugsrichtung. Je nachdem ob der Zweig in positiver, negativer Bezugsrichtung oder gar nicht durchflossen wird, sind die Matrixelemente 1, -1 oder Null.

Ein Basis-System von $m = l - (k - 1)$ Maschenströme beschreibt die Stromverteilung in einem Netzwerk vollständig (m : Maschenströme, l : Zweigströme, k :

Knoten). Im Bild 2.1-(rechts) bildet das Baumkomplement (englisch "Cutset") z.B. mit den Zweigströmen i_{12}, i_{23}, i_{41} ein System unabhängiger Ströme, das eine Angabe der Stromverteilung im Netzwerk ermöglicht. Die Ströme lassen sich mit den Maschenströmen durch das Gleichungssystem

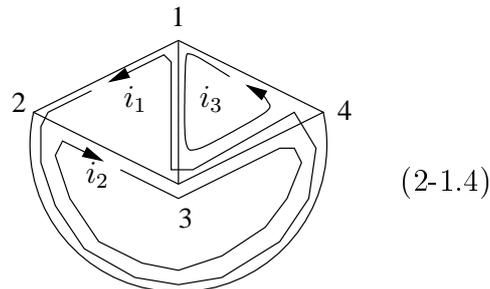
$$\begin{array}{c|ccc} & i_1 & i_2 & i_3 \\ \hline i_{12} & 1 & 0 & 0 \\ i_{23} & 1 & 0 & -1 \\ i_{41} & 0 & 1 & 0 \end{array} \quad (2-1.2)$$

darstellen:

Die gewählten Maschenströme i_1, i_2, i_3 bilden genau dann eine Basis, wenn die Koeffizientendeterminante des Gleichungssystems (hier ist sie 1) von Null verschieden ist.

Einer spezielle Darstellung mit Maschen (auch als Fundamentalmaschen bezeichnet) bei denen jeder Strom nur durch einen Zweig des Baumkomplementes fließt und dieser daher über den entsprechende Baum geschlossen wird, ist immer möglich. Bei geeigneter Orientierung der Maschenströme fällt hierbei jeder Zweigstrom des Baumkomplementes mit einem Maschenstrom zusammen. Die Koeffizientenmatrix des Gleichungssystems ist dann in diesem Falle die Einheitsmatrix.

$$\begin{array}{c|ccc} & i_1 & i_2 & i_3 \\ \hline i_{12} & 1 & 0 & 0 \\ i_{23} & 0 & 1 & 0 \\ i_{41} & 0 & 0 & 1 \end{array} \quad (2-1.3)$$



Die Maschenregel ergänzt die Fundamentalmaschendarstellung, indem über jeden Zweig (definiert durch die Knoten l und k) eine Potentialdifferenz u_{lk} angenommen wird. Die Maschen eines Basissystems der Maschenströme legen geschlossene Wege im Netzwerk fest. Das Gleichungssystem, daß die Spannungsabhängigkeit in den Maschen für das Beispiel Abb. 2.1-(mitte) formuliert ist:

$$\begin{array}{cccccc|c} u_{12} & u_{23} & u_{34} & u_{41} & u_{13} & u_{24} & \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{array} \quad (2-1.5)$$

wobei die Koeffizienten in der Matrix die Werte +1, -1 oder 0 haben. Für +1 stimmt die Zählrichtung der Zweigspannung bzw. des Zweigstromes mit der Maschenorientierung überein und für -1 nicht. Für 0 ist der Zweig kein Maschenelement. Da die Reihenfolge der Ströme und der Maschen in Gleichung (2-1.1) gleich ist, stimmen die Zeilen der Matrix in Gleichung (2-1.5) mit den Spalten

der Matrix (2-1.1) überein. Der ν -te Maschenstrom i_ν ist an der Darstellung der Zweigströme in der gleichen Weise beteiligt, wie die Zweigspannungen in der ν -ten Masche an den Spannungen.

Der Zusammenhang in (2-1.1) lässt sich allgemein schreiben als

$$i_\nu = A_{\nu,n} i_n \quad (2-1.6)$$

(– wobei $\nu = (l, k)$ eine Zusammenfassung der Indizes k und l aus (2-1.1) ist –) und der Maschenregel in (2-1.5) als

$$0 = M_{n,\nu} u_\nu \quad (2-1.7)$$

sodaß die Matrizen zueinander transponiert sind

$$A = M^T \quad (2-1.8)$$

insbesondere ist das Produkt $i_\nu u_\nu = 0$, da $(A_{\nu,n} i_n) u_\nu = i_n (M_{n,\nu} u_\nu) = 0$. Dieser Zusammenhang wird im Tellegen Theorem [OD71] noch näher spezifiziert.

Die Gleichungen (2-1.5) bzw. (2-1.1) bilden ein System linear abhängiger Beziehungen, die für jede beliebige Masche bzw. Knoten des Netzwerkes die Maschenregel bzw. Knotenregel sicherstellt. Sie lassen sich um beliebige Maschen des Netzwerkes erweitern. Dann erhält man ein System linear abhängiger Beziehungen für die weiterhin die Gleichung (2-1.8) gilt.

2.2 Laplace Transformation und lineare Differentialgleichungssysteme

In (2-1.1) wurde ein geeignetes Basissystem gewählt, in dem die zeitliche Verteilung der in einem Netzwerk fließenden Ströme beschreibbar ist. Als nächster Schritt wird die Dynamik dieser Ströme im Netzwerk durch ein Differentialgleichungssystem formuliert.

Die Dynamik, die in dem Netzwerk abläuft, verknüpft die Zweigspannungen mit den Zweigströmen über die Gesetze der Komponenten (siehe Abb. 2.1-links)).

$$(u_{12}, u_{23}, \dots) = \left(R_1, R_2, R_3, \frac{u(t)}{i_{14}}, L_2 \frac{d}{dt}, L_1 \frac{d}{dt} \right) * \begin{pmatrix} i_{12} \\ i_{23} \\ i_{24} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (2-2.9)$$

Wird Gleichung (2-2.9) und Gleichung (2-1.1) in Gleichung (2-1.5) eingesetzt, so ergibt sich für das Beispiel:

$$\begin{array}{ccc|c}
i_1 & i_2 & i_3 & \\
\hline
R_1 + R_2 + L_1 \frac{d}{dt} & -L_1 \frac{d}{dt} & -R_2 & 0 \\
-L_1 \frac{d}{dt} & R_3 + L_1 \frac{d}{dt} & -R_3 & u(t) \\
-R_2 & -R_3 & R_2 + R_3 + L_2 \frac{d}{dt} & 0
\end{array} \quad (2-2.10)$$

Aus (2-2.10) lassen sich die Maschenströme bestimmen. Durch die Gleichungen (2-1.1) sind dann alle Zweigströme und damit auch alle Zweigspannungen bekannt. Eine Laplace Transformation Λ mit

$$\Lambda(f) = \int_0^{\infty} f e^{-\sigma t} dt \quad \text{und} \quad \Lambda\left(\frac{df}{dt}\right) = \sigma \Lambda(f) - f(0) \quad (2-2.11)$$

auf das Gleichungssystem (2-2.10) angewandt:

$$\begin{array}{ccc|c}
\Lambda(i_1) & \Lambda(i_2) & \Lambda(i_3) & \\
\hline
R_1 + R_2 + L_1 \sigma & -L_1 \sigma & -R_2 & -L_1 i_2(0) \\
-L_1 \sigma & R_3 + L_1 \sigma & -R_3 & \Lambda(u) - L_1 i_1(0) + L_1 i_2(0) \\
-R_2 & -R_3 & R_2 + R_3 + L_2 \sigma & L_2 i_3(0)
\end{array} \quad (2-2.12)$$

Beachtenswert ist, daß die rechten Seiten nur Anfangswerte und externe Quellen enthalten. Das lineare Gleichungssystem (2-2.12) läßt sich nach den $\Lambda(i)$ auflösen.

Für $\Lambda(i_3)$ ergibt sich z.B:

$$\Lambda(i_3) = \Lambda(u) \frac{Q_3(\sigma)}{D(\sigma)} + \frac{P_3(\sigma)}{D(\sigma)} \quad (2-2.13)$$

$$\text{wobei} \quad Q_3(\sigma) = L_1(R_2 + R_3) \sigma + (R_1 + R_2) R_3 \quad (2-2.14)$$

$$P_3(\sigma) = b_2 \cdot \sigma^2 + b_1 \cdot \sigma + b_0 \quad (2-2.15)$$

$$D(\sigma) = (a_3 \sigma^3 + a_2 \sigma^2 + a_1 \sigma + a_0). \quad (2-2.16)$$

wobei $a_3 = 0$

$$a_2 = R_1 \cdot R_2 \cdot R_3$$

$$a_1 = R_2 \cdot R_1 \cdot L_1 + R_3 \cdot R_1 \cdot L_2 + R_2 \cdot R_3 \cdot L_2 + R_1 \cdot R_3 \cdot L_1$$

$$a_0 = L_1 \cdot L_2 (R_1 + R_2 + R_3)$$

$$b_2 = 0$$

$$b_1 = R_1 \cdot R_3 \cdot L_1 \cdot i_2 - R_2 \cdot R_3 \cdot L_1 \cdot i_1 + R_2 \cdot R_3 \cdot L_2 \cdot i_3 + R_3 \cdot R_1 \cdot L_2 \cdot i_3 - R_1 \cdot R_3 \cdot L_1 i_1$$

$$b_0 = L_1 \cdot R_1 \cdot L_2 \cdot i_3 + R_3 \cdot L_1 \cdot L_2 \cdot i_3 + R_2 \cdot L_1 \cdot L_2 \cdot i_3 - R_2 \cdot L_1 \cdot i_1 - L_1 \cdot R_3 \cdot i_1.$$

Die inverse Laplace Transformation Λ^{-1} liefert dann die explizite Lösung i_3 :

$$i_3 = \Lambda^{-1} \left(\Lambda(u) \frac{Q_3(\sigma)}{D(\sigma)} \right) + \Lambda^{-1} \left(\frac{P_3(\sigma)}{D(\sigma)} \right) \quad (2-2.17)$$

und entsprechende Ausdrücke für i_1 und i_2 .

Lineare Differentialgleichungssysteme mit konstanten Koeffizienten lassen sich mit der Laplace-Transformation lösen.

Die inverse Laplacetransformation erfordert die Zerlegung der Ausdrücke $\frac{Q(\sigma)}{D(\sigma)}$ und $\frac{P(\sigma)}{D(\sigma)}$ in Partialbrüche, wobei der Nenner in der Form $(\sigma - \sigma_1)(\sigma - \sigma_2)(\sigma - \sigma_3)$ geschrieben werden kann und die σ_1 bis σ_3 aus der Gleichung $D(\sigma) = 0$ gefunden werden, d.h. die Eigenwerte der Koeffizientenmatrix (2-2.12) sind.

In der Elektrotechnik wird üblicherweise zur Lösung die Fouriertransformation eingesetzt. Es ist dann σ durch $j\omega$ zu ersetzen, um die Formeln in dieser Darstellung zu erhalten.

Erwähnenswert ist noch eine Darstellung des Gleichungssystems (2-2.10) mit höheren Ableitungen aber weniger Gleichungen. Durch zweimalige Differentiation der dritten Gleichung (2-2.10)

$$-R_2 \frac{d^2}{dt^2} i_1 - R_3 \frac{d^2}{dt^2} i_2 + (R_2 + R_3) \frac{d}{dt} i_3 + L_2 \frac{d^3}{dt^3} i_3 = 0 \quad (2-2.18)$$

läßt sich durch sukzessives eliminieren der Ableitungen von i_1 und i_2 aus der ersten und zweiten Gleichung von (2-2.10) eine Gleichung

$$a_3 \frac{d^3}{dt^3} i_3 + a_2 \frac{d^2}{dt^2} i_3 + a_1 \frac{d}{dt} i_3 + a_0 = b_2 \frac{d^2}{dt^2} u + b_1 \frac{d}{dt} u + b_0 \quad (2-2.19)$$

herleiten. Die Lösungen der obigen Gleichung führt ebenfalls über $D(\sigma) = (a_3\sigma^3 + a_2\sigma^2 + a_1\sigma + a_0)$ zum gleichen Resultat. Wird sie mittels Laplacetransformation gelöst, folgt

$$(a_3\sigma^3 + a_2\sigma^2 + a_1\sigma + a_0)\Lambda(i_3) - P(\sigma) = (b_2\sigma^2 + b_1\sigma + b_0)\Lambda(u) \quad (2-2.20)$$

wobei

$\Lambda(i_3)$ = Laplacetransformierte der Systemantwort für i_3

$\Lambda(u)$ = Laplacetransformierte des Erregersignales u

$P(\sigma)$ = Linearkombination der Anfangswerte für $\frac{d^n}{dt^n} i_3$, ($n = 0 \dots 3$)

Die Lösung der Gleichung (2-2.20) ist äquivalent zu (2-2.17), wobei $Q(\sigma) = (b_2\sigma^2 + b_1\sigma + b_0)$.

In verallgemeinerter Form erhält man für (2-2.20)

$$(a_n\sigma^n + a_{n-1}\sigma^{n-1} + \dots + a_1\sigma + a_0)\mathbf{Y}(\sigma) - P(\sigma) = (b_m\sigma^m + b_{m-1}\sigma^{m-1} + \dots + b_1\sigma + b_0)\mathbf{X}(\sigma) \quad (2-2.21)$$

und für (2-2.13)

$$\mathbf{Y}(\sigma) = \frac{\mathbf{Q}(\sigma)}{\mathbf{D}(\sigma)} \mathbf{X}(\sigma) + \frac{\mathbf{P}(\sigma)}{\mathbf{D}(\sigma)} = \mathbf{H}(\sigma)\mathbf{X}(\sigma) + \mathbf{Y}_{ic}(\sigma) \quad (2-2.22)$$

Hierbei sind $\mathbf{Y}(\sigma) = \Lambda(i)$ und $\mathbf{X}(\sigma) = \Lambda(u)$ die Laplace-Transformierten von Signal- und Antwortfunktion und $P(\sigma)$ ist ein Polynom des Grades $n - 1$ in σ , bestehend aus Linearkombinationen der Anfangswerte der Funktion, $y(0)$ bis ihrer $n - 1$ -ten Ableitung $y^{n-1}(0)$.

Dabei ist:

$$\mathbf{H}(\sigma) = \frac{Q(\sigma)}{D(\sigma)} = \frac{(b_m\sigma^m + b_{m-1}\sigma^{m-1} + \dots + b_1\sigma + b_0)}{(a_n\sigma^n + a_{n-1}\sigma^{n-1} + \dots + a_1\sigma + a_0)} \quad (2-2.23)$$

die Netzwerkfunktion. Der letzte Term $\mathbf{Y}_{ic}(\sigma) = \frac{P(\sigma)}{D(\sigma)}$ in Gleichung (2-2.22) ist eine rationale Funktion, die von den Anfangsbedingungen (*ic* bedeutet "initial condition") in der Antwortfunktion und deren Ableitung abhängt, und für den Fall verschwindet, daß die Anfangswerte Null werden. Die vollständige Antwortfunktion $y(t)$ eines Erregersignals wird nun gefunden, indem die inverse Laplace-Transformierte der Gleichung (2-2.22) berechnet wird:

$$y(t) = \Lambda^{-1}\{\mathbf{H}(\sigma)\mathbf{X}(\sigma)\} + \Lambda^{-1}\{\mathbf{Y}_{ic}(\sigma)\} \quad (2-2.24)$$

Die Antwortfunktion ist eine Summe aus zwei Komponenten:

$$y(t) = y_{erzwungen} + y_{natürlich} \quad (2-2.25)$$

Wobei wir die erste Komponente als "erzwungene Antwort" bezeichnen:

$$y_{erzwungen} = \Lambda^{-1}\{\mathbf{H}(\sigma)\mathbf{X}(\sigma)\} \quad (2-2.26)$$

Diese Komponente hängt lediglich von dem Erregersignal ab und ist von den Anfangsbedingungen unabhängig. Sie wird auch als Nullzustandskomponente bezeichnet, da dieser Teil der Antwortfunktion durch ein System gegeben wird, das keine Anfangsenergie in reaktiven Komponenten gespeichert hat.

$$y_{natürlich} = \Lambda^{-1}\{\mathbf{Y}_{ic}(\sigma)\} \quad (2-2.27)$$

Der zweite Term ist die "natürliche Antwort", die lediglich von den Anfangswerten abhängt und unabhängig von dem erregenden Signal ist. Sie wird auch als Nulleingangs- oder quellenfreie Komponente bezeichnet. Das System produziert diese Komponente lediglich unter Verwendung von in reaktiven Elementen (Kapazitäten und Induktivitäten) gespeicherten Anfangsenergie.

Es ist exakt diese Eigenschaft, die Anfangsbedingung explizit in die Lösung einzubinden, welche die Laplace-Transformation zu einer hervorragenden Methode für die Analyse von Netzwerken macht.

Für den Fall verschwindender Anfangswerte ergibt sich die Netzwerkfunktion $H(\sigma)$ als Verhältnis der Laplace-Transformierten von Antwort- zu Eingangssignal:

$$\mathbf{H}(\sigma) = \left. \frac{\mathbf{Y}(\sigma)}{\mathbf{X}(\sigma)} \right|_{\mathbf{Y}_{ic}(\sigma)=0} \quad (2-2.28)$$

In dem Spezialfall verschwindender Anfangswerte $\mathbf{Y}_{ic}(\sigma) = 0$ und der Delta-Impulsfunktion als Erregerfunktion $x(t) = \delta(t)$, ist $\mathbf{X}(\sigma) = 1$ und die Systemantwort $y(t) = \Lambda^{-1} \{ \mathbf{Y}(\sigma) \} = \Lambda^{-1} \{ \mathbf{H}(\sigma)1 + 0 \} = \Lambda^{-1} \{ \mathbf{H}(\sigma) \}$. $y(t)$ wird in diesem Fall treffender als Impulsantwort auf $x(t)$ bezeichnet.

$$x(t) = \delta(t) \quad y(t) = h(t) \quad (2-2.29)$$

Offensichtlich sind die Invers-Transformierte der Netzwerkfunktion $h(t)$ und die Impulsantwort $y(t)$ gleich, wenn die Delta-Impulsfunktion $\delta(t)$ das Netz anregt. Die Netzwerkfunktion $\mathbf{H}(\sigma)$ finden wir daher durch die Invers-Laplace-transformierte von $h(t)$. Dies ist besonders wichtig wenn die Netzwerkfunktion auf experimentelle Weise bestimmt werden muß. Im weiteren Verlauf wird sich zeigen, daß wir exakt mit dieser Fragestellung für den Fall einer inversen Analyse konfrontiert werden.

In der Elektronik geht man üblicherweise davon aus, daß eine harmonische Schwingung das System erregt, also $u = Ue^{j\omega t}$. Damit geht Gleichung 2-2.12 über in

$$\begin{array}{ccc|c} I_1 & I_2 & I_3 & \\ \hline R_1 + R_2 + L_1\sigma & -L_1\sigma & -R_2 & -L_1 I_2(0) \\ -L_1\sigma & R_3 + L_1\sigma & -R_3 & U - L_1 I_1(0) + L_1 I_2(0) \\ -R_2 & -R_3 & R_2 + R_3 + L_2\sigma & L_2 I_3(0) \end{array} \quad (2-2.30)$$

wobei $i_1 = I_1 e^{i\omega t}$, $i_2 = I_2 e^{i\omega t}$ und $i_3 = I_3 e^{i\omega t}$ gesetzt ist.

Im Spezialfall der Elektronik ist $\sigma = j\omega$. Die Netzwerkfunktion $\mathbf{H}(j\omega)$ und die Gleichung (2-2.23) ergeben dann einen Bruch von zwei Polynomen in ω mit komplexzahligen Koeffizienten. Für das Beispiel aus Abb. 2.1-(links) ergibt sich nach (2-2.13) für

$$\mathbf{H}_3(j\omega) = \frac{b_1 j\omega + b_0}{-a_3 j\omega^3 - a_2 j\omega^2 + a_1 j\omega + a_0} = \frac{Q_3(j\omega)}{D(j\omega)} \quad (2-2.31)$$

Die Netzwerkfunktion läßt sich aus der Analyse der Systemantwort (dem Signal) auf eine Erregung (den Reiz) ermitteln. Sie ist nur aus den Eigenschaften der Komponenten und der Vernetzung zusammengesetzt. Analysiert man die Systemantworten eines Systems, so läßt sich demnach eine Netzwerkfunktion

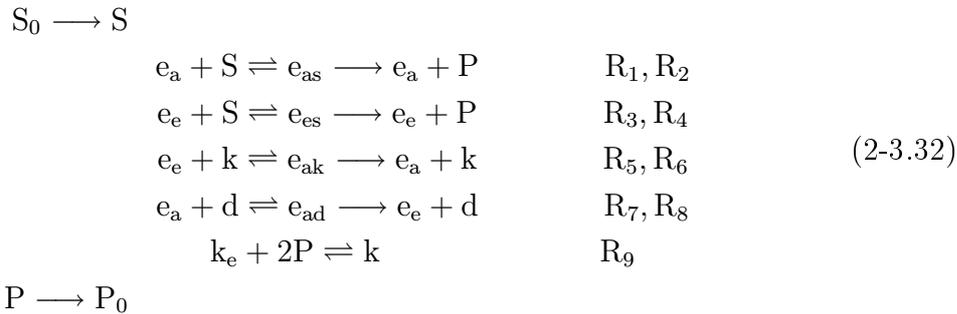
ermitteln. Jede Vernetzung von Systemkomponenten, die diese Netzwerkfunktion erzeugt, könnte die Systemantworten generiert haben. Die Netzwerkfunktion schränkt somit die möglichen Vernetzungen und Komponenten, aus denen das System aufgebaut sein könnte, erheblich ein. Im wesentlichen erlaubt sie ein mögliches Ersatzschaltbild für das System zu konstruieren. Die Netzwerkfunktion in (2-2.31) sagt z.B. aus, daß mindestens drei unabhängige Maschen in dem Schaltbild vorhanden sein müssen, da die Dimension von $D(j\omega) = 3$ ist. Weiterhin gibt es kein reelles ω für das $D(j\omega) = 0$, d.h. es ist keine Resonanz bzw. kein Schwingkreis aus Kapazität und Inaktivität vorhanden. Es lassen sich aus der Netzwerkfunktion noch weitere Kriterien für die Konstruktion von Ersatzschaltbildern ableiten. Für den Fall, daß ein Netzwerk nur aus reinen Widerständen besteht, ist $\mathbf{H}(j\omega) = c$ eine Konstante. Könnte man das Netzwerk dann in drei unabhängige Strommaschen wie in Abb. 2-1.4 zerlegen, gäbe es drei Konstanten für die Netzwerkfunktion $\mathbf{H}_i(j\omega) = c_i$ mit ($i = 1 \dots 3$), aus denen dann alle $\mathbf{H}(j\omega)$ dieses Systems als lineare Kombinationen erhalten werden können. Auch die $\mathbf{H}(j\omega)$ des Beispiels in Abb. 2-1.4 lassen sich durch lineare Kombination erhalten. Daraus folgt, daß sich aus der Analyse der Systemantworten (bzw. Signale) lediglich ein Ersatzschaltbild für das System erzeugen läßt. Die reale Systemstruktur muß sich dann allerdings auf dieses Ersatzschaltbild abbilden lassen. Um die reale Systemstruktur zu ermitteln, wären somit zusätzliche Untersuchungen notwendig. Dennoch läßt das Systemverhalten durch das Ersatzschaltbild vollständig beschreiben.

Die Laplace-Transformation überführt die mit der Differentialgleichung beschriebene Dynamik in eine algebraische Form. Das Verhalten von einzelnen Netz-Komponenten und die Antwort des Netzwerkes auf ein äußeres Signal kann in dieser Algebra leicht dargestellt werden.

2.3 Die Kinetik chemischer Reaktionssysteme

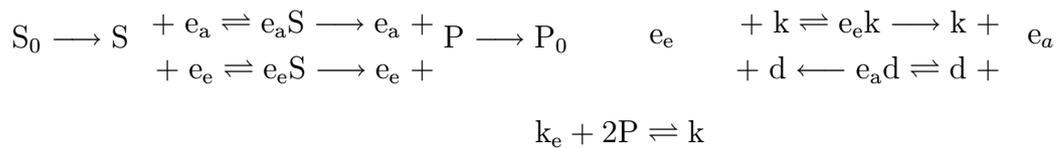
Als nächstes soll die Netzwerkstruktur aus Abschnitt 2.1 auf chemische Reaktionssysteme erweitert werden. Dazu wird als Beispiel ein Stoffwechselmodell des biochemischen Stoffwechselweges der Glycolyse aus der Literatur [GL72] herangezogen.

Für das Stoffwechselmodell soll der Reaktionsmechanismus durch das Schema beschrieben werden:



hierin sind S = Substrat und P = Produkt; e_a, e_e, k und d Enzyme. R_i ($i = 1 \dots 9$) bezeichnen die einzelnen Reaktionen. S_0 und P_0 stellen den Pool der Ausgangs- und Endprodukte dar.

Das Schema läßt sich auch alternativ darstellen:



Im Modell wird Stoff S_0 katalytisch nach P_0 überführt, wobei die Katalyse parallel entweder durch das Enzym e_a oder das Enzym e_e erfolgt. Die beiden Enzymformen e_a und e_e können wiederum durch die Enzyme d und k ineinander überführt werden. Schließlich steht das Enzym k im Gleichgewicht mit dem Produkt P in dem es zwei Produktmoleküle binden kann und dann in die inaktive Form k_e übergeht.

Dieser Reaktionsmechanismus läßt sich schematisch in einem Graphen darstellen.

Die der Maschenregel entsprechenden Gleichungen ergeben sich aus der Gibb'schen Gleichung

$$dG = \sum_i \mu_i d n_i \quad (2-3.33)$$

wobei μ_i das chemische Potential und n_i die Teilchenanzahl der Substanz i ist.

Gruppiert man die Summe nach chemischen Umsätzen:

$$dG = \sum_j A_j d \xi_j \quad (2-3.34)$$

wobei $A_j = \sum_k \mu_k$ die Affinität der chemischen Reaktion j und ξ_j ihre Reaktionslaufzahl ist.

Damit ergibt sich die Maschenregel für chemische Netzwerke zu

$$A_j - \sum_k \mu_k = 0 \quad (2-3.35)$$

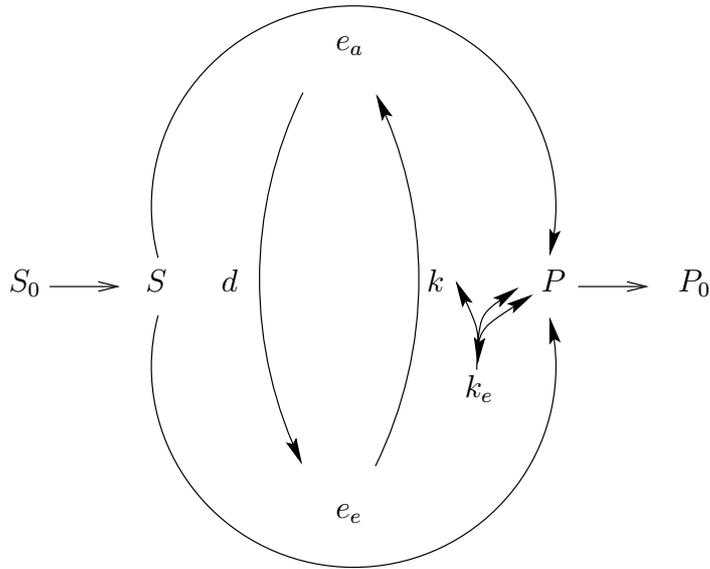


Abbildung 2.2: Graphische Darstellung der chemischen Reaktionswege für das Reaktionssystem 2-3.32. Bezeichnung siehe dort.

mit den Zweigpotentialen A_j und μ_k . Die Maschenströme ergeben sich zu den Reaktionsumsätzen

$$\frac{d\xi_j}{dt} \quad (2-3.36)$$

Das Potential über einen Zweig k ist entweder gegeben durch das Gesetz

$$\mu_k = \mu_k^0 + RT \ln c_k = RT \ln \left(\frac{c_k}{c_k^0} \right) \quad (2-3.37)$$

(– wobei R = Gaskonstante und T = absolute Temperatur ist –) welches ein nichtlineares Speicherelement von Molekülen der Substanz k darstellt, oder durch die Gesetze der chemischen Reaktionskinetik, die den Reaktionsumsatz in den Reaktionsschritten (Reaktionen q) beschreiben:

$$\frac{d\xi_q}{dt} = \bar{v}_q - \bar{v}_q^- \quad \text{mit } q = 1 \dots n \quad (2-3.38)$$

wobei \bar{v}_q die Reaktionsgeschwindigkeit in Hin- und \bar{v}_q^- die der in Rückrichtung ist.

Hierbei handelt es sich um ein resistives (irreversibles) Schaltelement das dem Gesetz

$$v_q = a e^{\left(\frac{\mu_q}{RT}\right)} \quad (2-3.39)$$

(– wobei $a =$ eine Konstante, $v_q =$ Reaktionsgeschwindigkeit und $\mu_q =$ chemisches Potential ist –)

gehört. Auch dieses Gesetz ist nicht-linear. Für zwei Reaktanden läßt sich das Gesetz umformen wenn die chemischen Potentiale μ_1 und μ_2 aus der Gleichung (2-3.37) eingesetzt werden.

$$v_q = a e^{\frac{\mu_1 + \mu_2}{RT}} = a e^{\left(\frac{\mu_0^1}{RT}\right)} c_1 e^{\left(\frac{\mu_0^2}{RT}\right)} c_2 = \bar{k} c_1 c_2 \quad (2-3.40)$$

In dieser Form werden die Gleichungen in der chemischen Kinetik benutzt. Die Gleichungen in (2-3.38) lassen sich auch schreiben als

$$\frac{d\xi_q}{dt} = a \left(e^{\frac{\bar{A}_q}{RT}} - e^{\frac{\bar{A}_q}{RT}} \right) \quad (2-3.41)$$

wobei die Affinität $\bar{A}_q = \sum_k \mu_k$ die Summe der Reaktanden und $\bar{A}_q = \sum_l \mu_l$ die der Produkte des Reaktionsschrittes q ist.

Das irreversible Element hat drei “Terminals” über die die Potentiale (\bar{A}_q, \bar{A}_q) anliegen. Es entspricht im elektronischen Analogon einem Transistor. Als drittes Element kann ein Potentialüberträger (Transformator mit einem Verhältnis der Ausgangs- zu Eingangsspannung von eins) vorkommen, wenn ein Reaktant mit sich selbst reagiert (z.B: in $2A \rightleftharpoons B$).

Mit den drei Schaltelementen erhält man das chemisch-thermodynamische Reaktions-Netzwerk in Form eines Graphen Abb. 2.3:

Um das zugeordnete Differentialgleichungssystem zu ermitteln, kann man analog dem elektrischen Fall verfahren, und für die Zweig-Ströme wie Zweig-Spannungen die entsprechenden Gesetze des Reaktionsmechanismus einsetzen. Der Zusammenhang zwischen dem Reaktionsumsatz ξ_q und der Konzentrationsänderung c_r wird in der stochiometrischen Matrix \mathbf{M}^{St} dargestellt (siehe chemische Kinetik z.B:[GDLM88]).

$$c_r - c_{r0} = \mathbf{M}_{rk}^{St} \cdot \xi_k \quad (2-3.42)$$

wobei r der Index für die Komponenten und k für die Reaktionen ist. c_{r0} sind die

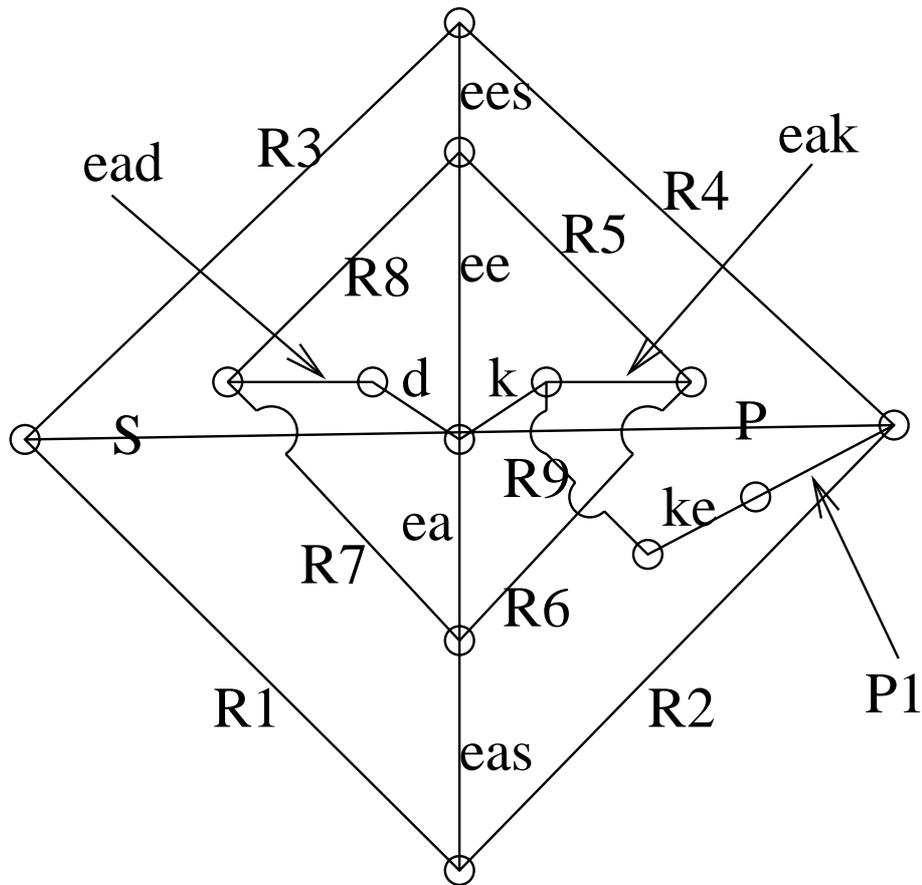


Abbildung 2.3: Graph des Reaktionsschemas(2-3.32). Es sind mit R_l mit ($l = 1 \dots 9$) die transistoranalogen Schaltelemente der irreversiblen Reaktionen, mit dem Namen der reagierenden Substanzen die kapazitiven speichernden Schaltelemente bezeichnet sind. Das Übertragungselement P_1 stellt das Schaltelement eines Transformators dar.

Ausgangskonzentrationen.

M^{St}	R_0	R_1	R_2	R_3	R_4	R_5	R_6	R_7	R_8	R_9	R_{00}
S_0	-1										
S	1	-1		-1							
e_a		-1	1				1	-1			
e_{as}		1	-1								
e_e				-1	1	-1			1		
e_{es}				1	-1						
k						-1	1			1	
e_{ak}						1	-1				
d								-1	1		
e_{ad}								1	-1		
k_e										-1	
P			1		1	18				-2	-1
P_0											1

(2-3.43)

Die Matrix \mathbf{M}_{rk}^{St} für den Reaktionsmechanismus (2-3.32) ist in (2-3.43) wiedergegeben und läßt sich in Zweige für Hin- und Rückreaktion der irreversiblen Elemente zerlegen und aus zwei Matrizen \mathbf{M}_{St}^- und \mathbf{M}_{St}^+ zusammen setzen:

$$\mathbf{M}^{St} = \mathbf{M}_{St}^+ - \mathbf{M}_{St}^- \quad (2-3.44)$$

deren Elemente durch entsprechende Wahl der Flußrichtung nur positiv sind. Die Matrizen stellen die Vernetzung der Zweige durch Knoten im Netzwerk dar.

Im dem oben behandelten elektronischen Fall linearer Zusammenhänge (Gesetze) zwischen den Potentialen und Flüssen eines Zweiges, konnten die Gleichungen für die Dynamik in Form von Differentialgleichungen der Ströme i_k bzw. der Potentiale u_j formuliert werden. Hier wird jeder Maschenstrom mit den Konzentrationen nicht-linear verknüpft, sobald er von mehr als einem kapazitiven Zweig (chemische Substanz) getrieben wird.

Die zugehörigen Differentialgleichungen ergeben sich, indem man die stoichiometrischen Relationen (2-3.42) differenziert

$$\frac{dc_r}{dt} = \mathbf{M}^{St} \frac{d\xi_q}{dt} \quad (2-3.45)$$

daraus ergibt sich mit den Gleichungen (2-3.38)

$$\frac{dc_i}{dt} = \mathbf{M}_{iq}^{St} (\bar{v}_q^- - \bar{v}_q^+) \quad (2-3.46)$$

Wie im elektrischen Fall repräsentiert die Matrix \mathbf{M}^{St} ein überbestimmtes Gleichungssystem. Es läßt sich zerlegen in

1. unabhängige ξ_i mit $i = 1 \dots p$ und frei wählbare ξ_l mit $l = p \dots n$,
2. c_j mit $j = 1 \dots p$, die sich aus den ξ_i bestimmen lassen,
3. c_k mit $k = (p + 1) \dots m$. m Anzahl der Substanzen, n Anzahl der Reaktionen.

In der Reaktionskinetik stellen die ξ_l alternative Reaktionswege dar, die von denselben Ausgangsreaktanden zu denselben Endprodukten führen. Sie dürfen $\xi_l = 0$ gesetzt werden, falls nur der Endzustand interessiert und nicht der Reaktionsweg. Die ξ_i beschreiben den Reaktionsverlauf und bestimmen über die Gleichung $c_j = \mathbf{M}_{ik}^{St} \xi_i$ die Konzentrationen c_j . Umgekehrt gilt $\xi_i = \mathbf{M}_{ik}^{St^{-1}} c_j$. Setzt man die ξ_i in die Gleichung für c_j ein, so ergeben sich die Massenerhaltungssätze

$$c_k = \mathbf{M}_{ki}^{St} \mathbf{M}_{ij}^{St^{-1}} c_j \quad (2-3.47)$$

für Konzentrationen. Sie besagen, daß eine Molekülgruppe oder die Ladung insgesamt erhalten bleibt sich aber unterschiedlich auf die Reaktionsprodukte verteilen kann. Dies muß in (2-3.46) berücksichtigt werden um ein lösbares Differentialgleichungssystem zu erhalten.

Die Gleichungen (2-3.47) überführen (2-3.46) in ein autonomes Differentialgleichungssystem vom Typ

$$\frac{dc_k}{dt} = f_k(c_j) \quad \text{mit } k, j = 1 \dots n \quad (2-3.48)$$

weil die Gesetze die es erzeugen zeit- und ortsunabhängig sind.

Die Gleichungen (2-3.38) lassen meist weitere Vereinfachungen zu. Oft ist nämlich $\bar{v}_q \approx \bar{v}_q$ und $\frac{d\xi_q}{dt} \ll \bar{v}_q$, dann ist die Reaktion nahezu im Gleichgewicht und es gilt mit guter Näherung für $\bar{v}_q = \bar{v}_q$ das Massenwirkungsgesetz, wenn z.B. c_1 , c_2 und c_3 die an der Reaktion beteiligte Komponenten sind:

$$\frac{c_1 \cdot c_2}{c_3} = \frac{\bar{k}}{\bar{k}} \quad \text{oder logarithmiert:} \quad (2-3.49)$$

$$\log c_1 + \log c_2 - \log c_3 = pK \quad \text{bzw. allgemein } \mathbf{M}_{il}^{St} \log c_i = pK_l \quad (2-3.50)$$

Diese Gleichungen werden wie Gleichungen (2-3.47) zu Nebenbedingung des Differentialgleichungssystems. Schließlich gibt es in Gleichung (2-3.38) noch Reaktionen bei denen $\bar{v}_q \gg \bar{v}_q$ oder $\bar{v}_q \ll \bar{v}_q$ d.h. entweder die Hin- oder die Rückreaktion so gering ist, das sie das Reaktionsgeschehen kaum beeinflusst und daher Null gesetzt werden können. Diese Reaktionen können aber durchaus zu einem späterem Zeitpunkt auf einer sehr viel größeren Zeitskala durchaus wichtig werden. Auf einer Zeitskala wird der Reaktionsverlauf durch

1. die Erhaltungssätze Gleichung (2-3.47)
2. die Massenwirkungsgesetzte Gleichung (2-3.49)
3. Differentialgleichungen mit geschwindigkeitsbestimmenden \bar{v}_q (2-3.46)

bestimmt, aus denen dann ein Differentialgleichungssystem vom Typ (2-3.48) folgt.

Die Dynamik (Kinetik) eines Reaktionssystems wird durch das Gleichungssystem (2-3.48) mit dazugehörigen Anfangsbedingungen beschrieben. Die Kinetik zeigt allerdings einige Besonderheiten. So laufen die einzelnen Reaktionsschritte mit sehr unterschiedlichen Zeitskalen ab. Es gibt Reaktionsschritte die sich schon nach 10^{-8} sec dem Gleichgewicht genährt haben, andere benötigen μ sec oder m sec und wieder andere benötigen Minuten bis Stunden. Betrachtet man die Kinetik im Zeitbereich von einigen Minuten, so sind alle Reaktionsschritte, die in sec oder schneller ablaufen in einem stationären Gleichgewicht, d.h. ihre Reaktionsraten sind etwa Null. Für eine Näherung wird $\frac{d\xi_q}{dt} = 0$ gesetzt. Auch die Komponenten können in sehr unterschiedlichen Konzentrations-Skalen von n Molar bis Molar auftreten und sind dann teilweise nicht zu berücksichtigen.

Auf diese Weise lassen sich die Reaktions-Flüsse (Raten) auf einer betrachteten Zeitskala in solche einteilen, die zur zeitlichen Änderung der Konzentrationen

einer Komponente beitragen und solche die es nicht oder nahezu nicht tun, und dadurch zu vernachlässigen sind. Eine Änderung eines Systems unter derartigen Bedingungen (Quasigleichgewicht) wird häufig mit Relaxation bezeichnet. Solche Bedingungen treten auf bei nicht-linearen Oszillationen auf und werden dann als Relaxations-Oszillationen bezeichnet (z.B. auch bei dem Modellsystem (2-3.32).

2.3.1 Chemischer Reaktor

Eine Besonderheit des Ablaufes von chemischen Reaktionen wird in sogenannten "Chemischen Reaktoren" erreicht. Sie sind dadurch ausgezeichnet, daß die Ausgangsprodukte dem Reaktor (Reaktionsvolumen) zugeführt werden und die Reaktionsprodukte abgeführt werden. Sie sind daher offene Systeme. Ein spezieller Fall liegt vor, wenn die Ausgangsprodukte kontinuierlich und in konstanter Konzentration im gesamten Reaktionsvolumen zugeführt werden (dies kann im CSTR dem "Continuously Stirred Tank Reactor" durch Rühren angenähert werden, siehe Abb 2.3.1.

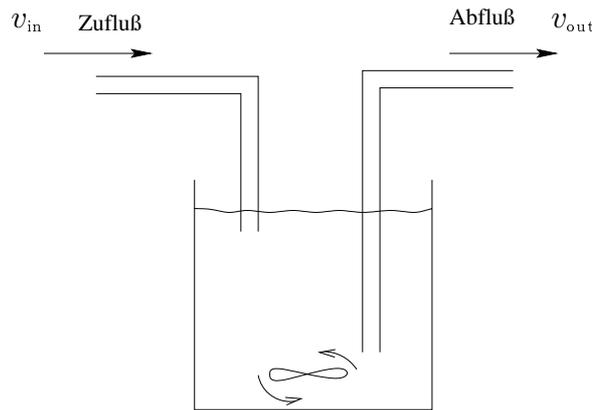


Abbildung 2.4: Skizze eines "Continuously Stirred Tank Reactors" (CSRT)

v_{in} ist dann die Zufuhr rate von Substanzen, eine extern vorgegebene Größe, und v_{out} die Rate der abgeführten Substanzen (d.h. Volumenabflussrate mal Konzentration). Dabei ist zu beachten, daß die Zufuhrsubstanzen so zu wählen sind, daß die Massenerhaltungssätze (2-3.47) erfüllt sind und die Abflußrate so zu wählen, daß das Reaktionsvolumen konstant bleibt.

Häufig lassen sich Reaktionssysteme unter solchen Bedingungen durch nur eine charakteristische Funktion beschreiben. Dies sei an dem Modellsystem demonstriert.

$$\frac{dx}{dt} = v_{xin} - v_x + v_y - v_{xout} \qquad \frac{dy}{dt} = -v_y + v_x - v_{yout} \qquad (2-3.51)$$

wobei v_{in} und v_{out} die Zufuhr- bzw. Abflußraten von x bzw. y entsprechend ihrer Indizierung sind. v_x und v_y sind die Umsatzraten mit denen x in y bzw. y in x umgesetzt wird.

Wird $x = \xi_1$, $y = \xi_2$, $v_{x_{\text{in}}} = v_{\text{in}}$, $v_{x_{\text{out}}} = 0$, $v_{y_{\text{out}}} = k \cdot \xi_2$ und $\phi(\xi_1, \xi_2) = v_y - v_x$ gesetzt, so ergibt sich das Differentialgleichungssystem, das in 4.2 später als Test-Modell verwandt wird.

$$\frac{d\xi_1}{dt} = \phi(\xi_1, \xi_2) - v_{\text{in}} \quad \frac{d\xi_2}{dt} = \alpha \phi(\xi_1, \xi_2) - k\xi_2 \quad (2-3.52)$$

Hierin gibt $\phi(\xi_1, \xi_2)$ eine empirische Beschreibung des Reaktionssystem.

Wie dieses Gleichungssystem aus dem Schema (2-3.32) hergeleitet und vereinfacht wird ist in der Literatur gegeben, siehe Goldbeter [Gol97] und soll hier nicht nachvollzogen werden.

2.3.2 Analyse eines Systems

Um ein System zu charakterisieren, muß es analysiert werden. Im Vorangegangenen ist davon ausgegangen, daß die Struktur der Verknüpfungen der Komponenten des betrachteten Systems bekannt ist, und das daraus das dynamische Verhalten hergeleitet wird. In der Realität ist meist wenig über die Struktur und die Komponenten bekannt, dagegen läßt sich das zeitliche Verhalten irgendwelcher Größen des Systems messen (inverses Problem). Um Aussagen über das System zu erhalten, muß man sich den Aufbau ansehen. In den bisher betrachteten Systemen besteht er aus

1. Typen von Komponenten, den Gesetzen,
2. der Anzahl der Komponenten,
3. der Vernetzung der Komponenten die eine Basis für die Systemvariablen bildet, und z.B. in einem Graphen dargestellt werden kann,
4. Signalen (z.B: externen Zuflüssen), auf die das System reagiert,

aus denen sich die Dynamik bzw. Kinetik ergibt. Falls die Dynamik auf lineare Gleichungssysteme führt, so ist wie bei elektronischen Systemen über die Netzwerkfunktion, die Beschreibung des Systems gegeben. In gleicher Weise könnte man andere lineare Systeme z.B. auch chemische Reaktionsmechanismen untersuchen. Da es sich bei den Systemen um thermodynamische Systeme handelt, gibt es neben der Möglichkeit, das ein externes Signal, daß ein Potential bzw. einen Fluß in das System einführt, die Möglichkeit die Gesetze über ihre Parameter (Widerstand, Geschwindigkeitskonstanten usw.), über Systemvariablen wie Temperatur, Druck, usw. zu beeinflussen d.h. zu stören. Dies wird für chemische Reaktionssysteme,– weil sie sich in Gleichgewichtsnähe wegen der Onsager

Beziehungen [Ons31] linear verhalten, zur Analyse in der chemische Relaxationstheorie angewandt. Sie hat zur Auflösung vieler Reaktionsmechanismen beigetragen [Eig63].

Schließlich ist es möglich die Vernetzung zu verändern z.B. durch Zugabe eines Katalysators (Enzyms). Das ist zwar eine sehr effektive Weise Information über das System zu gewinnen, aber es setzt meist auch detailliertere Kenntnisse über den System-Mechanismus voraus.

Für nicht-lineare Systeme, ist der lineare Zusammenhang zwischen den Signalen (Erregerfunktion) und der Systemantwort (Meßwert), der über die Laplace-Transformation die Netzwerkeigenschaften liefert, nicht mehr gegeben. Hier muß nach alternativen Analysemethoden gesucht werden.

Die “theory of generalized frames” (eine diskrete - mehrskaligen - Fenster - Methode), ist eine Signaltransformationen, die der Laplacetransformation (Fouriertransformation) sehr ähnlich ist, aber mit anderen Eigenschaften, die im Kapitel 3 näher erläutert werden.

2.4 Thermodynamische Systeme

Wir verallgemeinern die Sichtweise von den eben analysierten elektronischen und chemischen Netzwerken auf Systeme der Thermodynamik von nicht-linearem und nicht-stationärem Charakter. Dabei werden uns die folgenden Aussagen leiten:

- Bei Änderungen thermodynamischer Größen (Temperatur, Druck, etc) ändern sich die Eigenschaften der Strukturelemente wie Widerstand, Induktivität und Kapazitäten, wohingegen die topologische- also die Netzstruktur invariant bleibt.
- Wesentlich ist, zu jedem thermodynamisch realisiertem System ein repräsentatives Netzwerk mit generalisierten Systemvariablen (Flüssen, Potentialen) formulieren zu können, deren Dynamik durch generalisierte Prozesse dargestellt wird. Erfüllen die Systemvariablen vorgegebene physikalische Gesetze, werden durch die generalisierten Prozesse physikalische Prozesse realisiert.
- Dieses das System repräsentierende Netzwerk kann tatsächlich mehr Informationen beinhalten als eine Differentialgleichung. In der Differentialgleichung tauchen lediglich die differenzierbaren Systemkomponenten als Variablen auf. Beim Übergang von der Netzwerkformulierung zur Differentialgleichung gehen die nicht differenzierbaren Anteile der topologischen Struktur des Netzwerkes verloren.

Wir gehen nun etwas näher auf den Zusammenhang zwischen den beschreibenden Systemvariablen und der Systemtopologie ein. In den meisten thermodynamischen Systemen wird die Energie als Produkt von quell-freien und rotations-freien

Vektorfeldern mittels Potentialen beschrieben. Es handelt sich um eine dynamische Variable einer Potentialfunktion und einer dazu konjugierten dynamischen Variable, die den Fluß als eine lokal erhaltende Größe repräsentiert. Das dies generell so ist, kann an der Legendre-Transformierten der Gibbsschen Gleichung gesehen werden. Es ist die allgemeinere Form der Gleichung (2-3.33)

$$dG = TdS - pdV + \sum_i \mu_i dn_i + HdB + EdQ \quad (2-4.53)$$

Die Theorie der elektrischen Netzwerke befaßt sich ausschließlich mit den beiden letzten Termen, den für die elektrische Kapazität und für die induktive Energie. Die chemischen Reaktionen befassen sich mit dem drittletzten Term. Das Ersatzschaltbild eines Lautsprechers ist ein Beispiel für mechanische Systeme, die durch pdV darstellt werden. In der gleichen Weise wie für das elektrische und chemische Netzwerk lassen sich für thermodynamische Systeme Flüsse (Umsätze) und Kräfte (Potentiale), die die Flüsse treiben, in einer Netzwerkstruktur formulieren. In diesem Kontext ist die Rolle der Kirchhoff-Gesetze nicht zufällig. Die durch diese Gesetzmäßigkeiten bedingte Topologie (Vernetzung) stellt sehr restriktive Rahmenbedingungen für die Flußvariablen (Mengenerhaltung), und die Kraftvariablen (Eindeutigkeit der Potentiale) dar.

Eine der daraus folgenden wichtigsten Konsequenzen ist im Tellegen Theorem formuliert.

2.4.1 Tellegens Theorem

Tellegens Theorem: Sei \mathbf{v} ein Vektor für die Potentiale u_i (Spannung, chemisches Potential, Druck etc.) über die Netzwerkzweige i und sei \mathbf{j} ein Vektor für die Flüsse durch die zugehörigen Netzwerkzweige i (Strom, chemischer Reaktionsfluß, Volumenänderung etc.), dann gilt:

$$\mathbf{v}^T \mathbf{j} = 0 \quad (2-4.54)$$

- Ein thermodynamisches System kann in orthogonale Komponenten zerlegt werden.

Verallgemeinert gilt für ein Netzwerk wenn:

für die Knoteninzidenz-Matrix \mathbf{N} :

$$N_{ij}(x) = \begin{cases} 1 & \text{der Zweigflux } i \text{ verläßt den Knoten } j \\ -1 & \text{der Zweigflux } i \text{ trifft am Knoten } j \text{ ein} \\ 0 & \text{der Zweigflux } i \text{ ist mit dem Knoten } j \text{ nicht verbunden} \end{cases}$$

und für die Maschen-Strom-Matrix \mathbf{M} :

$$M_{ik}(x) = \begin{cases} 1 & \text{der Zweigflux } i \text{ bindet Masche } k \text{ in } + \text{ Richtung ein} \\ -1 & \text{der Zweigflux } i \text{ bindet Masche } k \text{ in } - \text{ Richtung ein} \\ 0 & \text{der Zweigflux } i \text{ gehört nicht zur Masche } k \end{cases}$$

die Kirchhoff-Knotenregel $\mathbf{N}\mathbf{j} = \mathbf{0}$ und die Maschenregel $\mathbf{M}\mathbf{v} = \mathbf{0}$ gelten, wobei die Matrizen \mathbf{N} und \mathbf{M} der Knoteninzenz- bzw. der Maschenstrom-Matrix im elektrischen Netzwerk entsprechen. Auch die topologische Identität (2-1.8) gilt.

$$\mathbf{N}\mathbf{M}^T = \mathbf{0} \quad \text{und} \quad \mathbf{M}\mathbf{N}^T = \mathbf{0} \quad (2-4.55)$$

Mit dem Übergang zu infinitesimal engen Maschen gehen die topologischen Identitäten in die bekannten Vektoridentitäten über, gültig für alle differenzierbaren Felder \mathbf{j} und $\bar{\psi} = \psi - \psi^0$:

$$\text{div} \cdot \text{curl}(\mathbf{j}) = 0 \quad \text{und} \quad \text{curl} \cdot \text{grad}(\bar{\psi}) = 0 \quad (2-4.56)$$

Betont sei, daß es sich hier nicht um Netzwerkanalogien im herkömmlichen Sinne handelt, sondern um formale mathematischen Strukturen, die sowohl für die Theorie der elektrischen Netzwerke wie auch für andere Systeme wie die der Thermodynamik anwendbar sind.

Die Strom- und Flußvariablen liegen demnach in festen orthogonalen Subräumen, den Nullräumen der Matrizen \mathbf{N} und \mathbf{M} . Es handelt sich hier um ein rein topologisches Ergebnis, das vollkommen unabhängig von Annahmen über die Beziehungen zwischen Netzwerkkomponenten oder möglichen stationären Zuständen ist. Die einzigen Annahmen bestehen in Erhaltungen von z.B. der Flußerhaltung, der Ladungserhaltung und der Teilchenerhaltung.

Aus diesem Theorem folgt, daß in einem geschlossenen thermodynamischen System die freie dissipative Energie irreversibler Prozesse gleich der Änderung der freien Energie reversibler Prozesse ist. Für ein isothermes, isobares System gilt:

$$\left(\frac{dG}{dt} \right)_{rev} + \phi = 0 \quad (2-4.57)$$

wobei G die freie Energie und ϕ die dissipative Funktion ist.

Die Bedeutung dieses Theorems kann in wesentlich allgemeinerem Sinne interpretiert werden. Wir betrachten beispielsweise zwei thermodynamische Systeme S_1 und S_2 (– etwa elektrische Netzwerke –) mit unterschiedlichen Prozessen und Beziehungen zwischen den Elementen, aber der gleichen Topologie, dann sagt Tellegens Theorem aus:

$$\begin{array}{ll} \mathbf{v}_1^T \mathbf{j}_1 = 0 & \text{aber auch:} \quad \mathbf{v}_1^T \mathbf{j}_2 = 0 \\ \mathbf{v}_2^T \mathbf{j}_2 = 0 & \mathbf{v}_2^T \mathbf{j}_1 = 0 \end{array} \quad (2-4.58)$$

Dieser Satz von Gleichungen ist selbst dann erfüllt, wenn S_1 und S_2 vollkommen unterschiedliche thermodynamische Prozesse darstellen. Darüber hinaus

kann $v_1(t)$ ein Potential in S_1 zur Zeit t darstellen, und $j_2(\tau)$ einen Fluß in S_2 zu irgendeinem anderen Zeitpunkt τ sein, dann gilt:

$$\mathbf{v}_1(t)^T \mathbf{j}_2(\tau) = 0 \quad (2-4.59)$$

Es ist demnach möglich, ein thermodynamisches System, das durch eine bestimmten Topologie definiert ist, in zueinander orthogonale Komponenten zu zerlegen. Wir werden später versuchen, uns diese Eigenschaft für die Konstruktion eines die Dynamik des Systems beschreibenden Raumes nutzbar zu machen (siehe 3-3.81).

2.4.2 Konstruktion einer Topologie

Am Beispiel des topologischen Graphen Abb. 2.3 assoziieren wir Reaktionssubstanzen mit kapazitiven Eigenschaften eines Netzwerkzweiges. Jede Reaktion assoziieren wir mit einem geschlossenen Kreis bzw. einer Masche des Netzes. Die Affinität der Reaktion r erkennen wir als Potentialgefälle über einen Widerstand der in einem Reaktionskreis bzw. Netzwerkkreis bzw. eine Netzwerkmasche r enthalten ist und die dissipative Komponente des Prozesses repräsentiert. Auf diese Weise charakterisiert der Strom \mathbf{j} durch diesen Widerstandszweig, mit der Spannung \mathbf{v} als Potentialgefälle über diesen Zweig vollständig das dynamische Verhalten dieses Reaktionskreises. In dem die als Widerstände konzipierten Komponenten R_i den Verbindungen und die kapazitiven Zweige als Komponenten des Baumes erkannt werden, ergibt sich eine natürliche Zerlegung der die Netzwerke bzw. -Maschen beschreibenden Matrix \mathbf{M} . Somit repräsentieren die verbindenden Variablen thermodynamische Eigenschaften der chemischen Reaktion. Mit dieser Zerlegung gibt es in jedem Reaktionskreis genau eine verbindende Variable bzw. ein Bindeglied für die dissipativen Eigenschaften, so daß die Matrix der Reaktionskreise bzw. die Maschenmatrix geschrieben werden kann als:

$$\mathbf{M} = [I|\nu] \quad (2-4.60)$$

Dies zeigt den Zusammenhang zwischen dem topologischen Graphen und der Stoichiometrie-Matrix \mathbf{M}^{St} . Ersterer kann sofort aus der Matrix ν bestimmt werden, wenn diese bekannt ist.

Werden die Verbindungsvariablen (Widerstände) mit r und die Baumvariablen (Kondensatoren) mit c numeriert folgt aus Tellegens Theorem für:

$$j_r^T \frac{d\mathbf{v}_r}{dt} = -j_c^T \frac{d\mathbf{v}_c}{dt} = -\mathbf{j}_c^T D \mathbf{f}_c(\mathbf{q}) \frac{d\mathbf{q}_c}{dt} = -\mathbf{j}_c^T D \mathbf{f}_c(\mathbf{q}) \mathbf{j}_c \leq 0 \quad (2-4.61)$$

wobei $D\mathbf{f}_c(\mathbf{q})$ die Jacobi-Matrix von $\mathbf{f}_c(\mathbf{q})$ und f_c die Funktion der Gleichung (2-3.37) ist.

Diese Beziehung für stationäre Zustände gilt für eine topologische Struktur unabhängig von der Natur der Variablen, solange diese Variablen den Kirchhoffschen Gesetzen genügen.

Diese Darstellung chemischer Reaktionen zeigt gegenüber der konventionellen verschiedene Vorteile. Die topologischen Beziehungen und Abhängigkeiten werden sofort sichtbar. Um beispielsweise einen stationären Zustand zu bekommen, muß mindestens in einem Reaktionskreis kein kapazitives Element enthalten sein. Ferner müssen in Abb. 2.3 die Substanzen S_0 und P_0 aus (2-3.32) sogenannte Quellenzweige sein (Spannungsquellen), was bedeutet, daß die korrespondierenden Reaktionssubstanzen durch einen äußeres Reservoir konstant gehalten werden müssen. (Wir erkennen hier die Spannungsquelle als Grenzwert eines Kondensators, dessen Spannung unabhängig von der Ladung ist.) Wir wenden das Kirchhoffsche Stromgesetz auf jeden Knoten des Graphen an und erhalten sofort die Integrale der Reaktion, deren Bedeutung in der Restriktion liegt, daß lineare Kombinationen der Substanzen während der Reaktion konstant bleiben müssen (Massenerhaltung). Ein Ergebnis aus der Graphentheorie besagt, daß der Rang der Knoten-Inzidenzmatrix, \mathbf{N} $n - 1$ ist. Deshalb erzeugt diese Matrix einen vollständigen und nicht redundanten Satz von Integralen der Reaktion. Wir benutzen diesen Begriff hier in Anlehnung an den der Integrale einer Bewegung.

2.4.3 Die minimale Entropie-Produktion

- Wir werden nun einen Zusammenhang zwischen einem Extremalprinzip und der Systemtopologie herstellen.

Im Jahre 1891 hat Maxwell das "Theorem der minimalen Hitze" (Maxwell, 1892) mit der Aussage formuliert, daß in linearen, lediglich aus Widerständen bestehende und von konstanten Quellen angetriebene Stromkreise, der Fluß derart verteilt ist, daß die dissipative Energie bzw. freigesetzte Hitze, P , minimiert wird. Da wir den Prozeß als isotherm betrachten, teilen wir die in den Widerständen freigesetzte Hitze durch die Umgebungstemperatur T und finden $\frac{Q}{T} = \frac{dS}{dT}$. Die Entropieproduktion ist ebenfalls minimal. Eine eingehendere Betrachtung dieses Theorems offenbart die Möglichkeit, die Schlußfolgerung der minimalen Entropie [GS85] auf beliebige durch Kirchhoff-Variablen beschreibbare thermodynamische Systeme zu generalisieren.

Zunächst wird die zu minimierende Größe P durch die Kirchhoff-Variablen τ und j definiert. Um dieses Funktional zu minimieren werden die Variablen variiert. Aus Tellegens Theorem folgt, daß die Variation des Funktionals gleich der Variation der durch die Kirchhoff-Variablen beschriebenen Reaktionen gleich Null wird. Diese Bedingung stellt ein Kriterium für die mögliche Topologie eines Netzwerkes dar weil sie eine invariante Systemcharakteristik gegenüber dT und dU aufzeigt. Eine Betrachtung der Stabilität stationärer Zustände, wie

sie für lineare und linearisierbare Systeme üblich ist, zeigt in diesem Fall die Abhängigkeit des dynamischen Verhaltens von den dissipativen Eigenschaften der Netzwerkkomponenten aber nicht von deren Connectivity (generalisierte Vernetzung).

2.4.4 Netzwerke in der Thermodynamik

In komplexen Systemen sind physikalische Prozesse den Gesetzmäßigkeiten der Thermodynamik unterworfen. Die von uns betrachteten elektrischen Netzwerke sind als spezielle irreversible thermodynamische Systeme zu sehen. Die dazu passende konventionelle Thermodynamik irreversible Prozesse ist eine phänomenologische Theorie des Gleichgewichtes. Betrachtet werden Anfangs- und Endzustände sowie in der statischen Theorie stationäre Nicht-Gleichgewichtszustände, aber nicht die Dynamik auf der Trajektorie. Es ist wünschenswert, den mathematischen Formalismus der Thermodynamik derart zu erweitern, daß nicht-lineare und nicht-statische Phänomene faßbar werden.

In welcher Beziehung steht nun ein elektrisches Netzwerk mit einem normalen physikalischen, der Thermodynamik unterliegenden System? Zunächst ist neben allen anderen Eigenschaften ein elektrisches Netzwerk sicherlich ein nicht im Gleichgewicht befindliches thermodynamisches System. Normalerweise würde man die Netzwerktheorie nicht als eine Anwendung auf irreversible thermodynamische Prozesse berücksichtigen. Dies hängt sicherlich mit den in der Elektrotechnik hochspezialisierten Techniken zusammen, die mit den klassischen Methoden der Thermodynamik wenig zu tun haben. Tatsächlich ist dieser Zugang sehr generell und kann modifiziert auch auf andere thermodynamische Systeme angewendet werden.

Eine bemerkenswerte Eigenschaft elektrischer Netzwerke besteht darin, daß dynamische Verhalten nicht-elektrischer Systeme zu imitieren. Für praktisch alle physikalischen Gleichungen zwischen der Navier–Stokes und der Schrödinger-Gleichung gibt es repräsentative Netzwerke. Der Zusammenhang wird durch zwei mathematische Strukturen hergestellt, die den meisten physikalischen Modellen zugrunde liegen. Es handelt sich hier um die topologischen Eigenschaften der Verknüpfungen im Phasenraum und den dynamischen Eigenschaften der definierten Beziehungen zwischen einzelnen Zustandsvariablen. Der physikalische Prozeß ist im Phasenraum beschreibbar und seine speziellen Systemcharakteristika kommen in der Wahl der Zustandsvariablen zum Ausdruck.

Unternehmen wir den Versuch, die Verteilung der Ströme j und des Potentials ϕ in einer leitenden Ebene zu beschreiben, haben wir grundsätzlich zwei Möglichkeiten. Einerseits ist die Angabe von kontinuierlichen Funktionen mit Werten in j und ϕ für jeden Punkt der Ebene möglich. Andererseits können wir eine netzartige Beschreibung durch ein auf der Ebene liegendes imaginäres Gitter wählen. Durch die einzelnen Äste lassen sich die Verteilungen der Ströme

und zwischen diesen die Verteilung der Potentiale messen.

Diese beiden Beschreibungsmöglichkeiten gehen auf zwei unterschiedliche Topologien zurück. Im ersten Fall wird in der Kontinuums-Theorie eine Punktmenge und das auf dieser definierte System der Umgebungen betrachtet, was auf partielle Differential-Feld-Gleichungen führt.

Der zweiten netzartigen Beschreibung liegt die kombinatorische oder die algebraische Topologie zugrunde, die eine netzartige Formulierung des Phasenraumes mit gewöhnlichen Differentialgleichungen zuläßt.

Der Übergang zwischen der kombinatorischen Topologie und “der eines Systems von Umgebungen” auf einer kontinuierlichen Punktmenge kann nun einfach durch das Verfeinern der Maschenabstände des auf der Ebene liegenden imaginären Gitters erreicht werden. Auf diese Weise kann jede kontinuierliche Verteilung mit einer gewünschten Genauigkeit angenähert werden.

Tatsächlich läßt sich die algebraische Topologie des Netzes mit einer sogenannten Inzidenzmatrix “der Connectivity”, formulieren. Jeder in der Netztopologie auftretende Knoten, jede Masche und jeder Ast wird bezeichnet und mit einer Orientierung versehen. Ferner werden Vektoren für die in den Ästen fließenden Ströme, und Spannungen für die zwischen den Ästen bestehenden Potentiale konstruiert. Auch hier sind die zwei Gesetze, mit denen sich die Ladungs- und Potentialerhaltung formulieren lassen, die oben erwähnten Kirchhoffschen Maschen- und Knotenregeln. Die konstruierten Inzidenzmatrizen für Knoten und Maschen sowie die Ströme und Spannungen entsprechen den oben eingeführten Inzidenzmatrizen, mit den gewählten Vektorbasen für die im Netzwerk zu beschreibenden Strom- und Spannungsverteilungen.

Ein Netzwerk ermöglicht so gesehen, die topologischen und dynamischen Rahmenbedingungen eines Systems zu formulieren. Tatsächlich läßt sich (– wie oben gezeigt –) aus dem Netzwerk-Analogon die Differentialgleichung ableiten.

Offenkundig sind die topologischen Eigenschaften eines dynamischen Systems durch eine den elektrischen Netzwerken zumindest formal ähnlichen mathematischen Struktur zu behandeln. Die mögliche Bauweise eines realen oder lediglich als mathematische Struktur gegebenen formalen Netzwerkes wird wesentlich durch die Gesetze zur Ladungs- und Flußerhaltung bestimmt.

Für die Darstellung der dynamischen Variablen wirken die Beziehungen für energiespeichernde und dissipative Prozesse als formgebend. Explizit sind hier die kapazitiven sowie induktiven Elemente und einfache Widerstände zu nennen, für die alle die oben erwähnten Regeln der komplexen Strom- und Spannungsrechnung gelten.

Mit der Netzwerkdarstellung sind wir demnach in der Lage, die topologischen von den dynamischen Aspekten eines beliebigen thermodynamischen Systems zu trennen. Dabei berücksichtigen wir, daß eine davon zu unterscheidende Trennung von reversiblen und irreversiblen Prozessen lediglich für elektrische Netzwerke

konkrete Formen annimmt. In allgemeinen thermodynamischen Prozessen wird diese Aufteilung lediglich zu konzipierten Komponenten führen, die dazu dienen, die formale Struktur aufzuklären und eine äquivalente Netzwerkdarstellung des dynamischen Systems zu finden.

Kapitel 3

Theorie zur Signalanalyse

3.1 Generalisierte “frames”

Die Theorie der Quantenmechanik ist auf einem Hilbert-Raum \mathcal{H} aufgebaut. Die Systeme der Quantenmechanik werden mit Differentialgleichungen beschrieben. Mit den Eigenfunktionen der Differentialgleichungen wird in \mathcal{H} ein Unterraum aufgespannt, in dem eine Darstellung des Systemsverhaltens möglich ist. Die Quantenmechanik ist lediglich ein Spezialfall zur Konstruktion von Unterräumen in \mathcal{H} . In \mathcal{H} können auch andere Funktionen benutzt werden um Unterräume zu erzeugen, in dem das Verhalten eines Systems charakterisiert bzw. approximiert werden kann. Diese Unterräume müssen nicht notwendigerweise durch Eigenfunktionen aufgespannt werden. Wir nutzen statt dessen “generalisierte frames” (einfach als *frame* bezeichnet). Dies sind Familien von nicht notwendigerweise linear unabhängigen Funktionen in \mathcal{H} .

3.1.1 Analyse und Synthese kontinuierlicher Signale

In Abschnitt 2.2 hatten wir die Laplace-Transformationen benutzt um ein Signal zu analysieren. Analysieren hieß ein Spektrum von ihm zu erstellen, das dann analysiert werden konnte. Andererseits erlaubt die Laplace-Transformation aus dem Spektrum wieder das Ausgangssignal zu rekonstruieren oder zu synthetisieren.

In diesem Abschnitt verallgemeinern wir die Methode zur Analyse und zur Synthese von Signalen. Hierbei gehen wir in Anlehnung an die Literatur vor [Kai94]. Die Theorie der “generalized frames” stellt eine Verallgemeinerung der Methodik der Laplace-Transformation dar mit der eine Vielzahl von Analyse- und Synthese-Mechanismen erzeugt werden kann, wie z.B. die bekannte “Continuous Wavelet Transform” (CWT), die wir unten lediglich als Spezialfall anführen.

Zu Beginn ersetzen wir das Konzept der Basis in einem Vektorraum durch das allgemeinere Konzept der “resolution of unity” (ROU), welches sich als flexibleres Werkzeug im Umgang mit Basen ähnlichen Strukturen erweist. Mit der ROU können linearen Operatoren T für die Signal Analyse, S für die Signal

Synthese und P für die orthogonale Projektion eingeführt werden. Für die Eigenschaften eines erzeugten de-kompositions Mechanismus ist die Wahl bzw. die Gestaltung des Maßraumes [Bau92] (M, μ) von Bedeutung. Der Maßraum bestimmt die Struktur eines in einem Hilbertraum \mathcal{H} erzeugten Unterraumes \mathcal{H}_M , dem frame. Eine der wichtigsten Aufgaben besteht nun darin, Kriterien zu entwickeln, nach denen das Maß für den frame \mathcal{H}_M gewählt werden kann. Die Wahl muß den frame derart strukturieren, das in dem erzeugten Unter-Raum einerseits die zeitliche System-Dynamik (also das Signal) und andererseits die strukturelle System-Topologie formulierbar ist.

3.1.2 Resolution of Unity

Wir beginnen mit einem komplexen Vektorraum \mathbf{C}^N in dem ein inneres Produkt und eine Basis \mathbf{b}_n mit ihrer reziproken Basis \mathbf{b}^n gegeben ist. Die Beziehung zwischen den reziproken Basen ist durch die Identität

$$\sum \mathbf{b}^n \mathbf{b}_n^* = I \quad (3-1.1)$$

gegeben. Die reziproke Basis ermöglicht es die Koeffizienten eines Vektors bezüglich einer nicht notwendigerweise orthogonalen Basis zu berechnen, in dem das innere Produkt gebildet wird (– gerade wie im orthogonalen Fall –) dafür aber lediglich die reziproke Basis benutzt wird.

Man verallgemeinert nun die Eigenschaften der Vektor-Basis zu einer Vektor-Familie von Funktionen $\{\mathbf{b}_n\}$ (im Folgenden einfach als Familie bezeichnet).

1. Die endliche Menge von Vektoren $\{\mathbf{b}_n\}$ wird auf eine unendliche Menge in $L^2(\mathbf{R})$ erweitert.
2. Die Familie $\{\mathbf{b}_n\}$ ist durch die diskrete Variable n parametrisiert. n wird durch einen Satz kontinuierlicher Variablen ersetzt.
3. Die Basis \mathbf{b}_n ist linear unabhängig. Diese wird durch eine Familie $\{\psi_{s,t}\}$ von linear abhängigen Vektoren ersetzt. Wie mit (3-1.1) ist es mit der ROU möglich die reziproken Familien $\{\psi_{s,t}\}$ und $\{\psi^{s,t}\}$ zu berechnen als würde es sich um eine Basis eines Vektorraumes handeln.

Eine Familie mit diesen Eigenschaften wird zum Beispiel in $L^2(\mathbf{R})$ gegeben durch

$$\psi_{s,t}(u) \equiv \psi_s(u-t) = |s|^{-p} \psi\left(\frac{u-t}{s}\right) \quad (3-1.2)$$

wobei s und t die kontinuierlichen parametrisierenden Variablen sind. Mit dieser Verallgemeinerung wird in (3-1.1) die Summe zu einem Integral über einem Maßraum (M, μ) , und die reziproke Basen werden durch reziproke Familien von Funktionen ersetzt.

$$\int_M d\mu \psi_{s,t} (\psi^{s,t})^* = I \quad (3-1.3)$$

Die lineare Abhängigkeit besteht nun darin das jeder Vektor durch eine kontinuierliche lineare Superposition formuliert werden kann. Normalerweise wird lineare Abhängigkeit durch Linearkombination mit diskreten Vektoren definiert. Um nun die Familien, die mit kontinuierlichen Variablen parametrisiert sind, wie Basen ähnliche Gebilde zu handhaben wird das Konzept der linearen Abhängigkeit verallgemeinert. Um eine linearkombination zu finden muß in einem Maßraum integriert werden. Die lineare Abhängigkeit der $\{\psi_{s,t}\}$ besteht nun darin, daß die Koeffizienten einer transformierten Funktion f

$$\tilde{f}(s, t) = \langle \psi_{s,t}, f \rangle \quad (3-1.4)$$

wie die $\{\psi_{s,t}\}$ linear abhängig sind. Die höhere Flexibilität der ROU kommt nun darin zum Ausdruck, daß jede Basis auf eine ROU zurückgeführt werden kann, aber nur unter bestimmten Voraussetzungen eine ROU auf eine Basis führt. Mit einer ROU können in \mathcal{H} deshalb wesentlich allgemeinere Darstellung der Unterräume gebildet werden als es mit Basen möglich ist.

Das allgemeine Verfahren zur Analyse und Synthese eines Signals sieht nun wie folgt aus. Um eine ROU zu konstruieren beginnen wir mit einer Familie und berechnen die reziproke.

Für die Analyse ($f \mapsto \tilde{f}$) eines Signals aus dem Hilbertraum der möglichen Signale \mathcal{H} benötigen wir eine Indexmenge M und eine Familie $\{h_m\} \in \mathcal{H}$ indiziert durch $m \in M$. Zum Beispiel ist für die CWT $\mathcal{H} = L^2(\mathbf{R})$ und $M = \mathbf{R}_+^2$.

Für die Synthese ($\tilde{f} \mapsto f$) wird die reziproke Familie $\{h^m\}$ zu $\{h_m\}$ konstruiert. Um das Signal als eine Superposition der Vektoren $\{h^m\}$ zu rekonstruieren, muß über die Menge M integriert werden. Dafür muß auf der Menge M ein Maß μ gewählt werden, so daß jeder Teilmenge $A \in M$ ein Maß $\mu(A)$, $0 \leq \mu(A) \leq \infty$ zugewiesen wird. Damit kann über meßbare Funktionen [Bau92] $g : M \rightarrow \mathbf{C}$ mit

$$\int_M d\mu(m)g(m) \quad (3-1.5)$$

integriert werden. Da auf M das Maß $\mu(A)$ existiert ist der Maßraum (M, μ) definiert, indem das Signal synthetisiert wird. Für einen beliebigen Maßraum mit nicht negativen und meßbaren Funktionen $g : M \rightarrow \mathbf{C}$, kann das Integral

$$\|g\|_{L^2}^2 = \int_M d\mu(m)|g(m)|^2 \quad (3-1.6)$$

existieren oder $\|g\|_{L^2}^2 = +\infty$ gelten. Die Menge der Funktionen g für die das Integral (3-1.6) mit $\|g\|_{L^2}^2 < \infty$ existiert, ist eine Menge von quadrat-integrierbarer Funktionen $L^2(\mu)$ mit dem Maß μ , somit ein Hilbertraum in dem ein inneres Produkt

$$\langle g_1, g_2 \rangle_{L^2} = \int_M d\mu(m) \overline{g_1(m)} g_2(m) \quad (3-1.7)$$

gegeben ist.

Definition 1 *Ein generalisierter frame ist eine Familie von Vektoren $\mathcal{H}_M \equiv \{h_m \in \mathcal{H}\}$ in einem Hilbertraum \mathcal{H} mit dem Maßraum (M, μ) derart, daß für jedes $f \in \mathcal{H}$ die meßbare Funktion $\tilde{f} : M \rightarrow \mathbf{C}$ durch*

$$\tilde{f}(m) \equiv \langle h_m, f \rangle_{\mathcal{H}} \quad (3-1.8)$$

definiert ist. Es gibt zwei Konstanten $0 < A \leq B < \infty$ für die

$$A \|f\|_{\mathcal{H}}^2 \leq \|\tilde{f}\|_{L^2}^2 \leq B \|f\|_{\mathcal{H}}^2 \quad (3-1.9)$$

gilt. Die Vektoren $h_m \in \mathcal{H}$ sind die “frame Vektoren”. (3-1.9) ist die “frame Bedingung”, A und B sind die “frame Schranken”. Mit (3-1.9) gilt $\tilde{f} \in L^2(\mu)$ immer dann wenn $f \in \mathcal{H}$ ist. Die Funktion $\tilde{f}(m)$ ist die Transformierte von f unter dem frame \mathcal{H}_M . Im speziellen Fall $A = B$ ist der frame “dicht” und (3-1.9) wird zu $A \|f\|_{\mathcal{H}}^2 = A \|\tilde{f}\|_{L^2}^2$.

Wie die Formel von Plancherel in der Fourieranalyse (bei der $A = B = 1$ ist) besagt (3-1.9), daß keine Information bei der Transformation (3-1.8) verloren geht und somit f aus \tilde{f} rekonstruiert werden kann.

3.1.3 Der Analyse–Operator T

Weil $\tilde{f} \in L^2(\mu)$ für jedes $f \in \mathcal{H}$ ist, definiert die Abbildung ($f \mapsto \tilde{f}$) einen linearen Operator $T : \mathcal{H} \rightarrow L^2(\mu)$ bzw. $T(f) \equiv \tilde{f}$. T ist der frame Operator [Dau92]. In der Schwarz Ungleichung zeigt sich die Bedeutung der transformierten \tilde{f} als ein Maß für die Menge der in f enthaltenen Bestandteile von \mathcal{H}_M . T analysiert das Signal f nach frame Bestandteilen und wird demzufolge als Analyse–Operator bezeichnet.

Um ein analysiertes Signal zu Synthetisieren muß die inverse Abbildung ($\tilde{f} \rightarrow f$) gefunden werden. Die frame Bedingung (3-1.9) stellt sicher das diese als beschränkter Operator $T^* : L^2(\mu) \rightarrow \mathcal{H}$ mit

$$\|\tilde{f}\|_{L^2}^2 = \|Tf\|_{L^2}^2 = \langle Tf, Tf \rangle_{L^2} = \langle f, T^*Tf \rangle \quad (3-1.10)$$

existiert.

3.1.4 Der Metrischer–Operator G

Um mit einer ROU eine reziproke Familie von Vektoren zu berechnen benötigen wir den metrischen Operator $G \equiv T^*T : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$.

Da die inneren Produkte $\langle f, Gf \rangle = f^*Gf$ und die Normen $\|f\|^2 = f^*f$ im Hilbertraum definiert sind wird die *frame*-Bedingung (3-1.9)

$$Af^*f \leq f^*Gf \leq Bf^*f \quad \text{mit } f^*f = I \text{ zu } \quad AI \leq G \leq BI \quad (3-1.11)$$

Dies ist die wichtige frame Bedingung (3-1.9) in Operator Form, nach der die Eigenwerte λ von G beschränkt sind $A < \lambda < B$. Ferner existiert der beschränkte inverse Operator G^{-1} .

Für jede Funktion $g, f \in \mathcal{H}$ ist

$$\begin{aligned} f^* G g &= \langle f, T^* T g \rangle_{\mathcal{H}} = \langle T f, T g \rangle_L^2 = \int_M d\mu(m) \overline{\tilde{f}(m)} \tilde{g}(m) \\ &= \int_M d\mu(m) \overline{h_m^* f} h_m^* g \end{aligned} \quad (3-1.12)$$

Der Operator G kann als Integral über den Maßraum (M, μ)

$$G = \int_M d\mu(m) h_m h_m^* \quad (3-1.13)$$

geschrieben werden. Die frame Bedingung (3-1.9) geht in die allgemeinere Form der ROU über wenn $A = B = 1$ und damit $G = I$.

Für den Fall das $A \neq B$ ist $G \neq I$, dann muß eine reziproke Familie $\{h^m\}$ konstruiert werden um eine ROU zu erhalten. Wir definieren die reziproke Familie $h^m \equiv G^{-1} h_m$, $m \in M$ und den zu \mathcal{H}_m reziproken frame $\mathcal{H}^M \equiv \{h^m : m \in M\}$. Die Beziehung zwischen den frames \mathcal{H}_M und \mathcal{H}^M ist mit

$$\int_M d\mu(m) h^m h_m^* = g^{-1} \int_M d\mu(m) h_m h_m^* = G^{-1} G = I \quad (3-1.14)$$

auch die gesuchte ROU gegeben.

3.1.5 Der Synthese–Operator S

Nach dem wir im Hilbert-Raum mit Maß μ , *frame* und innerem Produkt den Analyse– und den Metrischen–Operator definiert haben, können wir nun den Synthese–Operator S und den orthogonalen Projektions–Operator P angeben. Beide benötigen wir um aus dem analysierten bzw. de-kompositionierten Signal wieder das ursprüngliche Signal zu synthetisieren.

Der zum Analyse–Operator T adjungierte $T^* : L^2(\mu) \longrightarrow \mathcal{H}$ ist

$$(T^* g)(m) = \int_M d\mu(m) h_m g(m). \quad (3-1.15)$$

Der Synthese–Operator S ist definiert durch $S = G^{-1} T^* : L^2(\mu) \longrightarrow \mathcal{H}$ bzw.

$$S g = \int_M d\mu(m) h^m g(m). \quad (3-1.16)$$

Insbesondere kann das Signal $f \in \mathcal{H}$ aus der Menge der transformierten Signale $\tilde{f} \in \mathcal{F} \equiv \{\tilde{f} : f \in \mathcal{H}\} \subset L^2(\mu)$ rekonstruiert werden, mit

$$f = S \tilde{f} = \int_M d\mu(m) h^m \tilde{f}(m). \quad (3-1.17)$$

3.1.6 Der Projektions–Operator P

Der orthogonale Projektions–Operator $P : L^2(\mu) \longrightarrow L^2(\mu)$ wirkt auf den Abbildungsbereich \mathcal{F} des Operators T und ist

$$(Pg)(m') = \int_M d\mu(m) \quad K(m'|m) \quad g(m) \quad (3-1.18)$$

$$\text{mit} \quad K(m'|m) = \langle h_{m'}, h^m \rangle = \langle h_{m'}, G^{-1}h_m \rangle$$

Der orthogonale Projektions–Operator zerlegt das transformierte Signal in \mathcal{F} in zueinander orthogonale Komponenten. Die Funktion $K(m'|m)$ heißt “reproduzierender Kern” des frames \mathcal{H}_M in der Menge der transformierten \mathcal{F} . Im reproduzierenden Kern ist festgelegt, aus welchen orthogonal projizierten Anteilen $h_{m'}$ das Signal f synthetisiert werden kann.

Eine Frage besteht nun darin, den Projektions–Operator derart festzulegen, daß ein transformiertes Signal \tilde{f} auf eine Prozeß–Basis projiziert wird. Dazu ist der reproduzierende Kern so zu wählen, daß seine orthogonalen Komponenten eine Darstellung der physikalischen Prozesse liefert, die in dem System zusammen wirken und das Signal erzeugen.

3.1.7 Anmerkungen

Die Untersuchungen konzentrieren sich nun darauf, Kriterien zu entwickeln um den Satz der im Formalismus eingebauten frei wählbaren Parameter entsprechend festzulegen. Dies ist die Normierung des frames $\|h_m\|$, die Festlegung des zum Integrieren notwendigen Maßraumes (M, μ) und die Wahl der analysierenden Funktion aus der die Familie $\{h_m\}$ hervorgeht. Für den speziellen Fall $\mathcal{H} = L^2(\mathbf{R})$, $M = \mathbf{R}_+^2$ mit $m = (s, t)$ und $h_m = \psi_{s,t}$ ergibt sich zum Beispiel aus dem allgemeinen Formalismus die CWT.

$$\tilde{f}(s, t) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} du \bar{\psi}_{s,t}(u) f(u) = \langle \psi_{s,t}, f \rangle = \psi_{s,t}^* f$$

$$f(u) = \int_0^{\infty} d\mu \psi^{s,t}(u) \tilde{f}(s, t) \quad \text{wobei} \quad d\mu = \int_0^{\infty} ds \cdot s^{2p-3} \int_{-\infty}^{\infty} dt \quad (3-1.19)$$

Durch eine andere Festlegung können eine Vielzahl von de-kompositions Verfahren erzeugt werden.

Die in (3-1.2) eingeführten Parameter $m = (s, t)$ erzeugen bei Veränderung aus der ursprünglichen Funktion eine neue Variante. Dabei wirkt s auf die Skalierung und t auf die zeitliche Lokalisation. Da es sich um kontinuierliche Parameter handelt wird das Signal mit allen möglichen Skalierungen und zu allen Zeitpunkten analysiert. Das Signal f wird in einem zeitlichen Intervall durch verschiedene Versionen von (3-1.2) betrachtet, wobei das Analyse-Intervall mit Variation von t über f verschoben wird. Damit ist die Analyse des Signals zeitlich lokalisiert.

In Abhängigkeit der genutzten Analysefunktion ergibt sich eine mehr oder weniger direkte Interpretation der transformierten \tilde{f} . Als eine Funktion von t auf einer bestimmten Skala s repräsentieren die Werte von $\tilde{f}(s, t)$ die in $f(t)$ zeitlich lokalisierten Details, deren physikalische Bedeutung zunächst offen bleibt. Das synthetisierte Signal ist nach (3-1.17) eine Superposition aus den Vektoren h^m wobei $\tilde{f}(m)$ eine Koeffizienten-Funktion ist.

Zulassungs-Bedingung für $\{h_m\}$ Die Familien $\{h_m\}$ und $\{h^m\}$ müssen Bedingungen genügen damit sie aus $\tilde{f} \in \mathcal{F}$ das Signal $f \in \mathcal{H} = L^2(\mathbf{R})$ synthetisieren. Nach (3-1.11) müssen die Eigenwerte λ des Operators G die Ungleichung $A \leq \lambda \leq B$ erfüllen und das Integral (3-1.13) für h_m

$$0 < G = \int_M d\mu |h_m|^2 < \infty \quad (3-1.20)$$

muß konvergieren. Dies wird als Zulassungs-Bedingung für die $\{h_m\}$ bezeichnet. Sie macht eine Analyse ($f \rightarrow \tilde{f}$) und Synthese ($\tilde{f} \rightarrow f$) möglich, und erzeugt die Familien $\{h_m\}$ und $\{h^m\}$ und somit eine ROU.

$$\int_m d\mu(m) h_m (h^m)^* = I \quad (3-1.21)$$

Wahrscheinlichkeitsdichte und Differenzierbarkeit Die oben erwähnte Interpretation von \tilde{f} hat eine Bedeutung für Wahrscheinlichkeits-Verteilungen. Wir beginnen mit einer Wahrscheinlichkeitsdichte $\phi(u)$ die normiert sei, den Mittelwert Null und eine Varianz von Eins habe:

$$\int_{-\infty}^{\infty} du \phi(u) = 1 \quad \int_{-\infty}^{\infty} du u \phi(u) = 0 \quad \int_{-\infty}^{\infty} du u^2 \phi(u) = 1 \quad (3-1.22)$$

Außerdem sei $\phi(u)$ mindestens n mal differenzierbar mit $n \geq 1$ und für die $(n-1)$ -te Ableitung gelte

$$\lim_{u \rightarrow \pm\infty} \phi^{(n-1)}(u) = 0 \quad \text{und sei} \quad \psi^n(u) \equiv (-1)^n \phi^{(n)}(u). \quad (3-1.23)$$

Dann ist der Wert des Integrals von $\psi^n(u)$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} du \psi^n(u) = (-1)^n [\phi^{n-1}(-\infty) - \phi^{n-1}(+\infty)] = 0 \quad (3-1.24)$$

und geeignet eine frame-Transformation zu definieren. Die Zulassungs-Bedingung (3-1.20) ist erfüllt und ψ ist eine Wahrscheinlichkeitsdichte mit den Eigenschaften (3-1.22) und ϕ erzeugt eine Familie $\{\psi\}$ wie $\{h_m\}$. Mit

$$\bar{f} \equiv \phi^* f \quad \text{und} \quad \tilde{f}_{(n)} \equiv \psi^{(n)*} f \quad (3-1.25)$$

ist $\bar{f}(s, t)$ der lokale Mittelwert von f zum Zeitpunkt t auf der Skala s .

Wegen (3-1.23) ist

$$\psi_{s,t}^{(n)}(u) = (-1)^{(n)} s^{(n)} \partial_u^{(n)} \phi_{s,t}(u) = s^{(n)} \partial_t^{(n)} \phi_{s,t}(u) \quad (3-1.26)$$

wobei $\partial_u^{(n)}$ und $\partial_t^{(n)}$ die partiellen Ableitungen nach u bzw. t sind. Deshalb ist die frame-Transformierte von f nach $\{\psi_m\}$ mit $m = (s, t)$

$$\begin{aligned} \tilde{f}_n(s, t) &\equiv \int_{-\infty}^{+\infty} du \phi_{s,t}^n(u) f(u) = s^n \partial_t^{(n)} \int_{-\infty}^{+\infty} du \psi_{s,t}(u) f(u) \\ &= s^n \partial_t^n \bar{f}(s, t) \end{aligned} \quad (3-1.27)$$

mit dem Faktor s^n proportional zur n -ten Ableitung des lokalen Mittelwertes $\partial_t^n \bar{f}(s, t)$!

Approximationen Um ein Signal in relevante und nicht-relevante Information zu zerlegen, also um die Bestandteile abzutrennen, welche z.B. unter den weitläufigen Begriff "Rauschen" zusammenzufassen sind, werden später zwei approximative Eigenschaften benutzt. Wir interpretieren die zwei Funktionen \tilde{f} und $g \in L^2(y)$. Zuerst werden für ein festes g alle möglichen Signale $f \in \mathcal{H}$ unter Anwendung des Analyse-Operator T so verglichen, daß $Tf \sim g$. Dann wird für ein festes $f \in \mathcal{H}$ jedes $g \in L^2(\mu)$ unter Anwendung des Synthese-Operator S so verglichen, daß $Sg = f$ gilt.

Mit einer beliebigen Funktion $g(m) \in L^2(\mu)$, die nicht notwendigerweise in dem Abbildungsbereich \mathcal{F} des Analyse-Operator T enthalten sein muß, minimiert das eindeutige Signal $f \in \mathcal{H}$ gegeben durch $f = f_g = Sg = \int_M d\mu(m) h^m g(m)$ den Fehler

$$\|g - \tilde{f}\|_{L^2}^2 \equiv \int_M d\mu |g(m) - \tilde{f}(m)|^2 \quad (3-1.28)$$

Der Gebrauch von linear-abhängigen Vektoren $\{h_m\}$ führt in der Synthese auf ein nicht eindeutiges Signal f . Ein Signal wird durch $SG^{-1}T^* : L^2(\mu) \rightarrow \mathcal{H}$ synthetisiert. Soweit es zu \mathcal{F} ein orthogonales Komplement $g_\perp \in \mathcal{F}^\perp$ in $L^2(\mu)$ gibt, leisten diese mit $T^*g_\perp = 0$ keinen Beitrag in der Synthese. Wenn die Vektoren des frame \mathcal{H}_M linear-unabhängig sind ist $\mathcal{F}^\perp = 0$ und die Darstellung von f ist eindeutig.

Wenn die Vektoren des frame \mathcal{H}_M linear-abhängig sind ist $\mathcal{F}^\perp \neq 0$ und es gibt für jedes Element $g_\perp \in \mathcal{F}^\perp$ eine Darstellung und somit unendlich viele Möglichkeiten das Signal aus einem linear-abhängigen frame zu synthetisieren.

Die Koeffizientenfunktionen $g = \tilde{f}$ also mit $g_\perp = 0$ zeichnen sich durch eine besondere Eigenschaft aus:

Theorem 1 Von allen möglichen Koeffizienten Funktionen $g \in L^2(\mu)$ für ein Signal $f \in \mathcal{H}$ zeichnet sich die Funktion $g = \tilde{f}$ dadurch aus, daß g die Energie $\|g\|_{L^2}^2$ minimiert.

$$\|g\|_{L^2}^2 = \|\tilde{f} + g_\perp\|_{L^2}^2 = \|\tilde{f}\|_{L^2}^2 + \|g_\perp\|_{L^2}^2 \geq \|\tilde{f}\|_{L^2}^2 \quad (3-1.29)$$

Außerdem genügt $g = \tilde{f}$ der Approximation (3-1.28) und ist durch die Norm des Signals $|\tilde{f}(m)| \leq \|h_m\| + \|f\| = \|f\|$ beschränkt was für beliebige Elemente aus $L^2(\mu)$ nicht der Fall sein muß. (Die Normierung könnte für eine Quantisierung von f relevant sein.)

3.2 Diskrete frames

3.2.1 Diskretisierung

Das Signal f des vorhergehenden Abschnittes und deren Transformierte \tilde{f} sind kontinuierliche Funktionen. Wir werden nun die kontinuierliche Koeffizientenfunktion \tilde{f} durch eine diskreten Satz von frame Komponenten Ψ formulieren, um frames auf zeitdiskrete Meßwerte anpassen zu können. Die Synthese erzeugt (approximiert) dann das kontinuierlichen Signal f . Wir betrachten einen Maßraum mit einer abzählbaren oder diskreten Menge M . Im Spezialfall der CWT ist dieser Maßraum gegeben durch

$$S_{\sigma,\tau} = \{(\pm\sigma^m, n\sigma^m\tau) : m, n \in \mathbf{Z}\} \quad (3-2.30)$$

einen Satz von diskreten Skalen und Zeitwerten. Dabei ist σ ein fester Skalenfaktor und τ ist ein festes Zeitintervall. Da M eine diskrete Menge ist, wird jede Teilmenge $A \subset M$ meßbar sein. Jede Funktion auf $g : M \rightarrow \mathbf{C}$ ist dann meßbar und ein Integral (– siehe (3-1.8) –) über dem diskreten Maßraum (M, μ) wird durch eine Summe ersetzt:

$$\int_M d\mu(m) g(m) = \sum_{m \in M} \mu_m g(m) \quad (3-2.31)$$

Die frame Bedingung (3-1.9) wird damit zu

$$A \|f\|_{\mathcal{H}}^2 \leq \sum_{m \in M} \mu_m |\tilde{f}(m)|^2 \leq B \|f\|_{\mathcal{H}}^2 \quad (3-2.32)$$

wobei $\mu_m \equiv \mu(\{m\})$ das Maß auf einer Ein-Punkt Menge $m \in M$ ist. Es legt fest, welchen Beitrag $\tilde{f}(m)$ zur Summe liefert. Werden alle $m \in M$ mit $\mu_m = 1$ gleich gewichtet ist μ das Zähl-Maß. Im diskreten Fall ist das Zählmaß nicht immer die natürliche Wahl.

Wie kann ein kontinuierlicher frame \mathcal{H}_M nun in einen diskreten Sub-frame überführt werden? Die transformierte \tilde{f} wird durch eine diskrete Gruppe von Teilmengen $\Gamma \subset M$ dargestellt. Jedes Element $m \in \Gamma$ repräsentiert eine unterschiedliche Teilmenge $A_m \in M$. Es ist in diesem Fall nur natürlich jedes $m \in \Gamma$ entsprechend der repräsentierten A_m zu gewichten, also $\mu_m = \mu(A_m)$. Dann sind die einzelnen Beiträge von $g(m)$ zur Summe in (3-2.30) mit $\mu_m \neq 1$ nicht gleich und haben in der Signalsynthese demnach ein unterschiedliches Gewicht. Ein derart diskretisierte frame kann dennoch mit einem speziellen reproduzierenden Kern eine Basis zu bilden.

Theorem 2 *Ein diskreter frame ist eine Basis wenn der reproduzierende Kern*

$$K(k|m) \equiv h_k^* h_m = \mu_m^{-1} \delta_k^m, \quad (3-2.33)$$

dann ist $\{\mu_m h^m\}$ eine reziproke Basis zu $\{h_m\}$.

Wir haben oben ein Signal f als kontinuierliche Superposition von Vektoren einer Familie $\{h^m\}$ mit der transformierten \tilde{f} als Koeffizienten-Funktion dargestellt. Nun wird die Darstellung mit dem eben erwähnten diskreten Sub-frame gezeigt. Dabei wird eine diskrete Koeffizienten-Funktion benutzt, die als ‘‘gesampelte’’ Version von \tilde{f} zu betrachten ist. Eine wichtige Eigenschaft der diskreten frames besteht darin, daß die Abtastrate automatisch auf die genutzte Skala angepaßt wird. Zunächst wird das Frequenzspektrum des Signals in verschiedene Bereiche skaliert, dann wird jeder Bereich mit einer Abtastrate analysiert, die proportional zu der jeweiligen Skala eines Bereiches ist. Unter vorteilhaften Bedingungen kann das Signal aus den diskreten Komponenten von \tilde{f} als diskrete Superposition einer reziproken Vektorfamilie dargestellt werden.

3.2.2 Skalierung und Abtastrate

Wir betrachten den oben (3-2.30) erwähnten Skalenfaktor $\sigma > 1$ genauer und nutzen in der diskreten Analyse nur Skalen mit $s_m = \sigma^m, m \in \mathbf{Z}$. Wird ein Signal mit dem Faktor σ skaliert, sind z.B. für die CWT

$$f_\sigma(t) \equiv \sigma^p f\left(\frac{t}{\sigma}\right) \quad \text{und} \quad \tilde{f}(\sigma s, \sigma t) = \tilde{f}(s, t) \quad (3-2.34)$$

die Beziehungen von f und \tilde{f} zwischen den Skalen. Hierdurch wird die frame-Transformation invariant gegenüber der verwendeten Skala.

Um von einer Skala $s_m = \sigma^m$ zur nächsten $s_{m+1} = \sigma s_m$ zu gelangen, muß das Abtast-Intervall Δt um den Faktor σ vergrößert werden. Dabei ist $\Delta t = \sigma^m \tau$ und $\tau > 0$ als festes Abtast-Intervall auf der Skala $s = 1$ gesetzt. Das Signal wird nur zu den Zeitpunkten $t_{m,n} = n \sigma^m \tau$ mit $n \in \mathbf{Z}$ auf der Skala σ abgetastet, womit die Abtastrate automatisch auf die Skala angepaßt wird. Das Signal ist nun zu diskreten Zeiten auf verschiedenen diskreten Skalen dargestellt. Diese Darstellung heißt Zeit-Skalen-Ebene und ist mit einem hyperbolischen Gitter (3-2.30) parametrisiert, welches um so dichter wird, je näher man mit $s \rightarrow 0$ der Zeitachse kommt.

3.2.3 Analyse und Synthese

Für die kontinuierlichen frames haben wir die Familie $\{\psi_{s,t}\}$ aus (3-1.2) durch die Änderung von t und s , also die Operationen Translation (Verschiebung auf der Zeitachse) und Dilatation (Änderung der Skala) erzeugt. Die Zeit-Skalen-Ebene war mit einem kontinuierlichen Maß ausgestattet. In diesem Abschnitt wird am

Beispiel der CWT eine Klasse von diskreten Sub-frames \mathcal{W}_s für den einfachsten Fall einer beschränkte Bandbreite von $\psi_{s,t}$ konstruiert. Dies ermöglicht eine Signalanalyse in der Frequenzdomäne mit sich nicht notwendigerweise überlappenden Analyse Bereichen. Zunächst wird eine Klasse von semi-diskreten frames erzeugt. Diese sind mit einem diskreten Zeit- aber einem kontinuierlichen Skalenparameter ausgestattet. Die Diskretisierung der Skala ist dann nur noch ein kleiner Schritt.

Diskretisierung der Zeit Wegen der Parseval Identität kann die Analyse und die Synthese in der Zeit- wie in der Frequenzdomäne ausgeführt werden. Da das Abtast-Intervall Δt proportional zu der benutzten Frequenzskala sein soll, wird die Darstellung von (3-1.2) in der Frequenzdomäne benötigt. Wir beginnen mit einer Funktion $\hat{\psi}(\omega) = 0$ außerhalb eines Frequenzbandes $\alpha \leq \omega \leq \beta$ mit $-\infty < \alpha < \beta < \infty$. Nach (3-1.4) ist $\tilde{f}(s, t) \equiv \langle \psi_{s,t}^*, f \rangle$. Parseval's Identität führt in die Frequenzdomäne und ergibt

$$\tilde{f}(s, t) \equiv \langle \psi_{s,t}^*, f \rangle = \langle \hat{\psi}_{s,t}^*, \hat{f} \rangle \quad (3-2.35)$$

wobei \hat{f} und $\hat{\psi}_{s,t}(w) = |s|^{1-p} e^{-2\pi i \omega t} \hat{\psi}(sw)$ die Fourier-transformierten von f und ψ sind. Die Darstellung von \tilde{f} in der Frequenzdomäne ist mit (3-2.35)

$$\tilde{f}(s, t) = \psi_{s,t}^* f = |s|^{1-p} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{2\pi i \omega t} \overline{\hat{\psi}(sw)} \hat{f}(w) \quad (3-2.36)$$

Der Faktor $|s|^{1-p}$ geht auf die Skalierung in (3-1.2) zurück. In (3-2.36) wird die inverse Fouriertransformation ausgeführt. Diese Funktion ist aber auf einen Frequenzbereich $I_s = \{\omega : a \leq s\omega \leq \beta\}$ beschränkt und muß nicht als Fourier-Integral sondern kann als diskrete Fourier-Reihe geschrieben werden. Die Breite des Intervalls $\frac{(\beta-\alpha)}{|s|}$ für ω variiert mit der Skala s . Setzt man $\tau = (\beta - \alpha)^{-1}$ ist die Größe des zeitlichen Abtast-Intervall auf der Skala s gegeben durch $|s|\tau$. Damit kann die inverse Fouriertransformation ausgeführt und das Integral durch eine Summe ersetzt werden:

$$\begin{aligned} |s|^{1-p} \overline{\hat{\psi}(sw)} \hat{f}(w) &= |s|\tau \sum_{n \in \mathbf{Z}} e^{-2\pi i \omega n s\tau} c_n(s) \quad \text{mit} \\ c_n(s) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{2\pi i \omega n s\tau} |s|^{1-p} \overline{\hat{\psi}(sw)} \hat{f}(w) \\ &= \tilde{f}(s, n s\tau) \end{aligned}$$

Die Funktion ist nur gültig wenn $\omega \in I_s$ ist. Um sie global gültig zu machen werden beide Seiten mit $|s|^{-(1-p)} \hat{\psi}(sw)$ multipliziert:

$$\begin{aligned} |\hat{\psi}(sw)|^2 \hat{f}(w) &= \tau \sum_{n \in \mathbf{Z}} e^{-2\pi i \omega n s\tau} |s|^{(1-p)} \hat{\psi}(sw) \tilde{f}(s, n s\tau) \\ &= \tau \sum_{n \in \mathbf{Z}} \hat{\psi}_{s, n s\tau}(\omega) \tilde{f}(s, n s\tau) \end{aligned}$$

Um jetzt $\hat{f}(\omega)$ zu rekonstruieren werden beide Seiten über das kontinuierliche Skalenmaß integriert.

$$\int_0^\infty \frac{ds}{s} |\hat{\psi}(s\omega)|^2 \hat{f}(\omega) = \tau \sum_{n \in \mathbf{Z}} \int_0^\infty \frac{ds}{s} \hat{\psi}_{s,ns\tau}(\omega) \tilde{f}(s, ns\tau) \quad \text{wobei} \quad (3-2.37)$$

$$\int_0^\infty \frac{ds}{s} |\hat{\psi}(s\omega)|^2 \equiv Y(\omega) \quad \text{definiert wird.} \quad (3-2.38)$$

Dies zeigt, daß \tilde{f} und somit auch f vollständig rekonstruiert werden kann wenn die Division durch $Y(\omega)$ möglich ist. Dies ist für $0 < Y(\omega) < \infty$ der Fall und $\omega \neq 0$ und (3-2.38):

$$\begin{aligned} \tilde{f}(\omega) &= \tau Y(\omega)^{-1} \tau \sum_{n \in \mathbf{Z}} \int_0^\infty \frac{ds}{s} \hat{\psi}_{s,ns\tau}(\omega) \tilde{f}(s, ns\tau) \\ &\equiv \tau \sum_{n \in \mathbf{Z}} \int_0^\infty \frac{ds}{s} \hat{\psi}^{s,ns\tau}(\omega) \tilde{f}(s, ns\tau) \end{aligned}$$

wobei die $\psi^{s,ns\tau} \in \mathcal{W}^S$ den reziproken frame zu \mathcal{W}_S bilden. Die inverse Fourier-transformierte liefert das Signal

$$f = \tau \sum_{n \in \mathbf{Z}} \int_0^\infty \frac{ds}{s} \psi^{s,ns\tau} \tilde{f}(s, ns\tau) \quad (3-2.39)$$

Dies ergibt einen semi-diskreten Sub-frame von \mathcal{W}_S mit Vektoren $\psi_{s,ns\tau}$, den wir als \mathcal{W}_τ bezeichnen. Der reziproke frame \mathcal{W}^τ ist ebenso ein Sub-frame von \mathcal{W}^S . Beide führen auf die semi-diskrete ROU

$$\tau \sum_{n \in \mathbf{Z}} \int_0^\infty \frac{ds}{s} \psi^{s,ns\tau} (\psi_{s,ns\tau})^* = I. \quad (3-2.40)$$

Diskretisierung der Skala Die Skala $s_m = \sigma^m, m \in \mathbf{Z}$ wird mit einem festen $\sigma > 1$ diskretisiert. Der Schritt zwischen zwei Skalen ist $\Delta s_m \equiv s_{m+1} - s_m = (\sigma - 1)s_m$. Damit kann das Maß $\frac{ds}{s}$ in (3-2.37) durch die diskrete Version $\frac{\Delta s}{s_m} = (\sigma - 1)$ und das Integral durch eine approximierende Summe ersetzt werden. $Y(\omega)$ wird zu $Y_\sigma(\omega)$

$$Y(\omega)_\sigma \equiv (\sigma - 1) \sum_{m \in \mathbf{Z}} |\hat{\psi}(\sigma^m \omega)|^2 \quad (3-2.41)$$

Nun wird in (3-2.37) der kontinuierliche Parameter s durch die diskrete Skala σ^m ersetzt.

$$\begin{aligned} \text{wegen } \psi_s(t) &= |s|^{-p} \psi\left(\frac{t}{s}\right) \\ \psi_{s,ns\tau}(t) \implies \psi_{\sigma^m, n\sigma^m \tau}(t) &= \sigma^{-mp} \psi\left(\frac{t - n\sigma^m \tau}{\sigma^m}\right) \\ &\equiv \Psi_{m,n}(t) \end{aligned} \quad (3-2.42)$$

In der Koeffizienten-Funktion in (3-2.37) wird ebenso $s \rightarrow \sigma^m$ ersetzt. $\tilde{f}(s, n\sigma\tau)$ wird zu $\tilde{f}(\sigma^m, n\sigma^m\tau) = \Psi_{m,n}(t)^* f$. Analog zu (3-2.37) ergibt sich nun eine in der Zeit (Parameter n) und der Skala (Parameter m) vollständig diskretisierte Version:

$$Y_\sigma(\omega)\hat{f}(\omega) = (\sigma - 1)\tau \sum_{m,n \in \mathbf{Z}} \hat{\Psi}_{m,n}(\omega)\Psi_{m,n}^* f \quad (3-2.43)$$

Der Faktor $(\sigma - 1)\tau$ ist das Maß, welches jedem Punkt der Zeit-Skalen-Ebene $S_{\sigma,\tau} = \{(\pm\sigma^m, n\sigma^m\tau) : m, n \in \mathbf{Z}\}$ zugewiesen wird. Das kontinuierliche Maß ist somit diskretisiert:

$$\frac{dsdt}{s^2} = \frac{ds}{s} \frac{dt}{s} \rightarrow \frac{\Delta s_m}{s_m} \frac{\Delta t_{m,n}}{s_m} = (\sigma - 1)\tau \quad (3-2.44)$$

Nun ist (3-2.43) nur noch nach $\hat{f}(\omega)$ aufzulösen indem der reziproke frame $\hat{\Psi}^{m,n} = Y_\sigma^{-1}(\omega)\hat{\Psi}_{m,n}$ benutzt wird

$$\hat{f}(\omega) = Y_\sigma^{-1}(\omega) (\sigma - 1)\tau \sum_{m,n \in \mathbf{Z}} \hat{\Psi}_{m,n}(\omega)\Psi_{m,n}^* f = \sum_{m,n \in \mathbf{Z}} \hat{\Psi}^{m,n}(\omega)\Psi_{m,n}^* f \quad (3-2.45)$$

und die invers Fouriertransformierte schließlich das Signal

$$f = (\sigma - 1)\tau \sum_{m,n \in \mathbf{Z}} \Psi^{m,n} \tilde{f}(\sigma^m, n\sigma^m\tau) \quad (3-2.46)$$

in dem nun vollständig diskreten frame $\mathcal{W}_{\sigma,\tau} = \{\psi_{\sigma^m, n\sigma^m\tau} \equiv \Psi_{m,n} : m, n \in \mathbf{Z}\}$ synthetisiert.

3.3 Multiresolution Analysis (MRA)

Ein Signal kann in einem diskreten frame $\mathcal{W}_{\sigma,\tau}$ analysiert und synthetisiert werden. Dafür sind die Integrale von \tilde{f} für die jeweiligen diskreten Zeit- und Skalensparameter zu berechnen.

Die Multiresolution Analyse ist eine rekursive Methode zur diskreten Analyse und Synthese von Signalen mit einem fest vorgegebenen Skalensfaktor $\sigma = 2$. Das Signal f^0 wird für ein $\Delta t = \tau$ in einen gemittelten Teil \bar{f}^1 auf einer groberen Skala $\Delta t = 2\tau$ und einen Detailanteil \tilde{f}^1 mit $\Delta t = \tau$ zerlegt (3-1.25). Dieser Vorgang wird mit \bar{f}^1 wiederholt und erzeugt eine Reihe von $\bar{f}^1, \bar{f}^2, \bar{f}^3, \dots, \bar{f}^N$ mit den Details $\tilde{f}^1, \tilde{f}^2, \tilde{f}^3, \dots, \tilde{f}^N$ die auf jeder Skala $\Delta t = 2^m\tau$ separiert werden. Die so gewonnenen \tilde{f}^{m-1} können als eine Superposition der $\Psi_{m,n}$ des diskreten frames $\mathcal{W}_{\sigma,\tau}$ aufgefaßt werden. Das Signal kann nach N Iterationen rekonstruiert werden als $f^0 = \bar{f}^N + \tilde{f}^1 + \tilde{f}^2 + \tilde{f}^3 + \dots + \tilde{f}^N$. Die so erzeugten \tilde{f}^N bilden nicht nur einen frame sondern auch eine Basis.

Wir führen nun die Operationen Translation T (nicht zu verwechseln mit dem Analyse-Operator T) und Dilatation D .

T und D wirken auf eine Funktion f so,

$$\begin{aligned} (Tf)(t) = f(t-1) &\Rightarrow (T^n f)(t) = f(t-n) \\ (Df)(t) = 2^{-\frac{1}{2}} f\left(\frac{t}{2}\right) &\Rightarrow (D^m f)(t) = 2^{-\frac{m}{2}} f\left(\frac{t}{2^m}\right) \end{aligned}$$

daß verschiedene Versionen erstellt werden. Die Operatoren T und D sind invertierbar $\langle Tf, Tg \rangle = \langle f, g \rangle = \langle Df, Dg \rangle$ und unitär $T^* = T^{-1}$, $D^* = D^{-1}$.

Diese Operationen auf eine noch zu spezifizierende Funktion ϕ angewendet erzeugen demnach verschiedenen Versionen von ϕ .

$$\phi_{m,n}(t) \equiv (D^m T^n \phi)(t) = 2^{-\frac{m}{2}} (T^n \phi)(2^{-m}t) = 2^{-\frac{m}{2}} \phi(2^{-m}t - n) \quad (3-3.47)$$

Diese tasten auf der Skala $m \in \mathbf{Z}$ zu dem Zeitpunkt $n \in \mathbf{Z}$ das Signal f ab. Wenn alle Versionen von ϕ benutzt werden, läßt sich mit ihnen das Signal f über dem gesamten Beobachtungszeitraum auf allen Skalen darstellen.

Grundsätzlich wird ϕ eine nicht negative Impulsfunktion mit einer Breite W zentriert um $t = 0$. Mit (3-1.4) ist die \tilde{f} als separierte Detailinformation und später in (3-1.27) unter bestimmten Bedingungen als Ableitung interpretiert worden. Bildet man statt $\tilde{f} = \langle \psi_{m,n}, f \rangle$ das innere Produkt $\bar{f} = \langle \phi_{s,t}, f \rangle$, ist dies die gemittelte Darstellung von f auf der Skala m auf einer Breite $2^m W$ zentriert um $t = 2^m n$ dargestellt.

Die Funktion ϕ sollte die Voraussetzungen erfüllen um eine MRA zu generieren:

1. Orthogonalität der verschiedenen translatierten Versionen auf einer Skala.

$$\langle \phi_n, \phi_k \rangle = \delta_n^k \quad (3-3.48)$$

2. Orthogonalität auf einer Skala erzwingt aber nicht die Orthogonalität zwischen verschiedenen Skalen.

$$\langle \phi_{m,n}, \phi_{m,k} \rangle = \langle D^m \phi_n, D^m \phi_k \rangle = \delta_n^k \quad (3-3.49)$$

3. Interpretiert man ϕ wie in (3-1.22) als Wahrscheinlichkeitsdichte (– bzw. als eine nicht negative integrierbare Funktion –), dann ist die Verteilungsfunktion $F(x) = \int_{-\infty}^x dt \phi(t)$ und alle Versionen ϕ_n auf eins normiert, wenn für $f \equiv 1$ gilt

$$\langle \phi_n, f \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt \bar{\phi}_n = 1 \quad (3-3.50)$$

Wenn diese Voraussetzungen erfüllt sind spannen die Funktionen $\{\phi_{m,n} : n \in \mathbf{Z}\}$ für ein festes $m \in \mathbf{Z}$ einen Unterraum V_m in $L^2(\mathbf{R})$ auf.

$$V_m = \left\{ f = \sum_n \phi_{m,n} u_n : \|f\|^2 = \sum_n |u_n|^2 < \infty \right\} \quad (3-3.51)$$

Die $\phi_{m,n}$ stellen eine orthonormale Basis in V_m dar. Der Entwicklung von f nach der Basis $\phi_{m,n}$ mit den Koeffizienten u_n

$$\sum_n \phi_{m,n} u_n = D^m \sum_n \phi_n u_n \quad (3-3.52)$$

entspricht die Anwendung von D^m auf $\sum_n \phi_n u_n \in V_0$. D^m erzeugt V_m als Unterraum von V_0 .

$$V_m = \{D^m f : f \in V_0\} \equiv D^m V_0 \quad m \in \mathbf{Z} \quad (3-3.53)$$

V_m ist das Bild von V_0 unter D^m .

Da f in V_m orthogonal entwickelt ist, wird die orthogonale Projektion nach V_m durch $P_m : L^2(\mathbf{R}) \rightarrow L^2(\mathbf{R})$ definiert:

$$P_m = \sum_n \phi_{m,n} \phi_{m,n}^* = D^m \sum_n \phi_n \phi_n^* D^{-m} = D^m P_0 D^{-m} \quad (3-3.54)$$

Das Signal f kann mit P_m auf einer Skala

$$f_m(t) \equiv (P_m f)(t) = \sum_n \phi_{m,n} \phi_{m,n}^* f \quad (3-3.55)$$

mit entsprechender Auflösung dieser Skala m rekonstruiert werden. Wenn ein Signal auf einer Skala mit $\Delta t = 2^m$ abgetastet wird gehen die Informationen, die auf Skalen kleiner 2^m enthalten sind verloren. Der Raum V_m sollte deshalb nur Signalinformationen bis $\Delta t = 2^m$ enthalten. Der Raum V_{m+1} ist dann ein Teilraum von V_m .

$$V_{m+1} \subset V_m \quad \text{für alle } m \in \mathbf{Z} \quad (3-3.56)$$

Diese Beziehung führt zu einem wichtigen Zusammenhang zwischen Basisfunktionen auf zwei verschiedenen Skalen (- mit $D\phi \in V_1$ und $V_1 \in V_0$ muß auch $D\phi \in V_0$ sein -), der Dilatations-Gleichung:

$$D\phi = \sum_n h_n \phi_n = \sum_n h_n T^n \phi \equiv h(T)\phi \quad (3-3.57)$$

In dieser Gleichung werden die Koeffizienten h_n für ϕ_n festgelegt. Die Anwendung von D_m auf ϕ_m entspricht einem Satz von Koeffizienten auf der nächsten Skala $m+1$. Diese Koeffizienten werden durch den formal eingeführten Operator $h(T) = \sum_n h_n T^n$ erzeugt. Sie stellen in der entsprechenden Basis das gemittelte Signal auf der groberen Skala dar. $h(T)$ wird deshalb als *mittelnder Operator* bezeichnet.

In (3-3.57) wird die dilatierte Version ϕ_n als Basis genutzt um die Skalenfunktion ϕ mit den Koeffizienten h_n auf der groberen Skala als Superposition zu entwickeln. In (3-3.51) ist ein Signal f in der Basis $\phi_{m,n}$ von V_m auf einer beliebigen Skala mit den Koeffizienten u_n entsprechend entwickelt.

Um einen Vektor in dem Raum V_0 darzustellen führen wir analog zu (3-3.57) einen Operator $u(T)$ ein

$$\sum_n u_n \phi_n = \sum_n u_n T^n \phi \equiv u(T)\phi \quad (3-3.58)$$

der die entsprechenden Koeffizienten erzeugt. Vektoren auf einer beliebigen Skala in V_m erhält man dann durch $D^m u(T)\phi$. Ein Vektor in V_1 kann mit der Dilatation (3-3.57) $V_1 = DV_0$ erzeugt werden.

$$Du(T)\phi = u(T^2)D\phi = u(T^2)h(T)\phi = h(T)u(T^2)\phi \quad (3-3.59)$$

Dabei gehört die rechte Seite von (3-3.59) zu V_0 in dem $V_1 \subset V_0$ aufgespannt wird. Wenn auf beide Seiten D^m angewendet wird, entsteht die Raumstruktur $V_{m+1} \subset V_m$ der MRA.

Die Operatoren $h(T)$ und $u(T)$ entsprechen den aus der Filtertheorie bekannten Laurent-Polynomen, mit den die Klassifikation von isolierten Singularitäten einer Funktion möglich ist. h_n in (3-3.57) und u_n in (3-3.58) sind dann Filterkoeffizienten. Später benötigen wir Operatoren H und G , die als *impulse response filter (IRF)* bezeichnet werden können. In Abschnitt 2.2 über die Laplace Transformation ist deshalb die korrespondierende Impuls-Antwort $h(t)$ dargestellt. Auch in ARMA-Modellen [BJ76] werden IRF [Dob84] genutzt um eine Systemantwort zu charakterisieren.

Die Menge der Polynome $h(T)$ und $u(T)$ wird mit \mathcal{P} bezeichnet. \mathcal{P} ist bezüglich der Bildung von Summen und Produkten eine Algebra [Kai92]. Aus einer Beziehung zwischen zwei Operatoren ($h(T)$ und $g(T)$) dieser Menge geht die wichtige Rotations-Symmetrie des (Phasen-)Raumes mit dem entsprechenden Operator J hervor, auf die im Abschnitt 3.3.4 noch weiter eingegangen wird.

Bevor die Methode erweitert wird, seien die Eigenschaften der MRA bis hierhin zusammengefaßt. Es gibt eine Folge von Unterräumen V_m in $L^2(\mathbf{R})$ derart, daß

1. V_0 durch ϕ generiert wird. $\phi_n(t)$ bildet eine orthonormale Basis für V_0 .
2. $V_m \equiv D^m V_0$ durch V_0 determiniert ist.
3. $V_{m+1} \subset V_m$.
4. Mit grober werdender Skala, also $m \rightarrow \infty$ wird f immer weiter durch $P_m f$ geglättet bis schließlich nur noch eine konstante Funktion übrig bleibt. Die einzige konstante Funktion in $L^2(\mathbf{R})$ ist 0.

$$\lim_{m \rightarrow \infty} P_m f = 0 \in L^2(\mathbf{R}) \quad \lim_{m \rightarrow \infty} \|P_m f\| = 0 \quad (3-3.60)$$

5. Mit feiner werdender Skala, also $m \rightarrow -\infty$ sollte $P_m f$ das Signal f immer besser approximieren.

$$\lim_{m \rightarrow -\infty} P_m f = f \in L^2(\mathbf{R}) \quad \text{bzw.} \quad \lim_{m \rightarrow -\infty} \|f - P_m f\| = 0 \quad (3-3.61)$$

Diese ineinander geschachtelte Sequenz von Unterräumen wird als MRA bezeichnet. Die Funktion ϕ definiert eine MRA unter anderem dann wenn $\int dt |\phi(t)| < \infty$ erfüllt ist.

Die Funktion ϕ skaliert das Signal und wird deshalb als Skalenfunktion bezeichnet.

3.3.1 Basis

Wir bilden die Raumsequenz $V_m \subset V_{m+1}$ in $L^2(\mathbf{R})$ und betrachten das orthogonale Komplement W . In der MRA wird die Familie $\{\psi\}$ (3-1.2 mit dem inneren Produkt erzeugt. Diese Familie bildet später in W eine Basis des Signal.

$$W_{m+1} \equiv \{f \in V_m : \langle f, g \rangle = 0 \quad \text{für alle} \quad g \in V_{m+1}\} \quad (3-3.62)$$

Die Zerlegung in zueinander orthogonal komplementäre Raumteile formulieren wir mit $W_{m+1} = V_m \ominus V_{m+1}$ oder $V_m = V_{m+1} \oplus W_{m+1}$. Somit kann für jedes $f^m \in V_m$ eine eindeutige de-komposition $f^m = f^{m+1} + d^{m+1}$ wobei $f^{m+1} \in V_{m+1}$ und $d^{m+1} \in W_{m+1}$ ist. Da $W_{m+1} \subset V_m$ und W_m orthogonal zu V_m gilt, ist auch W_{m+1} orthogonal zu W_m . Alle Unterräume W_m sind zueinander orthogonal, im Gegensatz zu den V_m . So wie mit D^m die Sequenz der Unterräume V_m (3-3.53) generiert, erzeugt D^m eine Sequenz zueinander orthogonaler Unterräume W_m .

$$W_m = \{D^m f : f \in W_0\} \equiv D^m W_0 \quad (3-3.63)$$

Analog zu dem Operator P (3-3.54) wird $Q_m : L^2(\mathbf{R}) \rightarrow L^2(\mathbf{R})$ ein Operator für die orthogonale Projektion nach W_m definiert.

$$\begin{aligned} W_m = D^m W_0 &\Rightarrow Q_m = D^m Q_0 D^{-m} \\ V_m \perp W_m &\Rightarrow P_m Q_m = Q_m P_m = 0 \\ V_m = V_{m+1} \oplus W_{m+1} &\Rightarrow P_m = P_{m+1} + Q_{m+1} \end{aligned} \quad (3-3.64)$$

Für zwei Unterräume auf verschiedenen Skalen k und m gilt $V_k \subset V_m$ und $W_k \subset W_m$ wenn $k > m$ ist. Die Unterräume mit groberer Skala sind Teilmengen der Unterräume mit feineren Skalen.

Die Projektion P_m in diese Unterräume W_m kann durch die de-komposition $P_{m+1} + Q_{m+1}$ ersetzt werden.

$$P_m = P_M + \sum_{k=m+1}^M Q_k \quad M > m \quad (3-3.65)$$

Jede Funktion $f \in L^2(\mathbf{R})$ kann nun mit den orthogonalen Projektionen P_{m+1} und Q_{m+1} de-kompositioniert werden $f^m = P_m f$. Jedes Signal f kann nun in der Praxis durch ein f^m approximiert werden.

$$f^m = P_M f + \sum_{k=m+1}^M Q_k f = P_M f^m + \sum_{k=m+1}^M Q_k f^m \quad (3-3.66)$$

Das Abtast-Interval des Signals f ist für f^m durch $\Delta t = 2^m$ gegeben. Wir bezeichnen 2^{-m} als die Auflösung des Signals. Mit höher werdender Auflösung $m \rightarrow -\infty$ wird wegen $P_m f \rightarrow f$ (3-3.66) zu

$$f = P_M f + \sum_{k=-\infty}^M Q_k f \quad f \in L^2(\mathbf{R}). \quad (3-3.67)$$

Damit ist ein Signal in einen gemittelten Anteil $f^M \equiv P_M f$ und eine Sequenz von sukzessive feiner werdenden Details $d^k = Q_k f$ mit $k < M$ zerlegt. Sollte f nur in V_m beschreibbar sein ist W_m leer, also $Q_k f = 0$. Gleichung (3-3.67) gibt deshalb eine orthogonale De-komposition des Raumes der Quadrat-integrierbarer Funktionen $L^2(\mathbf{R})$.

$$L^2(\mathbf{R}) = V_M \oplus \bigoplus_{k=-\infty}^M W_k \quad (3-3.68)$$

Mit immer grober werdender Skala $m \rightarrow \infty$ verschwindet der gemittelte Anteil $P_m f \rightarrow 0$ also auch $V_M \rightarrow 0$ und das Signal kann vollständig in dem Unterraum W_m dargestellt werden.

$$f = \sum_{k=-\infty}^{\infty} Q_k f \quad f \in L^2(\mathbf{R}) \quad (3-3.69)$$

was die orthogonale De-komposition von $L^2(\mathbf{R})$ gibt.

$$L^2(\mathbf{R}) = \bigoplus_{k=-\infty}^{\infty} W_k \quad (3-3.70)$$

Somit gibt es für jede Funktion $f \in L^2(\mathbf{R})$ (– dabei kann f auch eine approximierbare Darstellung eines physikalisch gemessenen und somit diskreten Signals sein –) eine eindeutige orthogonale De-komposition.

3.3.2 DownSample und UpSample Operatoren

Mit Hilfe der orthogonalen Projektionen P und Q kann in $L^2(\mathbf{R})$ eine orthogonale Basis aus $\{\psi\}$ gebildet werden. Für die experimentelle Berechnung sind zwei Operatoren $H : L^2(\mathbf{R}) \rightarrow L^2(\mathbf{R})$ und $G : L^2(\mathbf{R}) \rightarrow L^2(\mathbf{R})$ notwendig, deren Definition hier nur kurz angegeben ist.

$$H = P_0 D^{-1} = D^{-1} P_1 \quad G = Q_0 D^{-1} = D^{-1} Q_1 \quad (3-3.71)$$

H und G werden benutzt um die Unterräume V_m und W_m explizit zu charakterisieren sowie die mit diesen Räumen assoziierten Basen $\{\phi\}$ und $\{\psi\}$ zu generieren.

Die Operatoren H^* und G^* wirken auf $V_m = V_{m+1} \oplus W_{m+1}$ und erzeugen als Abbildungen von V_m und W_m die Unterräume V_{m+1} und W_{m+1} .

$$\begin{aligned} H V_1 &= D^{-1}V_1 = V_0 & H^* V &= D^{-1}V_1 = V_0 & HW_1 &= \{0\} \\ GW_1 &= D^{-1}W_1 = W_0 & G^* W &= D^{-1}W_1 = W_0 & G V_1 &= \{0\} \end{aligned} \quad (3-3.72)$$

Mit (3-3.62) ist das Signal auf die Unter-Räume von V und W aufgeteilt worden. Wenn nun $f^0 = f^1 + d^1 \in V_0$ wobei $f^1 \in V_1$ und $d^1 \in W_1$, dann ist

$$Hf^0 = D^{-1}f^1 \quad \text{und} \quad Gf^0 = D^{-1}d^1 \quad (3-3.73)$$

Durch $\{\phi\}$ wird Raum V_0 aufgespannt. Der Abbildungsbereich des Operators H^* ist V_1 , da H^* auf $u(T)\phi \in V_0$ (3-3.58) wirkt. In (3-3.59) wird ein Vektor in V_1 formuliert. H^* wirkt nun auf diesen Vektor

$$H^*v(T)\phi = Dv(t)\phi = h(T)v(T^2)\phi \quad (3-3.74)$$

Allgemein wird der Unterraum V_1 durch die Wirkung von $h(T)$ auf ein Polynom $v(T^2) \in \mathcal{P}$ gewonnen. V_1 ist vollständig charakterisiert durch

$$V_1 = \{h(T)v(T^2)\phi : v(T^2) \in \mathcal{P}\} \quad (3-3.75)$$

In ganz ähnlicher Weise kann W_1 charakterisiert werden. Nach (3-3.72) ist W_1 die Menge der Vektoren im Nullraum (dem orthogonalen Komplement) von V_0 . Um diesen Nullraum zu konstruieren muß H explizit formuliert sein. Dazu wird zunächst der *UpSample Operator* S_{\uparrow} definiert. S_{\uparrow} wirkt auf das gemittelte Signal der groberen Skala und erzeugt auf der feineren Skala ein Signal mit der doppelten Anzahl von Abtast-Punkten.

$$S_{\uparrow}u(T)\phi \equiv u(T^2)\phi = \sum_n u_n T^{2n}\phi = \sum_n u_n \phi_{2n} \quad (3-3.76)$$

Dabei wird nur das Abtast-Intervall $\Delta t = 2$ durch Einfügen einer Null zwischen jedem Wert verdoppelt. Die entstandenen Lücken werden danach mit dem mittelnden Operator $h(T)$ so aufgefüllt, daß exakt die gestreckte Version des Original-Signals $Du(T)\phi$ zurückgewonnen wird. Mit (3-3.74) und (3-3.76) ist $H^* : V_0 \rightarrow V_0$

$$H^*u(T)\phi = h(T)S_{\uparrow}u(T)\phi \quad \text{bzw.} \quad H^* = h(T)S_{\uparrow} \quad (3-3.77)$$

ein interpolierender Operator. Der adjungierte Operator $H : V_0 \rightarrow V_0$ kann sofort angegeben werden.

$$H = S_{\uparrow}^*h(T)^* = S_{\downarrow}h(T)^* \quad (3-3.78)$$

Mit H^* wird das Signal vergrößert und H verkleinert es. Dabei ist $S_{\downarrow} \equiv S_{\uparrow}^*$ in (3-3.77) der DownSample-Operator.

Wie bei der Signal-Analyse der Operator T (beachte, hier ist T nicht das Symbol für den Translations-Operator) und bei der Synthese der Operator S zerlegen die Operatoren S_{\uparrow} und S_{\downarrow} ein Signal jetzt auf verschiedene Skalen und setzen es auch wieder zusammen. Im Gegensatz zu der Wirkung von T (3-1.9) geht ganz offensichtlich durch das DownSampeln mit S_{\downarrow} Information verloren. Dieser Teil der Information, der nicht mehr in V_1 enthalten ist, befindet sich in W_1 dem Nullraum von V_1 . W_1 kann auch explizit durch diese Bedingung charakterisiert werden.

$$0 \stackrel{!}{=} Hu(T)\phi = S_{\downarrow}h(T)^*u(T)\phi \quad (3-3.79)$$

$$= \frac{1}{2}D^{-1} \left[h(T)^*u(T) + h(-T)^*u(-T) \right] D\phi \quad (3-3.80)$$

Diese Beziehung ist erfüllt wenn der Klammerausdruck durch die Wahl von $u(T) = h(-T)^*v(T)$ zum Verschwinden gebracht wird. Es kann gezeigt werden, daß mit (3-3.79) W_1 als Komplement zu V_1 (3-3.75) beschrieben wird. Wie oben erwähnt ist $u(T)$ die Operation, die ausgeführt wird um in V_m einen Vektor zu erzeugen. Durch (3-3.78) verschwindet ein Teil der Information in dem Nullraum von V_1 . Um das Signal verlustfrei reproduzieren zu können zerfällt $u(T)$ nun in zwei Anteile. In einen Teil der Signalinformation in V_1 , und in einen zweiten der die Signalteilinformation W_1 darstellt.

$$\left\{ u(T) = \overbrace{h(T)v(T^2)}^{V_{m+1}} + \underbrace{g(T)w(T^2)}_{W_{m+1}} \right\} V_m \quad (3-3.81)$$

wobei $v(T)$ und $w(T)$ beliebige Polynome in der Algebra \mathcal{P} sind. Damit ist W_1 analog zu (3-3.75) beschrieben,

$$W_1 = \{g(T)w(T^2)\phi : w(T) \in \mathcal{P}\} \quad (3-3.82)$$

wenn eine bestimmte Beziehung zwischen $h(T)$ und $g(T)$ erfüllt ist, die hier nur angegeben wird $g(T) = -T^\lambda h(-T)^*$ (wobei $\lambda \in \mathbf{Z}$ eine ungerade Zahl ist).

In (3-3.81) kann $g(T)$ als differenzierender Operator auf V_0 interpretiert werden, so wie $h(T)$ als mittelnder Operator. Der Parameter λ in (3-3.89) wirkt auf das Polynom $w(T)$ und somit auf die W_m aufspannende Basis.

3.3.3 Basis System des W -Raumes

In der MRA wird auch der Unterraum W erzeugt. Mit den oben definierten Operatoren wird nun die Basis von W konstruiert. So wie V_0 aus einer Skalenfunktion ϕ hervorgegangen ist, wird W_0 auf einer mit ϕ korrespondierenden Funktion ψ aufgebaut. Die weiteren Unterräume W_{m+1} werden wie die V_{m+1} rekursiv mit

dem Operator D gewonnen $W_0 = D^{-1}W_1$. Ein Vektor kann in W nun wie folgt beschrieben werden. Auf den W_1 beschreibenden Term (– das zweite Produkt in (3-3.81) –) wird der Operator D angewendet.

$$D^{-1}g(T)w(T^2)\phi = D^{-1}w(T^2)g(T) = w(T)D^{-1}g(T)\phi \quad (3-3.83)$$

wobei $w(T) \in \mathcal{P}$. Die zur Skalen-Funktion ϕ korrespondierende Basisfunktion ψ wird nun definiert als.

$$\psi \equiv D^{-1}g(T)\phi \in W_0 \quad (3-3.84)$$

Analog zu (3-3.47) werden mit dem Operator T translatierte Versionen von ψ benutzt um W_0 aufzuspannen.

$$\psi_n \equiv T^n\psi = T^nD^{-1}g(T)\phi = D^{-1}T^{2n}g(T)\phi \quad (3-3.85)$$

Verallgemeinert man dieses Verfahren für beliebige Skalen $m \in \mathbf{Z}$ sind die Vektoren in W_m durch

$$\begin{aligned} \psi_{m,n} \equiv D^m T^m \psi \quad \text{bzw.} \quad \psi_{m,n}(t) &= 2^{-\frac{m}{2}} \psi(2^{-m}t - n) \\ \psi_{\sigma^m, n\sigma^m\tau}(t) &= \sigma^{-mp} \psi\left(\frac{t - n\sigma^m\tau}{\sigma^m}\right) \\ &\equiv \Psi_{m,n}(t) \end{aligned} \quad (3-3.86)$$

gegeben(, wobei $p = \frac{1}{2}$ und $\sigma = 2$ gesetzt wurde). Es handelt sich um den diskreten frame $\Psi_{m,n}(t)$ (3-2.42), für die oben die Signal-Synthese mit frei wählbarem Maßraum gezeigt wurde.

Zu der orthogonalen Projektion P_m in V_m ist analog Q_m in W_m eingeführt worden. Mit dem Basissystem in W_m ist nun $Q_m = \sum_n \psi_{m,n} \psi_{m,n}^*$. Jedes Signal kann nun mit (3-3.67) einer eindeutigen De-komposition mit diskreten frame's $\Psi_{m,n}(t)$ zugeordnet werden.

$$f = \sum_{n \in \mathbf{Z}} \phi_{M,n} \phi_{M,n}^* f + \sum_{k=-\infty}^M \sum_{n \in \mathbf{Z}} \psi_{k,n} \psi_{k,n}^* f \quad (3-3.87)$$

$$f = \sum_{k \in \mathbf{Z}} \sum_{n \in \mathbf{Z}} \psi_{k,n} \psi_{k,n}^* f \quad (3-3.88)$$

3.3.4 Rotations-Operator J

Ohne eine weiter ins Detail gehende Begründung ist hier eine wichtige Beziehung für die MRA zwischen $h(T)$ und $g(T)$ angegeben. Beide Operatoren wirken auf V_0 und sind zueinander orthogonal komplementär.

$$g(T) = -T^\lambda h(-T)^* \quad (3-3.89)$$

Die erzeugten Basisfunktionen von V und W sind

$$D\phi = h(T)\phi \quad D\psi = g(T)\psi \quad (3-3.90)$$

Die Filter H und G sind

$$\begin{array}{l} H^*u(T)\phi = h(T) u(T^2)\phi \quad \overbrace{G^*u(T)\psi = g(T) u(T^2)\phi}^{\phi \leftrightarrow \psi} \\ \underbrace{H u(T)\phi = S_{\downarrow}h(T)^*u(T) \phi \quad G u(T)\phi = S_{\downarrow}g(T)^*u(T) \psi}_{H \leftrightarrow G} \end{array}$$

mit einer Symmetrie zwischen $H \leftrightarrow G$, $\phi \leftrightarrow \psi$ und $h(T) \leftrightarrow g(T)$ versehen. $h(T)$, ϕ und H sind dem V -Raum zuzuordnen. $g(T)$, ψ und G gehören dem W -Raum an. Ein Objekt im V -Raum hat ein korrespondierendes im W -Raum. Wir definieren den Operator $J : V_0 \rightarrow V_0$ der diese Symmetrie realisiert.

$$Ju(T)\phi = -T^\lambda u(T)^*\phi \quad (3-3.91)$$

wobei λ eine ungerade Parameterzahl $\in \mathbf{Z}$ von $g(T)$ ist.

Es kann gezeigt werden, daß

1. $J^2 = -I_{V_0}$: die Wirkung von J eine komplexe Multiplikation mit i bzw. eine 90° Rotation in V_0 ist,
2. $JD\phi = D\psi$, $JD\psi = -D\phi$: J dreht $D\phi \in V_1$ nach $D\psi \in W_1$,
3. $JV_1 = W_1$, $JW_1 = V_1$: der gesamte Unterraum V_1 wird auf das orthogonale Komplement W_1 abgebildet und umgekehrt.

Der Rotationsoperator J erzeugt eine Zerlegung von $L^2(\mathbf{R})$, die als "Packet"-Zerlegung bezeichnet wird und spezielle und für uns notwendige Eigenschaften hat, mit denen später operiert werden wird.

3.3.5 Filterkoeffizienten

Alle für diese Arbeit durchgeführten Berechnungen werden mit Filterkoeffizienten realisiert.

Grundsätzlich wird ein Signal mit einer Basis und den Koeffizienten dieser Basis formuliert. Das skizzierte Verfahren eines Systems von Basen mit Hilfe von Operatoren zu erzeugen wirkt auf die Darstellung der Basisfunktion ϕ und ψ selbst. Diese Funktionen sind ähnlich wie das Signal durch Koeffizienten bezüglich den Basisfunktionen eines übergeordneten Raumes der jeweils höheren Skala formuliert (3-3.57). So eine Formulierung einer Basisfunktionen ist als eine Sequenz aus Filterkoeffizienten (– siehe h_n in (3-3.57) oder u_n in (3-3.58) –) realisiert. Die rekursive Anwendung der Operatoren auf die Basis respektive auf die Sequenz aus Filterkoeffizienten erzeugt einen neuen Satz Koeffizienten, einer neuen Basis, eines neuen Unterraumes. Hier ist die Beziehung der Koeffizienten

des V -Raumes und des W -Raumes angegeben. Diese ist auf die komplementären Operatoren $h(T)$ und $g(T)$ in (3-3.81) zurückzuführen.

$$\begin{aligned}
 g(T) = -T^\lambda h(-T)^* &= -\sum_n (-1)^n h_n T^{\lambda-n} \\
 &= \sum_n (-1)^n h_{\lambda-n} T^n \\
 g_n &= (-1)^n \bar{h}_{\lambda-n}
 \end{aligned} \tag{3-3.92}$$

Dabei ist g_n die Sequenz der Filterkoeffizienten von ψ und \bar{h}_n die von ϕ . Hier ist angegeben wie die Operatoren $H : V_0 \rightarrow V_0$ und $G : V_0 \rightarrow W_0$ aus den Basis-Funktionen von V und W die Koeffizienten der jeweiligen Unterräume generieren.

$$G^* \psi_k = \sum_n g_{n-2k} \phi_n \quad H \phi_n = \sum_n \bar{h}_{n-2k} \phi_k \quad G \psi_k = \sum_n \bar{g}_{n-2k} \phi_n \tag{3-3.93}$$

H und G sind *impuls response filter* (siehe 2-2.29), die ein vollständig rekursives Schema der Signal-Analyse und Synthese bilden. Auf eine Koeffizienten-Sequenz $u^0 = \{u_n^0\}$ angewendet lautet die Signal-De-komposition:

$$u^0 = H^* u^1 + G^* d^1 \quad \text{wobei} \quad u^1 = H u^0 \quad d^1 = G u^0 \tag{3-3.94}$$

Für beliebige Skalen m gilt:

$$u^m = H^* u^{m+1} + G^* d^{m+1} \quad \text{wobei} \quad u^{m+1} = H u^m \quad d^{m+1} = G u^m \tag{3-3.95}$$

Alle notwendigen Koeffizienten können mit diesem vollständig rekursiven Verfahren berechnet werden ohne einmal ein Integral wie etwa (3-1.17) direkt auszuwerten. Es ist deshalb für schnelle numerischen Berechnungen geeignet.

3.3.6 “Packet”-Zerlegung

Die MRA führt durch das Skalieren zu einer logarithmischen Unterteilung des Frequenzbereiches und nicht zu einer linearen Aufteilung in Frequenzbänder gleicher Breite (wie z.B. die Fourieranalyse). Die Abtastrate wird auf den Frequenzbereich automatisch angepaßt. Die Auflösung der MRA wird weiter erhöht, indem die Frequenzbereiche nochmals zerlegt werden, sodaß die Unter-Räume W_m weiter aufgeteilt werden. Es werden die Operatoren $F_0 : V_0 \rightarrow V_0$ und $F_1 : V_0 \rightarrow V_0$ definiert:

$$F_0 = H \quad F_1 = -HJ \quad (3-3.96)$$

Dabei zeigt F_1 grundsätzlich ähnliche Eigenschaften wie G (in (3-3.93) definiert).

$$\begin{aligned} F_1 V_1 &= -HJV_1 = -HW_1 = \{0\} \\ F_1 W_1 &= -HJW_1 = -HV_1 = V_0 \\ F_1^* V_0 &= JH^*V_0 = JV_1 = W_1 \end{aligned}$$

Auf die Sequenz der Filterkoeffizienten $\{u_n\}$ angewendet formuliert sich die Wirkung von F und F^* analog zu (3-3.93)

$$F_1^* \{u_k\}_{k \in \mathbf{Z}} = \left\{ \sum_k g_{n+2k} u_k \right\}_{n \in \mathbf{Z}} \quad F_1 \{u_n\}_{n \in \mathbf{Z}} = \left\{ \sum_n g_{n+2k} u_n \right\}_{k \in \mathbf{Z}} .$$

Der Vergleich mit (3-3.93) zeigt F und F^* als nahezu identisch mit G und G^* . Der Unterschied besteht darin, daß G von V_0 nach W_0 abbildet. Demgegenüber bildet F_1 V_0 auf sichselbst ab. Es kann auch eine beliebige Kombination von F_1 , F_0 , F_1^* und F_0^* benutzt werden um eine Abbildung $V_0 \rightarrow V_0$ zu realisieren. F_0 und F_1 können wie G und H eine orthogonale De-komposition $V_0 = V_1 \oplus W_1$ erzeugen.

$$(a) \quad F_a F_b^* = \delta_b^a I_{V_0} \quad \text{wobei } (a, b = 0, 1) \quad (b) \quad F_0^* F_0 + F_1^* F_1 = I_{V_0} \quad (3-3.97)$$

Eine beliebige Zusammenstellung der Filter $F_{a,b}$ wird mit einem Satz aus geordnet indizierten Koeffizienten formuliert. $A = \{a_1, a_2, a_3, \dots, a_m\}$ und $B = \{b_1, b_2, \dots, b_m\}$ wobei die Länge von A bzw. B mit $|A| = |B| = m$ ist. In (3-3.97) wird δ_b^a ersetzt durch $\delta_B^A = \delta_{b_1}^{a_1}, \delta_{b_2}^{a_2}, \dots, \delta_{b_m}^{a_m}$. Damit wird (3-3.97) auf beliebige Filter-Kompositionen verallgemeinert.

$$(a) \quad F_A F_B^* = \delta_B^A I_{V_0} \quad \text{wenn } |A| = |B| \geq 1 \quad (3-3.98)$$

$$(b) \quad \sum_{|A|=m} F_A^* F_A = I_{V_0} \quad \text{für jedes } m \geq 1 \quad (3-3.99)$$

Der Operator $F_A^* F_A$ bildet einen vollständigen Satz orthogonaler Projektionen auf V_0 . Dieser Satz wird hier als $\prod_A \equiv F_A^* F_A$ bezeichnet.

$$\prod_A^* = \prod_A = \prod_A^*, \quad \prod_A \prod_B = \delta_B^A \prod_A, \quad \sum_{|A|=m} \prod_A = I_{V_0} \quad (3-3.100)$$

Im Gegensatz zu dem Projektions-Operator P_m in (3-3.55), der f nur teilweise (– mit der Auflösung der Skala m als f_m –) darstellen kann, ist mit \prod_A eine vollständige Entwicklung von jedem f mit beliebiger Auflösung möglich.

$$f = \sum_{|A|=m} \prod_A f \equiv \sum_{|A|=m} f_A \quad (3-3.101)$$

Wenn in 3-3.98 $A \neq B$ gilt, ist das innere Produkt $\langle f_A, f_B \rangle = 0$. Das vollständig rekursive Verfahren (3-3.94) in dem die Filter H und G eine Koeffizienten-Sequenz erzeugt haben, kann somit nun verallgemeinert werden, indem ein F_A die Aufgabe von H und ein F_B die von G übernimmt. Mit der ersten Rekursion wird eine beliebige Koeffizienten-Sequenz $u \in V_0$ zerlegt in

$$u = \sum_{|A|=m} \prod_A u = \sum_{|A|=m} F_A^* F_A u = \sum_{|A|=m} F_A^* u^A, \quad \text{wobei } u^A \equiv F_A u \text{ ist.} \quad (3-3.102)$$

Die wiederholte r -fache Rekursion liefert

$$u^{A_1 A_2 \dots A_r} = \sum_{|A_{r+1}|=m} F_{A_{r+1}}^* u^{A_1 A_2 \dots A_{r+1}}, \quad (3-3.103)$$

wobei $u^{A_1 A_2 \dots A_{r+1}} \equiv F_{A_{r+1}} u^{A_1 A_2 \dots A_r}$ ist. Der Unterschied zu (3-3.95) besteht nun darin, daß nicht nur die V_m Gegenstand der rekursiven De-komposition sind, sondern die W_m einer weiteren De-komposition unterworfen werden. Dieser so erzeugte Raum ist ebenso mit einer Basis ausgestattet. Es handelt sich um zueinander orthonormierte Bäume von Raumsequenzen. Alle bis hierhin gezeigten Eigenschaften übertragen sich auf die erzeugte Raum-Struktur dieser ‘‘Paket’’-Zerlegung. In dieser wird fortan operiert.

Kapitel 4

Experimenteller Teil

Nachdem in Kapitel 2 und 3 die vorgestellten Formalismen dargestellt sind, mit denen ein System beschrieben werden kann, wenn Signale von ihm gemessen werden können, soll nun die Anwendung dieser Formalismen an konkreten Beispielen getestet werden.

Als Beispiel ist eines der einfachsten nicht-linearen nicht stationären Phänomene gewählt, eine nicht-lineare Oszillation eines chemischen Reaktionssystems. Nicht-lineare Oszillationen sind mathematisch und experimentell hinreichend untersucht, um als Testsystem zu dienen. Als mathematisches Testsystem ist das in 2.3 angegebene Differentialgleichungssystem bzw. deren Lösung verwandt, das ein Modell für das biochemische Reaktionsgeschehen im Stoffwechselweg der Glycolyse ist. Als experimentelles Reaktionssystem sind Meßdaten der chemischen Oszillation der anorganisch-organischen Reaktion in der Belousov-Zhabotinsky-Reaktion herangezogen.

Sie verhält sich in dem Meßzeitraum quasi wie ein "Chemical Stirred Tank Reactor"(CSTR). Der CSTR erzeugt das Signal eines Limitzyklus. Dies ist ein zwei-dimensionales System welches nicht lineares und nicht stationäres Verhalten erzeugen kann.

Als Meßsignal wird die Konzentration vom chemischen Reaktanden aufgezeichnet, die nicht-linear oszillieren. Diese Meßsignale sind einerseits mit geringem Aufwand zu gewinnen, und geben andererseits reproduzierbare Oszillationen als experimentelle Meßsignale der Metaboliten der Glycolyse.

4.1 Vorarbeiten

Die Konzentration eines Stoffwechsel-Produktes NADH war als Zeitreihe gegeben. Sie war mit einer spektrophotometrischen Methode bestimmt worden.

Wie bei der bekannten Belousov-Zhabotinsky-Reaktion zeigen sich auch bei diesem Experiment Oszillationen. Dieses Phänomen sollte untersucht werden. Die gemessenen Daten waren auf einem VAX-System verfügbar und konnten dort be-

arbeitet werden. Die ersten Versuche wurden dort programmiert. Wegen Inkompatibilitäten zu anderen Systemen, Fehler in Compilern und ähnlichem ist UNIX als System gewählt worden. Für die Untersuchungen des Test-Systems wurde das Programmpaket MLAB benutzt. MLAB hat den Vorzug, an gegebene Daten Differentialgleichungen "fitten" zu können. MLAB war nur unter DOS verfügbar und durch einen Dongle geschützt. Die Programmierung der experimentellen Untersuchungen war aber in C unter UNIX umzusetzen. Außerdem waren Programme notwendig die nur auf Windows-Systemen bereit gestellt werden konnten. Diesen Vielzahl von Anwendungen war unter verschiedenen Betriebssystemen kompatibel zu machen. Dafür war notwendige Hardware anzuschaffen. Auf dieser sind die Systeme DOS, Windows OS2-Warp und Linux installiert worden.

In dem theoretischen Teil der Arbeit kann erkannt werden, daß ein wesentlicher Anteil der Berechnungen eine Vielzahl von miteinander verketteten Matrixoperationen ist. Die C-Programmierung von mehr-dimensionalen Matrixoperationen birgt eine erhebliche Fehlerquelle. So kann die Vertauschung zweier Indizes i und j durchaus drei Tage lang für Irritation sorgen. Darüberhinaus war die Integrität jeder entwickelten Routine mit Testprogrammen zu prüfen.

Die effiziente Durchführung der Untersuchungen ist in der Umgebung MATLAB möglich. Im Gegensatz zu Programmen wie Mathematika, die auf Symbolischen Ausdrücken operieren, ist MATLAB [Inc97] wie auch MLAB auf Matrixoperationen aufgebaut. MLAB kann zusätzlich noch assoziative Berechnungen ausführen. Dies erleichtert die Programmierarbeit, indem z.B. Differentialgleichungen wie in der mathematischen Notation üblich geschrieben werden und die entsprechenden Assoziationen für die Zwischenschritte vom MLAB übernommen werden.

Da MLAB unter Linux weiter zu entwickeln nicht zu den primären Zielen zählte, haben wir davon Abstand genommen dieses gemeinsam mit dem Produzenten zu tun.

Die Arbeitsgruppe von D. Donoho an dem Institut für Statistik der Stanford University hat die Funktions-Bibliothek WaveLab [Don97] für MATLAB entwickelt, ähnlich wie die "Numerical Recipes für C". Die zu diesem Zeitpunkt bereits vorhandenen C-Quellen sind für MATLAB umgeschrieben worden um fortan auf diesem Standard weiter zuarbeiten.

Aus dem Umgang mit dem Programm Packet WaveLab ist im Laufe der Arbeit eine Reihe von Vorstellungen und Ideen entwickelt worden, die in die Arbeit eingeflossen sind. Andererseits hat diese Tätigkeit bei weitem den größten Teil der Vorbereitungen bestimmt.

4.2 Mathematisches Test-System

Um ein System analytisch zu charakterisieren muß zunächst die Methode der Analyse getestet werden. Andernfalls sind die gewonnenen Aussagen fraglich.

Im Abschnitt 2.3 haben wir ein Stoffwechsel-Modell (2-3.32) als ein Netzwerk aus Komponenten mit einer Connectivity formuliert. Diese chemische Reaktion verläuft auf einem Limit-Zyklus. Albert Goldbeter [GL72] hat für diese Reaktion ein mathematisches Modell entwickelt. Es bietet sich an das Goldbeter-Modell als Test-System zu wählen, da unterschiedliche vorteilhafte Aspekte genutzt werden können. Einerseits ist dieses Modell in der Literatur etabliert, weil es die Reaktions-Kinetik gut beschreibt. Andererseits soll nicht nur die Qualität der dynamischen Interpretation, sondern auch die der generalisierten Komponenten und deren Connectivity aus einem gemessenen Signal konstruiert und bewertet werden. Auch wäre von der System-Topologie überprüfbar, ob sie mit den Ergebnisse in 2.4.1 und 2.3 übereinstimmt.

Das Limit-Zyklus Verhalten von Systemen ist eines der einfachsten nicht-lineare und nicht-stationäre Phänomene und kann zudem mit nur zwei Variablen dargestellt werden. Viele Verfahren (– etwa zur Dimensions-Analyse oder zum Bestimmen des Verhaltens des Lyapunov Exponenten beim Übergang vom stationären in den nicht-stationären Zustand –) sind am Limit-Zyklus getestet worden [FAH95], sodaß wir es mit einem sehr gut untersuchten Systemverhalten zu tun haben. Wahrscheinlich werden wir keine neuen Erkenntnisse über das Test-System gewinnen können. Dies haben wir auch nicht vor.

Im Gegenteil, die vorhandenen Ergebnisse werden später benutzt, um auf die Qualität der Interpretation zuzuschließen, die auf (3-3.86), also mit diskreten *frame's* $\Psi_{m,n}(t)$ synthetisierte Meßwerte zurück geht.

4.2.1 Berechnung des Modellmechanismus

Das Goldbeter-Modell für die Stoffwechsel-Reaktion war in Abschnitt 2.3 durch (2-3.32) gegeben.

$$\frac{d\xi_1}{dt} = -\Theta(\xi_1, \xi_2) + v_{\text{in}} \quad \frac{d\xi_2}{dt} = a\Theta(\xi_1, \xi_2) - k \cdot \xi_2 \quad (4-2.1)$$

dabei ist die Reaktorfunktion Θ

$$\Theta(\xi_1, \bar{\xi}_2) = e_{\text{tot}} \cdot \xi_1 \frac{a_1 \bar{\xi}_2^2 + a_2}{(a_3 \xi_1 + a_4) \bar{\xi}_2^2 + (a_5 \xi_1 + a_6)} \quad (4-2.2)$$

mit $\bar{\xi}_2 = -\xi_2 + 2.4$, wobei die ξ_1 , ξ_2 und $\bar{\xi}_2$ dimensionslose Konzentrationen sind

$$\text{und} \quad \begin{array}{lll} e_{\text{tot}} = 10^{-7} & a_1 = 0.0509 & a_4 = e_{\text{tot}} \\ v_{\text{in}} = 0.2 & a_2 = 9 \cdot 10^{-4} & a_5 = 10^{-9} \\ k = -50 & a_3 = 2 \cdot a_5 & a_6 = e_{\text{tot}} \\ a = -100 & & \end{array} \quad (4-2.3)$$

Das System ist im Phasenraum Abb. 4.11 charakterisiert worden.

Das Modell (4-2.1) wird jetzt numerisch gelöst. Für ξ_1 , $\dot{\xi}_1$, ξ_2 und $\dot{\xi}_2$ ergeben sich die in Abb.4.1 gezeigten Funktionen. In den Phasen-Diagramme ist in Abb. 4.2 ξ_1 gegen ξ_2 und $\dot{\xi}_1$ gegen $\dot{\xi}_2$ aufgetragen.

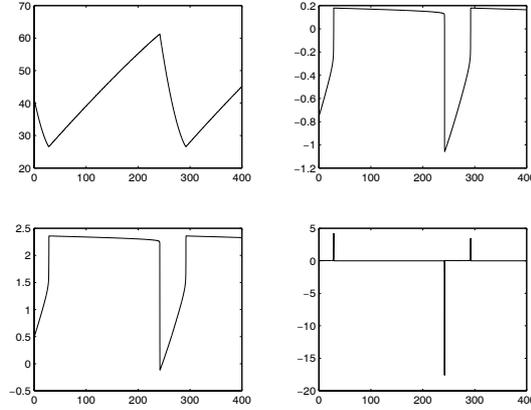


Abbildung 4.1: Lösungen des Glycolyse Modells von Goldbeter 2-3.32 für die Anfangsbedingungen $\xi_1(0) = 41.30$ und $\xi_2(0) = 0.491$ und den Parametersatz (4-2.3). Links ξ_1 und $\dot{\xi}_1$ als Funktion von der Zeit; rechts ξ_2 und $\dot{\xi}_2$ als Funktion von der Zeit

Die beiden Diagramme in Abb. 4.2 sehen sich ähnlich. Es handelt sich hier um eine Relaxationsoszillation bei der ξ_1 die langsame Variable mit hoher Konzentration (Folgevariable) und ξ_2 die schnelle Variable (Steuervariable), die die Konzentration ξ_1 regelt, ist. Sie hat daher nur eine wesentlich geringere Konzentration. Sie wird deutlich, wenn $\Theta(\xi_1, \xi_2)$ in die Darstellung einer Enzymkinetik umgeformt wird:

$$\Theta(\xi_1, \xi_2) = \frac{v_{\max}}{1 + \frac{K_M}{\xi_1}} \quad (4-2.4)$$

mit der maximalen Umsatzrate v_{\max} und der Michaelis Konstante K_M

$$v_{\max} = e_{\text{tot}} \frac{a_1 \bar{\xi}_2^2 + a_2}{(a_3 \bar{\xi}_2^2 + a_5)} \quad K_M = \frac{(a_4 \bar{\xi}_2^2 + a_6)}{(a_3 \bar{\xi}_2^2 + a_5)} \quad (4-2.5)$$

Die Gleichung für den Reaktor $\dot{\xi}_1 = v_{\text{in}} - \Theta(\xi_1, \xi_2)$ besagt, daß die Komponente ξ_1 dem Reaktor mit der Rate v_{in} zugeführt wird und im Reaktor enzymkatalysiert mit der Rate $\Theta(\xi_1, \xi_2)$ umgesetzt wird, wobei die Rate $\Theta(\xi_1, \xi_2)$ durch die Konzentration der Komponente ξ_2 geregelt wird.

Da die Regelkomponente ξ_2 in geringer Konzentration vorhanden ist, kann sie sehr schnell reagieren, so daß sich ihr Verhalten, in der Änderung (Differentialquotienten) der langsamen Komponente widerspiegelt. Das ist der Grund für die Ähnlichkeit der beiden Diagramme.

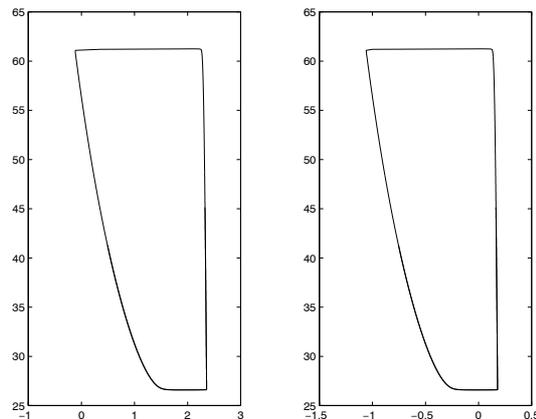


Abbildung 4.2: Phasendiagramm: Links ξ_1 gegen ξ_2 und rechts ξ_1 gegen $\dot{\xi}_1$. Die Form des Limit-Zyklus ist in beiden Diagrammen gleich.

Die Abb. 4.1 zeigt, daß $\dot{\xi}_1$ etwa proportional ξ_2 ist, das heißt die Differentialgleichungen (4-2.1) approximieren ein Differentialgleichungssystem der Form 4-3.45 wie es in Abschnitt 4.3.4 beschrieben ist. Diese Approximation ist bei Relaxationsoszillationen häufig zu finden und ermöglicht es, wie im Folgenden gezeigt, eine gute Beschreibung des Systems zu erhalten.

Das Programm *Domaene* simuliert das System-Verhalten bzw. die Lösungen in der Umgebung des singulären Punktes und in den verschiedenen Domänen. Die Dynamik des Modell-Systems ist somit charakterisiert.

Ermitteln fehlender Variabler

Für das Stoffwechsel-Modell ist nach 2.4.1 und 2.3 aus der Netzwerk-Formulierung die dynamische Beschreibung in Form eines Differentialgleichungssystems abgeleitet worden. In Abschnitt 4.2.1 ist die Dynamik des Test-Systems in einem Phasenraum ξ_2 gegen ξ_1 beschrieben. In diesem Fall war der vollständige Satz der Variablen ξ_i und $\dot{\xi}_i$ gegeben. Ist durch Messung nur eine System-Variable (entweder ξ_1 oder ξ_2) zugänglich, so kann das System trotzdem im Phasenraum charakterisiert werden. Als beschreibende System-Variable können im Phasenraum dann z.B. zeitliche Differentialquotienten verschiedener Ordnung gegeneinander aufgetragen werden, daher sollte die Phasenraumdarstellung durch Integration oder Differentiation der gemessenen Variable konstruiert werden können. Denn die System-Variablen stehen im Phasenraum über diese Operationen (Transformationen) zueinander in Beziehung.

Die Dynamik des Test-Systems wird durch ein autonomes Differentialgleichungssystem erster Ordnung beschreiben. Wäre es durch die Differentialgleichung n -ter Ordnung gegeben, so gibt es eine Transformation, die auf n Dgl-en erster Ordnung führt. Die beschreibenden Variablen des transformierten

Gleichungs-Systems können dann wie gehabt gegeneinander aufgetragen werden um eine Phasenraumdarstellung zu erhalten.

Da der vollständige Satz der beschreibenden System-Variablen nicht gegeben ist, sondern nur eine Variable durch Messung zugänglich ist, wäre die fehlende Variable zu ermitteln.

Nach Gl. 3-1.27 ist unter bestimmten Voraussetzungen die transformierte \tilde{f} eines Signals f bis auf einen Faktor zu der Ableitung von f proportional. Demnach entspricht die inverse Transformation auf irgend eine Weise der Integration. An dieser Stelle wird gezeigt das die fehlende System-Variable mit (3-1.4)

$$\tilde{f}(s, t) = \langle \psi_{s,t}, f \rangle \quad (4-2.6)$$

beschafft werden kann.

Dies läuft für diesen prinzipiellen und exemplarischen Fall lediglich darauf hinaus eine Ableitung zu bilden. Gegenstand späterer Untersuchungen ist es dann ein Kriterium zu entwickeln, mit dem beurteilt werden kann, ob durch \tilde{f} eine neue beschreibende System-Variable erzeugt wurde und wie gut diese ist. Außerdem ist davon auszugehen, daß es nur in den seltensten Fällen gelingen wird durch physikalische Messung die Information von genau einer System-Variable in einem Signal zu formulieren. Es wird immer notwendig sein, die Signal-Information aufzufalten, mindestens aber von dem zu trennen was weitläufig als "Rauschen" bezeichnet wird.

Folgevariable ξ_1 gemessen. Gesucht Steuervariable ξ_2 : Mit (4-2.6) kann $\tilde{\xi}(s, t) = \langle \psi_{s,t}, \xi_1 \rangle$ berechnet werden, was nach (3-1.27) der Differentiation entspricht, also $\tilde{\xi}(s, t) \simeq \dot{\xi}_1$. Dafür wäre ein geeigneter *frame* zu wählen und das entsprechende Integral auszuwerten. Statt dessen benutzen wir das rekursive Verfahren (3-3.95), die Packet-Dekomposition mit Wavelets. Es wird das Schema Abb. 4.3 erzeugt. Es handelt sich um die Baumstruktur von zueinander orthogonalen Sub-Raum-Kaskaden. Aus dieser Zeit-Skalen-Ebene werden auf einer geeigneten Skala die nach (3-3.68) einander zugeordneten Signalkomponenten \tilde{f} aus dem V -Raum und \tilde{f} aus dem Detail-Raum W entnommen (– hier ist $\tilde{f} = \xi_1$ und $\tilde{f} = \dot{\xi}_1^b$ (b für berechnet) gesetzt–).

In Abb. 4.4 ist die gegebenen Variable ξ_1 und die berechnete Variable $\dot{\xi}_1^b$, und die Abweichung $\dot{\xi}_1^b$ von ξ_1 dargestellt. Auch der Vergleich mit Abb. 4.1 zeigt bis auf einen Faktor eine gute Übereinstimmung zwischen der aus ξ_1 bestimmten $\dot{\xi}_1^b$ und dem tatsächlichen Verlauf von ξ_2 .

Steuervariable ξ_2 gemessen. Gesucht Folgevariable ξ_1 Der direkte Weg ξ_1^b aus ξ_2 zu berechnen, ist die kumulierte Summe pro mittlerem Zuwachs für jedes Meß-Intervall zu bilden (entspricht dem MATLAB Befehl `cumsum`). Die Summe variiert mit dem Meß-Intervall und wird über der Zeitachse aufgetragen. Die Funktion ξ_1^b ist bis auf einen Faktor dem Original ξ_1 sehr ähnlich. In Abb. 4.5

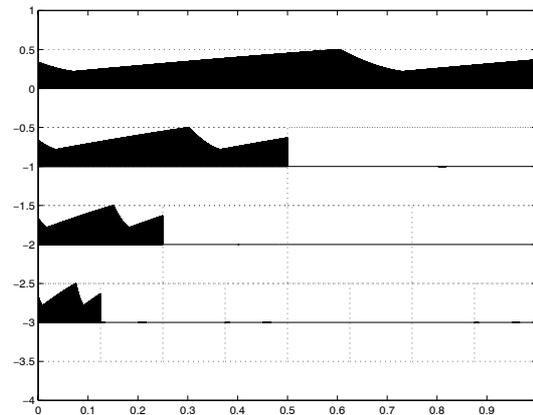


Abbildung 4.3: Zeit Skalen Ebene erzeugt durch die Packet-Dekomposition des Signals ξ_1 mit Haar Wavelets von Abb. 4.1 durch das Programm `WPAanalysis` von WaveLab

ist das Original Signal ξ_1 und die synthetisierte bzw. transformierte Funktion ξ_1^b gezeigt.

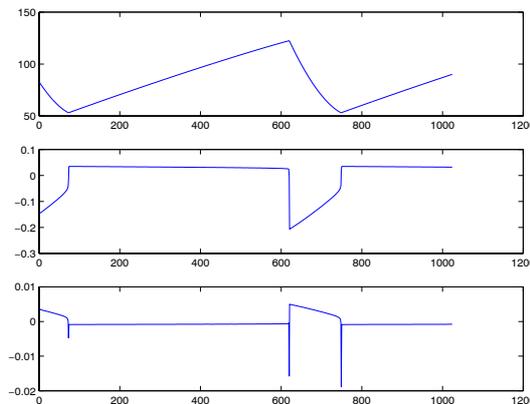


Abbildung 4.4: oben: Originalwerte der Folgevariable ξ_1 , in der Mitte berechnete Werte für die Steuervariable $\xi_2^b \approx \dot{\xi}_1$, unten Abweichung zwischen tatsächlichem ξ_2 und berechneten Werten für ξ_2^b

Um diese Operation auch in einem Zeit-Skalen Intervall ausführen zu können wird in der von (3-3.95) erzeugten Sub-Raum Struktur operiert. Auf einer festgelegten Skala wird der im W -Raum enthaltene Signal-Anteil durch die integrierende Funktion ersetzt. Da der DownSampel Operator (3-3.78) genutzt werden kann um die Signalkomponente in den W -Raum zu bringen, wird der Up-Sampel Operator eingesetzt um umgekehrt eine Funktion aus dem W -Raum in den V -Raum zu bringen. So kann eine inverse Transformation realisiert werden.

Dafür wird das gegebene und zu integrierende Signal in genau dem W_m -Sub-Raum einer gewählten Skala m eingefügt, in dem sich eigentlich das erste Differential des Signals befinden sollte und anschließend der UpSample Operator benutzt um eine Funktion im V_0 -Raum zu konstruieren. Dies ist mit ξ_2 gemacht und ein ξ_1^b synthetisiert worden.

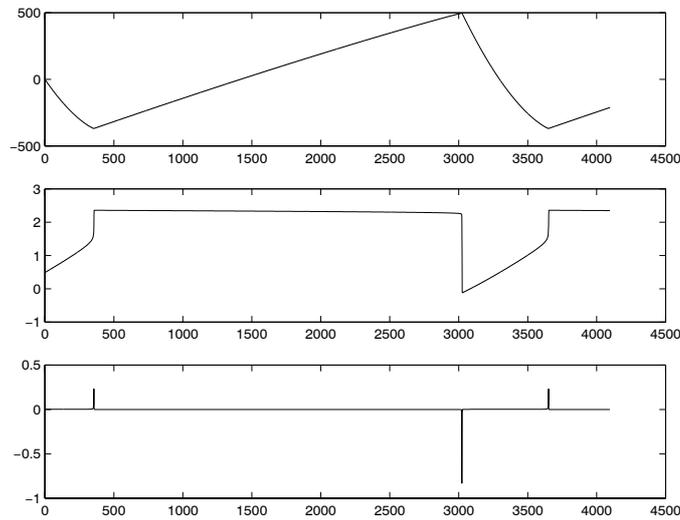


Abbildung 4.5: oben Originalwerte der Steuervariable ξ_1 ; Mitte berechnete Werte für die Folgevariable ξ_2^b , unten berechnete Werte $\dot{\xi}_2^b$

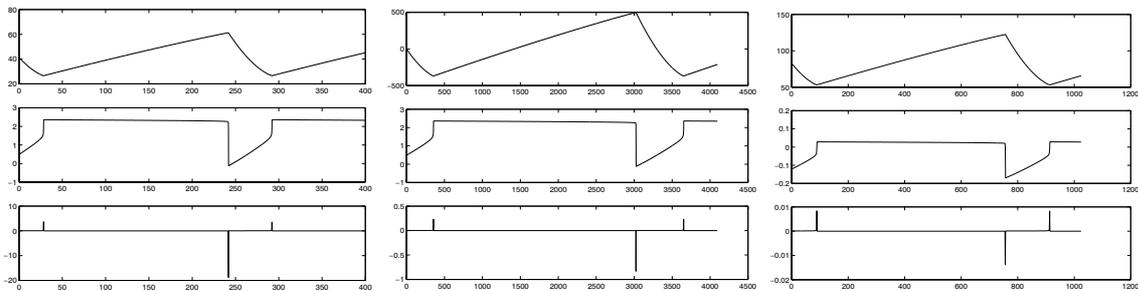


Abbildung 4.6: Vergleich der Kurvenverläufe für ξ_1 , ξ_2 und $\dot{\xi}_2$. Links Originalwerte der Lösung des Differentialgleichungssystems (4-2.1); Mitte Steuervariable ξ_1 gegeben, ξ_2 und $\dot{\xi}_2$ ermittelt; Rechts Folgevariable ξ_2 gegeben, ξ_1 und $\dot{\xi}_2$ ermittelt.

4.2.2 Phasendiagramm Vergleiche

Das Phasenportrait des Test-Systems für den differenzierenden Weg mit gegebenem ξ_1 und berechnetem $\dot{\xi}_2^b$ und dem integrierende Weg mit gegebenem ξ_2 und

berechnetem ξ_1^b in Abb. 4.7 gezeigt. Der Vergleich mit Abb. 4.2 zeigt, daß es grundsätzlich möglich ist die System-Dynamik mit den berechneten Variablen zu charakterisieren.

Es wird daher im folgenden der Versuch unternommen, die Nullklinen soweit wie möglich zu bestimmen.

Relaxationsoszillationen erlauben Näherungen für die Nullklinen $\dot{\xi}_1 = 0$ und $\dot{\xi}_2 = 0$ zu ermitteln. Dazu nimmt man an, daß sich die Gleichungen (4-2.1) folgendermaßen schreiben lassen:

$$\begin{aligned}\dot{\xi}_1 &= \alpha_1 \cdot (f_1(\xi_1) - \xi_2)^{n_1} = 0 \\ \dot{\xi}_2 &= \alpha_2 \cdot (f_2(\xi_2) - \xi_1)^{n_2} = 0\end{aligned}\tag{4-2.7}$$

Für den Fall $\dot{\xi}_1 = 0$ ist dann $\alpha_1(\xi_1, \xi_2)$ eine entweder positiv oder negativ definierte Funktion und $\xi_1 < 0$, $\xi_2 < 0$.

Die Nullklinen sind dann die Funktionen $\xi_2 = f_1(\xi_1)$ und $\xi_1 = f_2(\xi_2)$. Da im Phasendiagramm für jeden Wert ξ_1 mehrere Werte ξ_2 gefunden werden können und speziell auf z.B. dem Limit-Zyklus zu einem ξ_1 zwei ξ_2 gehören, für die gilt:

$$\begin{aligned}\dot{\xi}_{11} &= \alpha_{11} \cdot (f_1(\xi_1) - \xi_{21})^{n_{11}} = 0 \\ \dot{\xi}_{12} &= \alpha_{12} \cdot (f_1(\xi_1) - \xi_{22})^{n_{12}} = 0\end{aligned}\tag{4-2.8}$$

Aus diesem Verhältnis

$$\frac{\dot{\xi}_{12}}{\dot{\xi}_{11}} = \frac{\alpha_{12} \cdot (f_1(\xi_1) - \xi_{22})^{n_{12}}}{\alpha_{11} \cdot (f_1(\xi_1) - \xi_{21})^{n_{11}}}\tag{4-2.9}$$

erhält man unter der Annahme $\alpha_{12} = \alpha_{11}$ und $n_{11} = n_{12} = 1$ eine erste Näherung für die Nullkline $f_1(\xi_1)$.

$$f_1(\xi_1) \simeq \frac{\dot{\xi}_{12}\xi_{21} - \dot{\xi}_{11}\xi_{22}}{\dot{\xi}_{12} - \dot{\xi}_{11}}\tag{4-2.10}$$

und

$$\alpha_1(\xi_1) \simeq \frac{\dot{\xi}_{12} - \dot{\xi}_{11}}{\xi_{22} - \xi_{21}}.\tag{4-2.11}$$

Entsprechendes gilt für die Nullkline $f_2(\xi_2)$.

In Abb. 4.7 ist das Ergebnis dieser Näherung dargestellt und mit dem verglichen, das erhalten wird, wenn nur ein Meßsignal verfügbar ist und die zweite Variable über die zuvor beschriebenen Wege ermittelt worden ist. Der Verlauf der Nullklinen weicht von dem theoretischen in Abb. 4.7 ab. Dies ist darin begründet, daß die Berechnung der synthetisierten Funktion auf Operationen (Integration oder Differentiation) zurück geht, die auf einer groberen bzw. tieferen Skala oder

feineren bzw. höheren Skala der Packet-Dekomposition, ausgeführt werden kann. Wenn wie im konkreten Fall die Skala des DownSampel-Niveau 2 (– entspricht der zweifachen Anwendung des DownSampel Operators –), wird das Signal mit einer Auflösung dargestellt, die um einen relevanten Faktor kleiner ist als das Original. Deshalb stehen auf der groberen Skala weniger Meßwerte für die effektive Berechnung zur Verfügung. In kritischen Intervallen des Phasendiagramms, in den schon im Original wenige Meßwerte enthalten sind, können auf einer groberen Skala überhaupt keine Werte mehr enthalten sein.

Der Umweg über die Berechnung auf einer anderen Skala hat einen einfachen Grund. Die Ergebnisse zeigen: Ein nicht-differenzierbares Signal kann auf einer bestimmten Skala mit anderer Auflösung durchaus differenziert werden. Deshalb wird das Signal auf eine geeignete Skala transformiert, die Operation (Differentiation oder Integration) ausgeführt und das Ergebnis anschließend auf der Original-Skala synthetisiert.

4.2.3 Reaktor Sicht

Das Test-System beschreibt die Dynamik eines “continous stirred tank reactor” (CSTR). In Abschnitt 2.3.1 ist der chemische Reaktor als offenes System charakterisiert, das über den Fluß als Parameter in die Umgebung eingebunden ist. Das analysierte Signal könnte demnach zu einem Teil durch die System-Umgebung bestimmt sein, sodaß die Analyse des offenen Systems nicht möglich wäre.

Wir zeigen nun für den theoretischen Fall, daß sich der Fluß separieren läßt und nur das System einen Beitrag zu dem gemessenen Signal liefert und somit auch nur analysiert wird. Das System wird durch die Reaktorfunktion charakterisiert, die eine Fläche im Raum $\Theta(\xi_1, \xi_2)$ 4-2.2 darstellt.

Sind ξ_1 und ξ_2 sowie $\dot{\xi}_1$ und $\dot{\xi}_2$ als Lösungen des Differentialgleichungssystems (4-2.1) bekannt, so ergibt sich aus den Gleichungssystemen 4.2.1 ein lineares Gleichungssystem für die Parameter v_{in} , k und a , indem die Differenz der beiden Differentialgleichungen gebildet wird:

$$a \dot{\xi}_1 + \dot{\xi}_2 = v_{in} - k \xi_2 \quad (4-2.12)$$

oder verallgemeinert sollte zu jedem Zeitpunkt t die lineare Relation gelten:

$$b_1 \dot{\xi}_1(t) + b_2 \dot{\xi}_2(t) + b_3 \xi_1(t) + b_4 \xi_2(t) = 1 \quad (4-2.13)$$

aus denen die b_i $i = (1 \dots 4)$ bestimmt werden können. Hält man die für das mathematische Modell bestimmten Parameter b_i fest und setzt die Werte ξ_i und $\dot{\xi}_i$ mit $i = (1 \dots 2)$ für alle Zeiten ein, so läßt sich testen, wie gut Gleichung (4-2.12) erfüllt ist. Abb.4.8 zeigt, daß Gleichung (4-2.13) für das mathematische Modell sehr gut erfüllt ist. Auch die theoretischen Werte für v_{in} , k und a werden aus Gleichung (4-2.12) erhalten. Kennt man v_{in} lassen sich für die ξ_1 , ξ_2 die Werte der Reaktorfunktion Θ aus $\Theta(\xi_1, \xi_2) = \dot{\xi}_1 - v_{in}$ bestimmen. Insbesondere hat

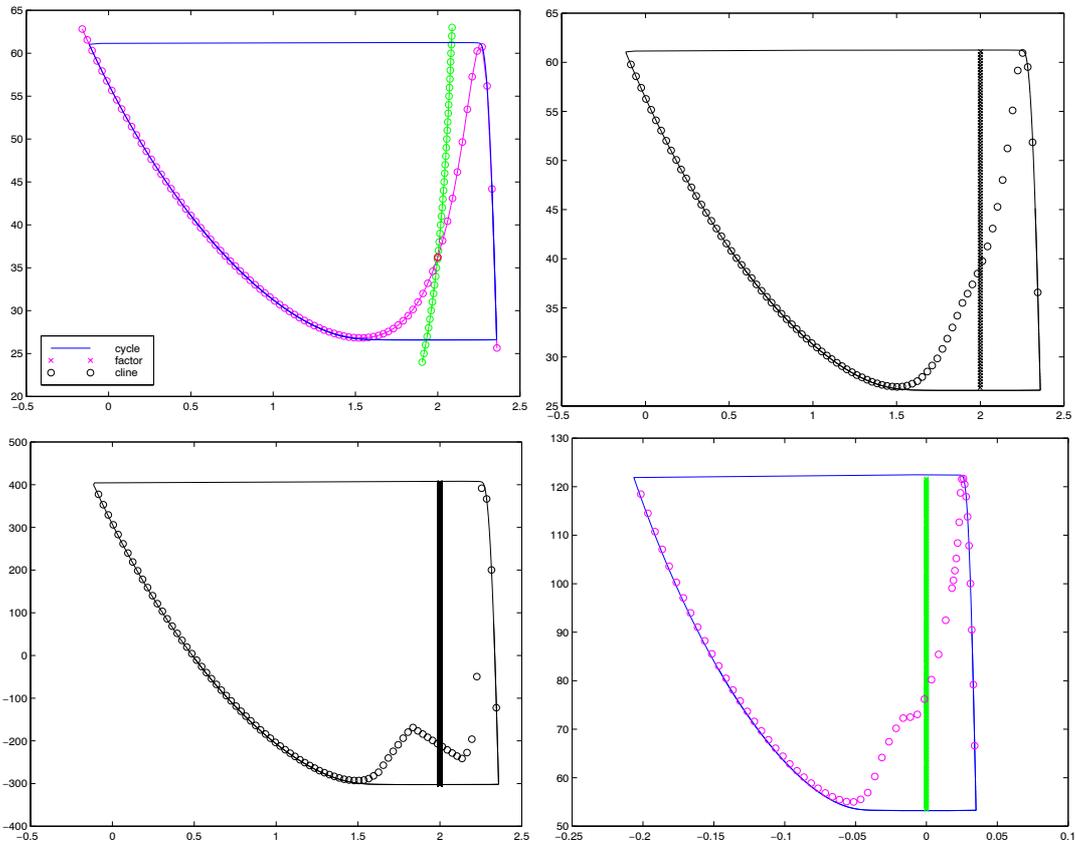


Abbildung 4.7: Phasendiagramme vom Limit-Zyklus und Nulllinien für das mathematischen Test-System. Links oben von den Original-Daten $\dot{\xi}_1 = 0$ und $\dot{\xi}_2 = 0$. Rechts oben Nulllinien ermittelt nach der Approximation 4-2.7. Unten Phasendiagramme des Limit-Zyklus ermittelt aus nur einer Variable und der Nulllinien approximiert nach 4-2.7. Links unten aus ξ_1 (integrativ), aus ξ_2 (differenziell).

die Nullkline $\dot{\xi}_1 = 0$ die Gleichung $\Theta(\xi_1, \xi_2) = -v_{in}$ und die Nullkline $\dot{\xi}_2 = 0$ die Gleichung $\Theta(\xi_1, \xi_2) = \frac{k}{a}\xi_2$. Damit stellen sich die Nullklinen nunmehr als Schnittlinienprojektion der Fläche $\Theta(\xi_1, \xi_2)$ mit den Flächen $\Theta_1 = -v_{in}$ und $\Theta_2 = \frac{k}{a}\xi_2$ auf die ξ_1, ξ_2 -Ebene dar.

Die Berechnungen zu Abb. 4.9 werden mit dem Programm **Flux** ausgeführt. Der Vergleich zwischen dem Signal Fluß und dem des Reaktors von dem der Fluß separiert wurde ist in Abb. 4.8 gezeigt.

4.3 Experimentelles Test-System

Gegenstand der Untersuchung ist hier nicht die chemische Reaktion als solches. Es wird nun vielmehr gezeigt, daß die Berechnungen für das Test-System auch

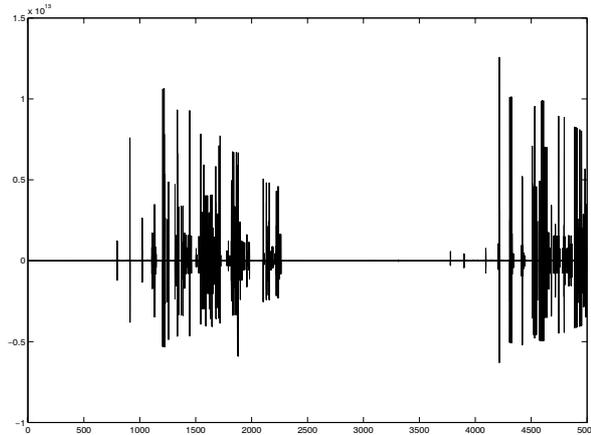


Abbildung 4.8: Abweichung der Gleichung 4-2.12 als Funktion der Zeit.

mit verrauschten Meßwerten zu äquivalenten Ergebnissen wie im mathematischen Fall führen. Es ist im Experiment ξ_1 durch Messung verfügbar und ξ_2 ist zu ermitteln. Dies entspricht dem differenzierenden Weg in Abschnitt 4.2.1. Wie oben wird die Phasendarstellung über gleiche Berechnungen konstruiert wie sie für das mathematische Test-System Anwendung fanden.

Die Berechnungen der experimentellen Zeitreihe werden nun mit dem verrauschten Meßwerten durchgeführt. Im Abschnitt 4.4 ist gezeigt, wie Rauschen im Phasenraum als Koeffizientenmenge formuliert wird. Diese Aufteilung ist auf das gewählten Maßkriterium zurückzuführen. Später wird ein Maßkriterium entwickelt um das Signal in mehrere Bestandteile zu zerlegen. Bis zu diesem Punkt bleibt die gesamte Signalinformation (– auch die mit dem Verfahren “Basis Pursuit” unter der l^1 -Norm abgetrennt werden würde –) erhalten. Denn es ist anzunehmen, daß verschiedene Maßkriterien auch zu verschiedenen Rauschspektren führen. Würden wir schon zu Beginn der Analyse einen beträchtlichen Teil der Signalinformation mit “Basis Pursuit” vernichten, wäre die Aussage der anschließenden Analyse um so fraglicher.

4.3.1 Experimentelles Modell

Dem experimentellen Test-System liegt ein chemisches Experiment zugrunde. In diesem Experiment können die Konzentrationen der Systemvariablen ξ_P (Konzentrationen von Ce^{4+} photometrisch) und ξ_E (Konzentration von Br^- als Elektrodenpotential) gemessen werden.

Die Messung ergibt für ξ_P und ξ_E den Verlauf von Abb. 4.10.

Die Umgebung der singulären Punktes mit der Lösungs-Schar, die auf den Grenz-Zyklus zulauft ist in Abb. 4.11 gezeigt.

Die Kurvenform der gemessenen Systemvariablen ist der des theoretischen

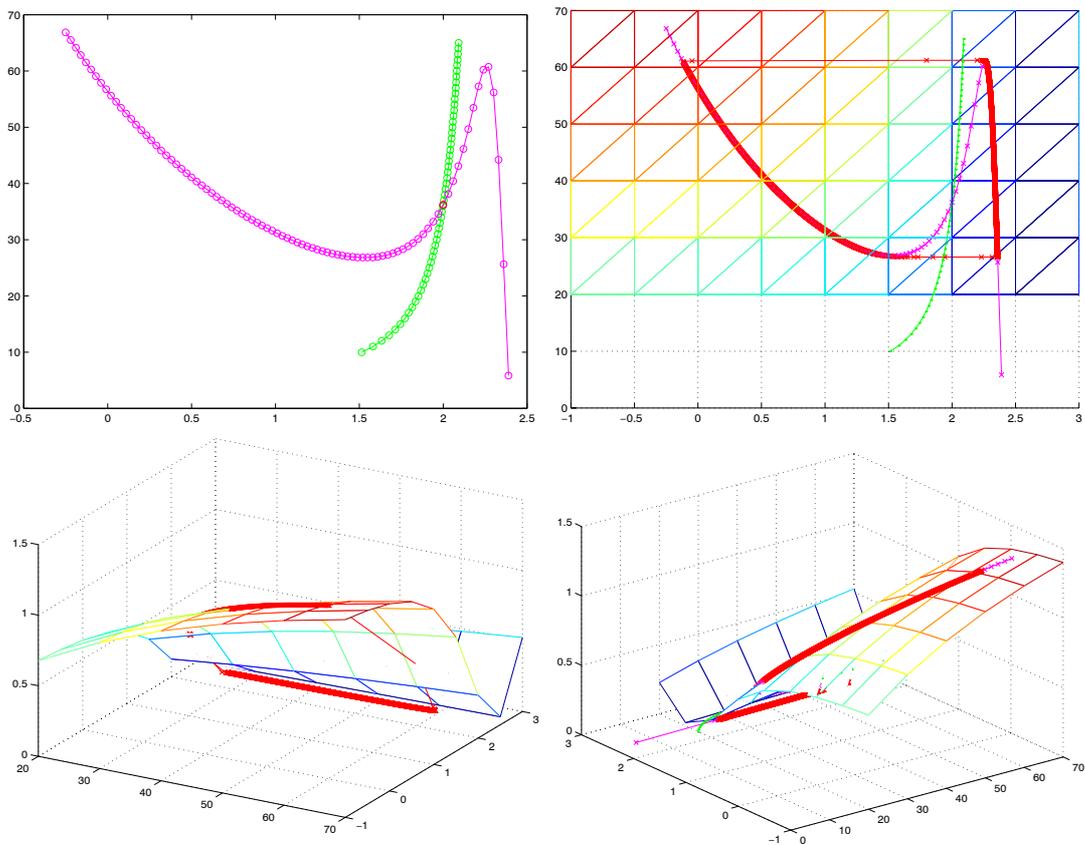


Abbildung 4.9: Reaktorfunktion $\Theta(\xi_1, \xi_2)$ und Nulllinien des mathematischen Test-Systems. Link oben: Berechnete Nulllinien. Rechts oben: Draufsicht auf die dreidimensionale Fläche der Reaktorfunktion. Limit-Zyklus und Nulllinien die in dieser Fläche liegen sind eingezeichnet. Links unten: Reaktorfunktion mit eingezeichnetem Limit-Zyklus (rot). Recht unten: Reaktorfunktion mit eingezeichnetem Limit-Zyklus (rot) und Nulllinien (wie links oben magenta und grün)

Modells qualitativ ähnlich, die charakteristischen Ausprägungen z.B. der Schaltstellen der Steuervariablen lassen sich erkennen. Werden die Variablen in einem Phasendiagramm gegeneinander aufgetragen, so erhält man die experimentell bestimmte Lösung-Schar der Abb. 4.11, in der Nulllinien unschwer durch Verbindungen der Trajektorienpunkte an denen $\xi_E = 0$ bzw. $\xi_P = 0$ ist, zu finden sind. Der Fall, daß die Folgevariable gemessen wurde, wird in den Abschnitten 4.3.5 für eine höher aufgelöste Meßreihe als in Abb. 4.13 detailliert behandelt als in Abb. 4.10.

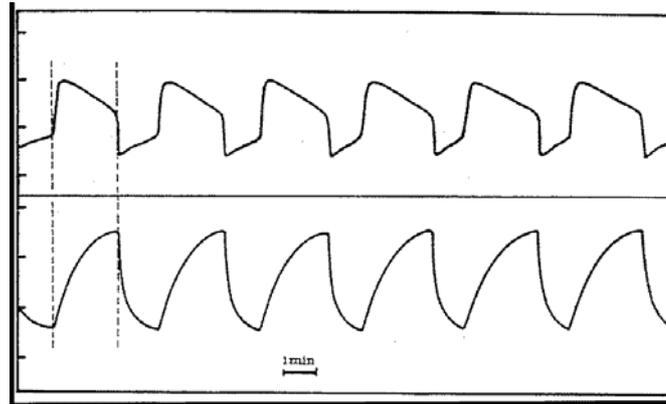


Abbildung 4.10: Experimentell bestimmte Konzentrationen von ξ_E (Konzentration von Br^- (oben) und Ce^{4+} photometrisch [Gei74]) (unten)

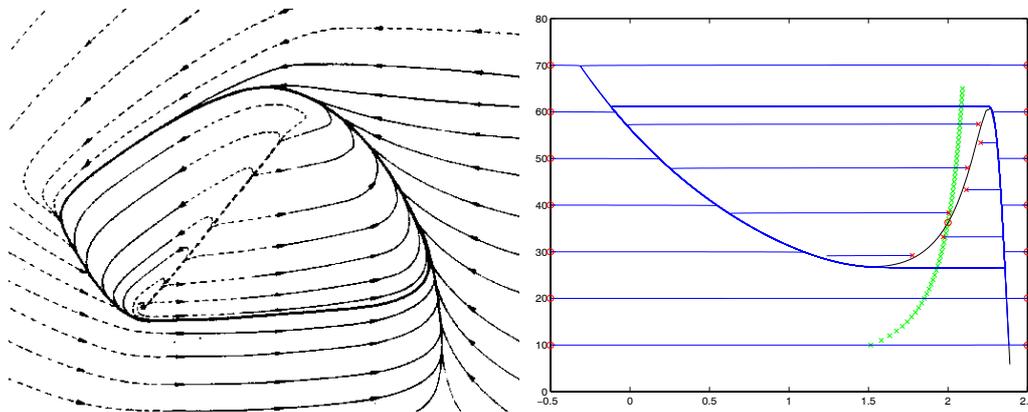


Abbildung 4.11: Phasendiagramme des experimentellen Modellsystems [Gei74]. (Links) Dargestellt ist das Photometersignal von Ce^{4+} gegen das Elektrodenpotential an einer Br^- -anzeigende Silberelektrode. (Rechts) mathematisches Modellsystem dargestellt sind die Variablen ξ_1 und ξ_2 der Differentialgleichung (4-2.1). In beiden Fällen ist der Limit-Zyklus als geschlossene Bahnkurve zu erkennen.

4.3.2 Differential eines kontinuierlichen Signals: Kommutator-Relation

Die Multiresolution Analyse kann nicht nur ein Signal approximieren, sondern auch dessen Ableitungen [Chu92]. In diesem Abschnitt zeigen wir wie eine Differentialgleichung konstruiert wird, die das Signal als Lösung besitzt. Außerdem wird die Packet-Zerlegung benutzt um das Signal mit einem Satz aus Taylor-Polynomen zu approximieren. Dabei kommt eine zentrale Eigenschaft zur An-

wendung. Unter bestimmten Umständen approximieren Packets von (3-3.103) das Differential des Signals. Exemplarisch analysieren wir die Wirkungsweise von (3-3.103) für den einfachsten Fall.

Sei f ein Signal welches in n äquidistanten Zeitintervallen t_i gemessen ist und Meßwerte $f_i, i = 1 \dots n$ liefert. Dann kann das Signal approximiert werden durch:

$$f(t) = \sum_{i=1}^n f_i \Phi_i(t) \quad (4-3.14)$$

wobei die Funktionen

$$\Phi_{i0}(t) = \begin{cases} 1 & \text{für } (t_i - \frac{\Delta t}{2}) < t \leq (t_i + \frac{\Delta t}{2}) \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad \text{und} \quad \Delta t = \frac{(t_{i+1} - t_i)}{2}$$

der Skalenfunktionen (3-3.47) im einfachsten Fall entspricht. Das Signal kann wie mit (3-3.87) nun in zwei additive Terme zerlegt werden,

$$f(t) = \sum_{i=1}^{\frac{n}{2}} \left\{ \frac{f_{2i-1} + f_{2i}}{2} \Phi_{i1}(t) \right\} + \sum_{i=1}^{\frac{n}{2}} \left\{ \frac{f_{2i} - f_{2i-1}}{2} \psi_{i1}(t) \right\} \quad (4-3.15)$$

$$\text{wobei } n \text{ is eine natürliche Zahl ist} \quad (4-3.16)$$

wobei der erste der Mittelwert über jeweils zwei sukzessive Meßwerte und der zweite aus der Differenz beider Werte besteht. Die neuen Funktionen entsprechen (3-3.47) und (3-3.86):

$$\phi_{i,1} = \phi_{2i-1,0} + \phi_{2i,0} \quad \psi_{i,1} = -\phi_{2i-1,0} + \phi_{2i,0} \quad (4-3.17)$$

Die Funktion ψ separiert Details von dem Signal ab. Die Koeffizienten im Detail-Term approximieren das Differential nach t des Signals um so besser, je kleiner das Messintervall Δt gewählt ist (siehe auch (3-1.27)):

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left(\frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta t} \right)_{f_i} \rightarrow \frac{df}{dt} \quad (4-3.18)$$

Dabei ist vorausgesetzt, das die Ableitung existiert. Gleichung (4-3.18) ist nicht notwendigerweise gültig wenn die Werte f_i Rauschen darstellen. Dennoch bleibt Gleichung (4-3.15) mit der mittelnden bzw. differenzierenden Operation auch für verrauschte Meßwerte gültig (– vergleiche (3-3.59) und (3-3.81) –).

Das Verfahren wird rekursiv auf die gemittelten und differenzierten Teile angewendet womit sich das Signal wie folgt formuliert:

$$\begin{aligned}
f(t) = & \sum_{i=1}^{\frac{n}{4}} \frac{1}{2} \left(\frac{f_{i-3} + f_{i-2}}{2} + \frac{f_{i-1} + f_i}{2} \right) \phi_{2i}(t) + \sum_{i=1}^{\frac{n}{4}} \frac{1}{2} \left(\frac{f_{i-3} + f_{i-2}}{2} - \frac{f_{i-1} + f_i}{2} \right) \psi_{i2}^1(t) \\
& + \sum_{i=1}^{\frac{n}{4}} \frac{1}{2} \left(\frac{f_{i-3} - f_{i-2}}{2} + \frac{f_{i-1} - f_i}{2} \right) \psi_{i2}^2(t) + \sum_{i=1}^{\frac{n}{4}} \frac{1}{2} \left(\frac{f_{i-3} - f_{i-2}}{2} - \frac{f_{i-1} - f_i}{2} \right) \psi_{i2}^3(t)
\end{aligned} \tag{4-3.19}$$

wobei $n = 4 \cdot m$ und m eine positive Zahl. Außerdem gilt:

$$\phi_{i2} = \phi_{2i-1,1} + \phi_{i,1} \quad (4-3.20) \quad \psi_{i2}^1 = -\phi_{2i-1,1} + \phi_{i,1} \quad (4-3.22)$$

$$\psi_{i2}^2 = \psi_{2i-1,1} + \psi_{i,1} \quad (4-3.21) \quad \psi_{i2}^3 = -\psi_{2i-1,1} + \psi_{i,1} \quad (4-3.23)$$

Wir führen hier explizit einen mittelnden Operator \hat{a} und einen differenzierenden Operator \hat{d} ein. Diese können sich in ihren Eigenschaften von den Laurent-Polynomen $h(T)$ und $g(T)$ unterscheiden. Die Koeffizienten in der obigen Summe werden durch diese Operationen generiert.

$$f(t) = \sum_{i=1}^{\frac{n}{4}} (\hat{a} \cdot \hat{a}) f_i \cdot \phi_{i2}(t) + \sum_{i=1}^{\frac{n}{4}} (\hat{d} \cdot \hat{a}) f_i \cdot \psi_{i2}^1(t) \tag{4-3.24}$$

$$+ \sum_{i=1}^{\frac{n}{4}} (\hat{a} \cdot \hat{d}) f_i \cdot \psi_{i2}^2(t) + \sum_{i=1}^{\frac{n}{4}} (\hat{d} \cdot \hat{d}) f_i \cdot \psi_{i2}^3(t) \tag{4-3.25}$$

Nun gibt es in Gleichung (4-3.18) zwei Möglichkeiten Approximationen der Ableitung von f zu erhalten. Einmal indem die mittelnde Operation auf die differenzierende ($\hat{d} \cdot \hat{a}$), und einandermal in umgekehrter Reihenfolge die differenzierende auf die mittelnde Operation ($\hat{a} \cdot \hat{d}$) angewendet wird. Der Unterschied zwischen dem zweiten und dritten Term in (4-3.19) gibt:

$$(\hat{d} \cdot \hat{a}) f_{4i} - (\hat{a} \cdot \hat{d}) f_{4i} = f_{4i-2} - f_{4i-1} \tag{4-3.26}$$

$$\text{wobei } i = 1..m \tag{4-3.27}$$

In (4-3.19) sind die neuen Koeffizienten immer aus vier aufeinander folgenden Werten f_i berechnet. Der Einfachheit halber seien die ersten vier Werte t_i , ($i = 1..4$) verwandt. Für die differenzierende und mittelnde Operation in 4-3.26 ergibt sich für die korrespondierenden Intervalle aus (4-3.19). In Abb. 4.12 ist dies veranschaulicht.

$$\frac{\hat{a} \cdot \hat{d}}{\Delta t} = \frac{1}{2} \frac{f_4 - f_3}{t_4 - t_3} + \frac{1}{2} \frac{f_2 - f_1}{t_2 - t_1} = \frac{1}{2} \left(\frac{f_4 - f_3}{\Delta t} + \frac{f_2 - f_1}{\Delta t} \right) \quad (4-3.28)$$

$$\frac{\hat{d} \cdot \hat{a}}{2\Delta t} = \frac{\frac{f_4 + f_3}{2} - \frac{f_2 + f_1}{2}}{\frac{t_4 + t_3}{2} - \frac{t_2 + t_1}{2}} = \frac{1}{2} \left(\frac{f_4 - f_2}{2\Delta t} + \frac{f_3 - f_1}{2\Delta t} \right) \quad (4-3.29)$$

$$\frac{f_3 - f_2}{t_3 - t_2} = \frac{f_3 - f_2}{\Delta t} \quad (4-3.30)$$

Für den Grenzwert $\Delta t \rightarrow 0$ gehen die Gleichungen (4-3.28) – (4-3.30) in das Differential nach t im Intervall t_1 bis t_4 über. Für Gleichung 4-3.26 lautet der Grenzwert $\Delta t \rightarrow 0$:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left(\frac{\hat{d} \cdot \hat{a}}{2\Delta t} f_i - \frac{\hat{a} \cdot \hat{d}}{\Delta t} f_i = \frac{\Delta f_i}{\Delta t} \right) \rightarrow \left(2 \frac{df}{dt} \right) \Big|_{f_i} - \frac{df}{dt} \Big|_{f_i} = \frac{df}{dt} \Big|_{f_i} \quad (4-3.31)$$

oder wenn $f_3 - f_2$ als differenzierende Operation betrachtet wird, die im Index um eins verschoben ist, lautet der Grenzwert:

$$\hat{d} \cdot \hat{a} - \hat{a} \cdot \hat{d} = \hat{d} \quad (4-3.32)$$

Diese Tatsache kann so interpretiert werden, daß \hat{a} invariant gegen \hat{d} ist.

Die Anwendung der differenzierenden und mittelnden Operation auf die Koeffizienten von (4-3.19) erzeugt die nächsthöhere Ordnung des Signals auf einer groberen Skala. Deshalb ergeben die Ausdrücke für mehrfaches mitteln und differenzieren:

$$\hat{d} \cdot \hat{a} \cdot \hat{d} \cdot \hat{a} \quad (4-3.33)$$

Durch Einsetzen von (4-3.24) in (4-3.33) und Umformen wird die mittelnde Operation nach links geschoben.

$$\hat{d} \cdot \hat{a} \cdot \hat{d} \cdot \hat{a} = (\hat{a} \cdot \hat{d} + \hat{d}) \cdot (\hat{a} \cdot \hat{d} + \hat{d}) \quad (4-3.34)$$

erhält man nach einigen Schritten:

$$= (\hat{a} \cdot \hat{a} + 3 \cdot \hat{a} + 2) \cdot \hat{d} \cdot \hat{d} \quad (4-3.35)$$

Für den Grenzwert $\Delta t \rightarrow 0$ (einer infinitesimal dichten Zeitreihe) reduziert sich die mittelnde Operation zu einer Konstante k .

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left(\frac{\hat{d} \cdot \hat{a} \cdot \hat{d} \cdot \hat{a}}{\Delta t \cdot \Delta t} \right) = k \cdot \frac{d}{dt} \left(\frac{d}{dt} \right) \quad (4-3.36)$$

Entsprechendes gilt für andere Ausdrücke. Dies führt auf die

Aussage (I)

Sei der eindeutige Grenzwert für $\Delta t \rightarrow 0$ von einer Sequenz aus differenzierenden und mittelnden Operationen auf gleichmäßig dicht verteilten Werten in der Zeit t existent. Dann ist der Grenzwert Proportional zu dem Differentialquotient n -ter Ordnung im dem Intervall, auf den die Sequenz aus differenzierenden und mittelnden Operationen wirkt. Dabei ist n die Zahl der differenzierenden Operationen in der Sequenz.

Die Aussage (I) kann durch Integration des Beispiels in (4-3.19) bis (4-3.36) verifiziert werden.

Da bei der Entwicklung einer Funktion in eine Potenzreihe (Taylor-Reihe) deren Koeffizienten aus den Ableitungen an der Entwicklungsstelle gebildet werden, können Approximationen der Koeffizienten aus den Differentialoperationen des Signals erhalten werden.

In einem Intervall, in dem eine mittelnde Operation \hat{a} und eine differenzierende Operation \hat{d} vereint wird, lautet die Taylor-Reihe

$$y = y_m + y_m^{(1)} \cdot (t - t_m) \quad \text{bei} \quad t_m = \frac{(t_{2i} - t_{2i-1})}{2} \quad (4-3.37)$$

hat die Koeffizienten:

$$y_m = \hat{a}f_i = \frac{(f_{2i} + f_{2i-1})}{2} \quad \text{und} \quad y_m^{(1)} = \hat{d}f_i = \frac{(f_{2i} - f_{2i-1})}{\Delta t}$$

wobei $i = 1, 2, \dots, \frac{n}{2}$

Bei einer Potenz von zwei ergibt sich das Polynom zu

$$y = y_m + y_m^{(1)}(t - t_m) + \frac{y_m^{(2)}}{2!}(t - t_m)^2 + \varepsilon(t) \quad (4-3.38)$$

wobei $\varepsilon(t)$ is the residual term

Die mittelnden und differenzierenden Operationen erzeugen die Koeffizienten (– siehe (4-3.28), (4-3.29) und (4-3.35) –) für $\hat{a}\hat{d}$, $\hat{d}\hat{a}$ und $\hat{d}\hat{d}$ und entsprechend das arithmetische Mittel $(\hat{a}\hat{a}) \cdot f$. Dabei ist im letzteren Fall y_m und $y_m^{(2)}$ eindeutig definiert. Es gibt zwei Möglichkeiten $y_m^{(1)}$ zu approximieren, mit $\hat{d}\hat{a}$ und mit $\hat{a}\hat{d}$.

Also liefert (4-3.30) (– oder generell (4-3.32) –) $y_m^{(1)}$, was die bessere Approximation von $y_m^{(1)}$ sein dürfte, da die Ableitung zwischen t_2 und t_3 bei einem kleineren Abstand zu t_m bewertet wird (siehe Abb. 4.12) und Gleichungen (4-3.28) bis (4-3.30).

Dies weist Gleichung (4-3.32) eine zusätzliche Bedeutung zu, weil $\hat{a}\hat{d} - \hat{d}\hat{a}$ eine gute Approximation von $y_m^{(1)}$ ist. Wenn die Taylor-Reihe zu höheren Ordnungen erweitert wird, wächst die Überbewertung der Koeffizienten von mittelnden und

differenzierenden Operationen mit wachsender Ordnung der DownSample Operationen.

Eine Fehlerabschätzung des Term $\varepsilon(t)$ erhält man indem bei t die Differenz zwischen y (4-3.38) und dem Signalwert f bestimmt wird, also zwischen t_1 und t_4 in dem Schema von Abb. 4.12.

Im dem Grenzwert, bei dem $\hat{a}\hat{d}$, $\hat{d}\hat{a}$ und \hat{d} alle proportional zu dem Differentialquotient sind sollte $\varepsilon(t)$ vernachlässigbar klein werden.

Wählt man eine nicht normalisierte Basis z.B. indem ψ_{i2}^1 in (4-3.24) durch $2 * \psi_{i2}^1$ ersetzt wird, bekommt man für (4-3.32) eine Berechnungs-Vorschrift $\hat{d} \cdot \hat{a} - \hat{a} \cdot \hat{d} = 0$.

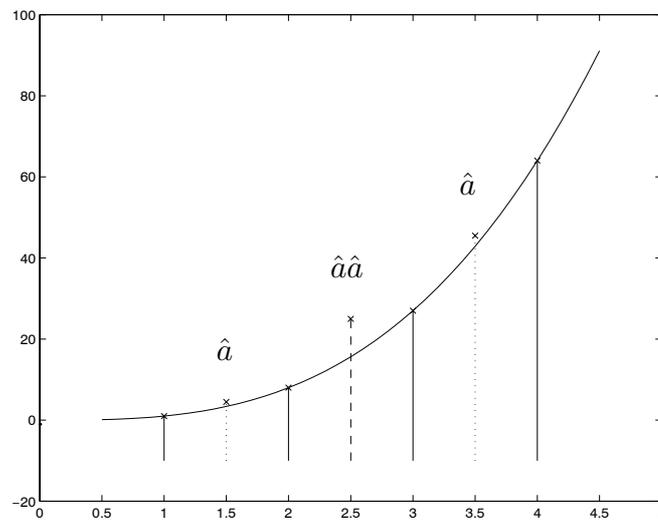


Abbildung 4.12: Schema für die Approximation eines Signals durch eine Potenzreihe von wachsender Ordnung. Gezeigt sind vier aufeinanderfolgende Werte des Signals bei t_1 bis t_4 und als gestrichelte Linie die Werte die durch die mittlere Operation \hat{a} und $\hat{a}\hat{a}$ zu den korrespondierenden Werten t .

4.3.3 Multi-resolution Analysis (MRA) mit Haar Wavelets als Basis

Wie oben eingeführt zerlegt die Multiresolution Analyse das Signal f in ein herunter skaliertes Signal und ein separiertes Detail (– siehe (4-3.15) und 3-3.94)) d.h.

$$f = (\hat{a} + \hat{d})f = \hat{a} \cdot f + \hat{d} \cdot f \quad (4-3.39)$$

wobei die Operationen \hat{a} und \hat{d} im vorhergehenden Abschnitt definiert sind. Die wiederholte Anwendung führt auf (– vergleiche (3-3.102) –)

$$\begin{aligned}
f &= (\hat{a} + \hat{d}) \cdot \hat{a} \cdot f + (\hat{a} + \hat{d}) \cdot \hat{d} \cdot f \\
&= (\hat{a} \cdot \hat{a} + \hat{d} \cdot \hat{a} + \hat{a} \cdot \hat{d} + \hat{d} \cdot \hat{d}) \cdot f
\end{aligned} \tag{4-3.40}$$

Diese Prozedur kann solange wiederholt werden, bis alle Daten von f aufgebraucht sind. Für die dritte Rekursion ergibt sich z.B.

$$\begin{aligned}
f &= (\hat{a} \cdot \hat{a} \cdot \hat{a} + \hat{a} \cdot \hat{a} \cdot \hat{d} + \hat{a} \cdot \hat{d} \cdot \hat{a} + \hat{d} \cdot \hat{d} \cdot \hat{a} + \dots \\
&\quad + \hat{a} \cdot \hat{a} \cdot \hat{d} + \hat{d} \cdot \hat{a} \cdot \hat{d} + \hat{a} \cdot \hat{d} \cdot \hat{d} + \hat{d} \cdot \hat{d} \cdot \hat{d}) \cdot f
\end{aligned} \tag{4-3.41}$$

Die Aussage(I) auf das so zerlegte Signal angewendet ergibt:

1. das gemittelte DownSampel Signal
 $(\hat{a} \cdot \hat{a} \cdot \hat{a}) \cdot f$
2. Details mit einem Differentialquotient erster Ordnung als Grenzwert
 $(\hat{a} \cdot \hat{a} \cdot \hat{d} + \hat{a} \cdot \hat{d} \cdot \hat{a} + \hat{a} \cdot \hat{a} \cdot \hat{d}) \cdot f$
3. Details mit einem Differentialquotient zweiter Ordnung als Grenzwert
 $(\hat{d} \cdot \hat{d} \cdot \hat{a} + \hat{d} \cdot \hat{a} \cdot \hat{d} + \hat{a} \cdot \hat{d} \cdot \hat{d}) \cdot f$
4. Details mit einem Differentialquotient dritter Ordnung als Grenzwert
 $(\hat{d} \cdot \hat{d} \cdot \hat{d}) \cdot f$

Aussage (I) fordert für die Details in (2): Im Grenzwert $\Delta t \rightarrow 0$ sollten sie zueinander proportional sein und auch zu dem ersten Differentialquotienten des Signals, wenn die Meßpunkte ausreichend dicht liegen.

$$(\hat{a} \cdot \hat{a} \cdot \hat{d}) \cdot f \simeq k_1(\hat{a} \cdot \hat{d} \cdot \hat{a}) \cdot f \simeq k_2(\hat{a} \cdot \hat{a} \cdot \hat{d}) \cdot f \simeq k_d \cdot \frac{df}{dt} \tag{4-3.42}$$

wobei k_i Proportionalitätsfaktoren sind

Das gleiche gilt für die Differentialquotienten zweiter Ordnung d.h.

$$(\hat{d} \cdot \hat{d} \cdot \hat{a}) \cdot f \simeq k_3(\hat{d} \cdot \hat{a} \cdot \hat{d}) \cdot f \simeq k_4(\hat{a} \cdot \hat{d} \cdot \hat{d}) \cdot f \simeq k_{dd} \cdot \frac{d}{dt} \left(\frac{df}{dt} \right) \tag{4-3.43}$$

Jedes DownSampel Niveau des Signals zeigt Approximationen seiner Ableitungen in Abhängigkeit von den Meßdaten und der Skala. Ein Detail der Zerlegung, auch als Packet bezeichnet, kann durch die generierende Sequenz aus mittelnden und differenzierenden Operationen identifiziert werden. In (4-3.41) ist $\hat{a}\hat{a}\hat{d}$ der Name des Packets $(\hat{a}\hat{a}\hat{d}) \cdot f$.

4.3.4 Differential-Gleichungs-System mit der MRA konstruiert

Da die Details der MRA als Approximationen der Ableitungen des Signals f betrachtet werden, kann ein Differentialgleichungssystem konstruiert werden für welches das Signal eine Lösung ist.

$$\mathcal{F}(f, \partial_s, \partial_s^2, \partial_s^3, \dots, \partial_s^m) = 0 \quad (4-3.44)$$

wobei \mathcal{F} eine Funktion ist und ∂_s^m die Ableitung der Ordnung m von f nach der Zeit t (bzw. nach der Mess-Reihenfolge) sind. Die Differentialgleichung (4-3.44) der Ordnung m kann in ein System von Differentialgleichungen niedrigerer Ordnung überführt werden. Dabei ist die Funktion F auf das Intervall der DownSampel-Niveau beschränkt.

$$\begin{aligned} \partial_s &= s_1 \\ \partial_{s_1} &= s_2 \\ &\vdots \\ \partial_{s_{m-2}} &= s_{m-1} \\ \partial_s^m &= \mathcal{S}(f, s_1, s_2, \dots, s_{m-1}) \end{aligned} \quad (4-3.45)$$

wobei die Funktion f aus Gleichung (4-3.44) durch auflösen nach ∂_s^m erhalten wird. ∂_{s_j} ist die Ableitung von s_j nach der Zeit.

Das Signal f definiert eine Kurve in einem Hyper-Raum, der durch s_i und f aufgespannt wird. Dabei liegt das Signal auf in einer Hyperebene \mathcal{S} dieses Raumes. Die Kurve ist nur auf dieser Ebene \mathcal{S} durch die Punkte (Ableitungen) $\{f_i\}$ bei jedem t_i definiert. Abgesehen von dieser Bedingung kann \mathcal{S} frei gewählt werden. Die Hyperebene f (4-3.45) kann nun ihrerseits durch *frames* in einem $m + 1$ dimensionalen Raum approximiert werden, wobei die Werte der Funktion \mathcal{S} Koeffizienten der *frames* 3-3.86 sind.

4.3.5 Experimentelle Überprüfung der Analyse

Um die obige Analyse zu verifizieren wird die Methode auf das Signal aus Abb. 4.13 angewendet.

Die Zerlegung des Signals wird für alle DownSampel-Niveaus und alle möglichen Sequenzen aus den Operationen \hat{a} und \hat{d} berechnet.

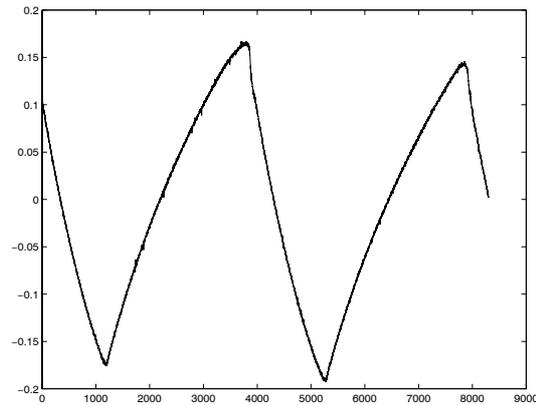


Abbildung 4.13: Spektralphotometrische Messung der Konzentration des gelben Ions Ce^{4+} über die Zeit von einem chemischen Reaktion das nicht-lineare Oszillationen zeigt. Die Messung wird als Test-Signal für die Analyse. Die Messung ist durch ein Voltmeter digitalisiert, das eine Empfindlichkeit von $\pm 0,1$ mV auf einem Skalenbereich von ± 200 mV hat. Das Signal ist zumindest auf dieser Skala verrauscht.

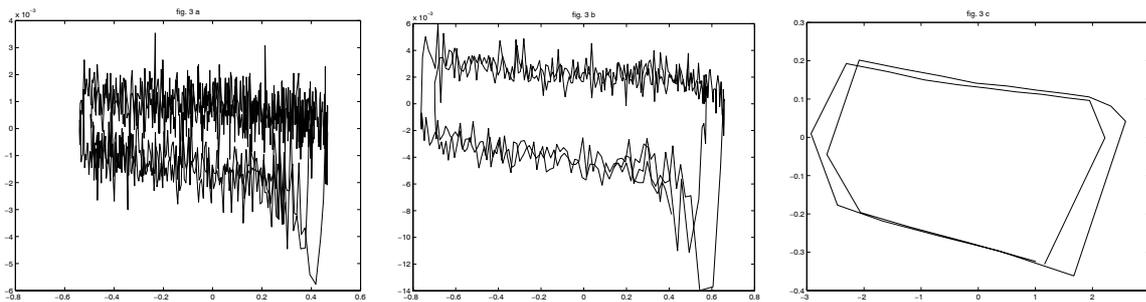


Abbildung 4.14: Phasen-Portrait von verschiedenen Niveaus (3,4 und 8) des DownSampels in der Multiresolution Analyse. Das gemittelte Signal f horizontal gegen das gemittelte Signal auf der vertikalen Achse, auf das die differenzierende Operation einmal angewendet wurde. Auf dem DownSampel-Niveau 8 (rechtes Bild), ist das Rauschen so weit gefiltert das der Limit-Zyklus als geschlossene Kurve sichtbar wird.

In Abb. 4.14 ist ein Phasen-Portrait von Ausgesuchten Skalen gezeigt, die Wirkung Rauschen auf die Operation \hat{d} hat. Beginnend mit dem Niveau fünf approximiert \hat{d} den Differential-Quotient von f nach t . Auf Niveaus die größer als neun sind werden die Intervalle zu breit, sodaß keine brauchbaren Approximationen entstehen. Deshalb wird erwartet, daß die Aussage (I) nur in einem Skalenbereich gilt wo die Approximation der Differentialquotienten brauchbar ist.

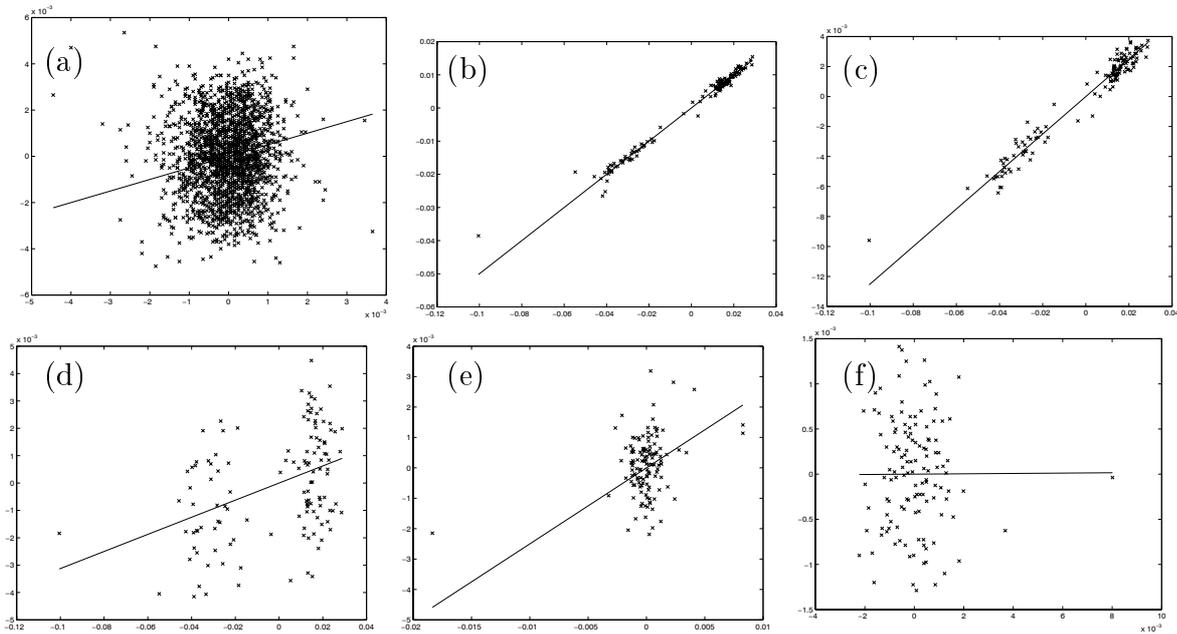


Abbildung 4.15: Prüfung der Aussage (I) auf dem DownSampel-Niveau 2 und 8, daß die mittelnnde Operation \hat{a} die differenzierende Operation \hat{d} invariant läßt. Auf DownSampel-Niveau 2 ist die Aussage (I) wegen Rauschen nicht gültig, wohingegen sie auf Niveau 8 recht gut erfüllt ist. Die durchgezogene Linie repräsentiert die zu erwartende theoretische Kurve für das experimentelle Signal. In Bild (a) sind die Packets $\hat{a}\hat{d}$ gegen $\hat{d}\hat{a}$ gezeichnet, in Bild (b) $\hat{a}\hat{d}\hat{a}\hat{d}\hat{a}\hat{d}\hat{a}\hat{d}$, in Bild (c) $\hat{a}\hat{d}\hat{a}\hat{d}\hat{a}\hat{d}\hat{a}\hat{d}$, in Bild (d) $\hat{a}\hat{d}\hat{a}\hat{d}\hat{a}\hat{d}\hat{a}\hat{d}$ gegen $\hat{d}\hat{a}\hat{d}\hat{a}\hat{d}\hat{a}\hat{d}$. In Bild (e) $\hat{a}\hat{d}\hat{a}\hat{d}\hat{a}\hat{d}\hat{a}\hat{d}$ gegen $\hat{d}\hat{d}\hat{a}\hat{d}\hat{a}\hat{d}\hat{a}\hat{d}$ und in Bild (f) $\hat{a}\hat{d}\hat{a}\hat{d}\hat{a}\hat{d}\hat{a}\hat{d}$ gegen $\hat{d}\hat{d}\hat{d}\hat{a}\hat{d}\hat{a}\hat{d}\hat{a}\hat{d}$

In Abb. 4.15 ist eine Auswahl von Packets gegeneinander aufgetragen. Sie sind jeweils von der gleichen Ordnung der Differentialoperation \hat{d}_m . Auf dem Niveau 2, auf dem Operationen gleicher Ordnung zum ersten mal mehrfach auftreten, ist das Signal zu verrauscht um ein Differentialquotienten zu approximieren 4.15(a). Auf Niveau 8 (b bis b) gibt es eine gute Korrelation zwischen den unterschiedlichen Packets erster Ordnung je nachdem an welcher Stelle \hat{d} auf \hat{a} wirkt. Je eher \hat{d} ausgeführt wird, desto stärker sind die Punkte gestreut.

Erwiesener maßen hängt die Korrelation von der Art des Rauschens ab. In Abb. 4.15(e) und (f) sind die Beziehungen für die Differentialkoeffizienten zweiter und dritter Ordnung gezeigt. Da diese Ableitungen nur noch aus wenigen peaks bestehen und meistens nahe Null sind wird nicht erwartet einen Korrelation zu erhalten, denn ihr Verhalten ist in der Nähe der Peaks sehr kritisch.

Wie erwartet wird die Korrelation der Packets um so schwächer je mehr \hat{d} Operationen beteiligt sind (vergleiche 4.15(d) bis (f)). Die durchgezogenen Gerade gibt die theoretische Beziehung zwischen den Packets gleicher Differentialordnung an. Für einige Packets ist diese Beziehung selbst mit den experimentellen

Meßwerten gut erfüllt. Die Güte der realisierten Beziehung (verglichen mit dem theoretischen soll) kann als Maß für die Güte der Approximation des korrespondierenden Differentialquotienten genutzt werden. Sollte die theoretische Beziehung in einem Zeitintervall durch Meßwerte erfüllt sein, dann kommutieren die Operationen \hat{a} und \hat{d} und stellen eine bestimmte Beziehung zwischen den *frames* her. Diese Kommutator-Bedingung richtet die *frames* zueinander aus.

Das Signal kann aus einem Satz spezifisch ausgewählter Packets oder durch alle Packets eines Niveaus synthetisiert werden. Das erlaubt uns das Spektrum in Form der Packets zu manipulieren und das Signal anschließend zu synthetisieren. In diesem Fall werden wir erzwingen, daß alle Packets der gleichen Differentialordnung die Kommutator-Bedingung (4-3.32) erfüllen. Die Packets würden die theoretische Beziehung in 4.15 realisieren und sich damit den Differentialquotienten nähern. Dies kann erzwungen werden, indem wie in Abb. 4.15 die Packetkoeffizienten derart manipuliert werden, das die Punktwolken in (b) bis (d) auf die Gerade rücken.

Diese Behandlung lassen wir z.B. in Abb. 4.15 jeweils den Packets

$$\hat{a}\hat{d}\hat{a}\hat{a}\hat{a}\hat{a}\hat{a}\hat{a}, \hat{a}\hat{a}\hat{d}\hat{a}\hat{a}\hat{a}\hat{a}\hat{a}\hat{a} \text{ und } \hat{a}\hat{a}\hat{a}\hat{a}\hat{d}\hat{a}\hat{a}\hat{a} \text{ etc.} \quad (4-3.46)$$

mit der gleichen Anzahl differenzierender Schritte zukommen. Dann sollte Aussage (I) erfüllt sein. Trotzdem muß die Abzisse noch definiert werden. Man kann wie in Abb. 4.15 ein Packet $\hat{d}\hat{a}\hat{a}\hat{a}\hat{a}\hat{a}\hat{a}\hat{a}$ als Abzisse wählen. Es ist auch möglich andere Vergleiche zu wählen z.B mit einem gewichteten Mittelwert aller Packets einer Differentialordnung. Als Gewicht sei der Faktor k aus Gleichung (4-3.42) gewählt. In Abb. 4.16 sind die gewichteten Mittelwerte der Packets der gleichen Ordnung benutzt.

Die Synthese eines Signals aus MRA Packets ist ein wirkungsvolles Werkzeug mit dem das Signal sehr spezifisch Modifiziert werden oder auch bestimmte Charakteristika extrahiert werden können. In dem gegenwärtigen Fall sind die Packets eines DownSampel-Niveaus derart manipuliert, das Aussage(I) erfüllt sein sollte und die modifizierten Packets approximieren die Differentialquotienten. Die Synthese erzeugt aus der so manipulierten Packets das Signal, solange die Modifikation klein ist.

In Abb. 4.16 zeigen das obere und untere linke Bild die Synthese-Ergebnisse für zwei ausgewählte Niveaus (einmal Niveau 8 und das tiefste Niveau 13 mit der größten Skala), auf denen die Packets modifiziert wurden. Die Synthese auf Niveau 8 (Bild oben rechts) erzeugt das Originalsignal Abb. 4.13. Die Packet Manipulation beeinträchtigt offensichtlich nicht die Synthese. Der Unterschied zwischen beiden ist im Bild oben rechts gezeigt, und beträgt etwa $\sim 1\%$ und wird hier als Rauschen bezeichnet. Wenn auf dem untersten Niveau die Aussage (I) erzwungen wird, ist das Signal normalerweise zerstört. Dies kann in dem linken

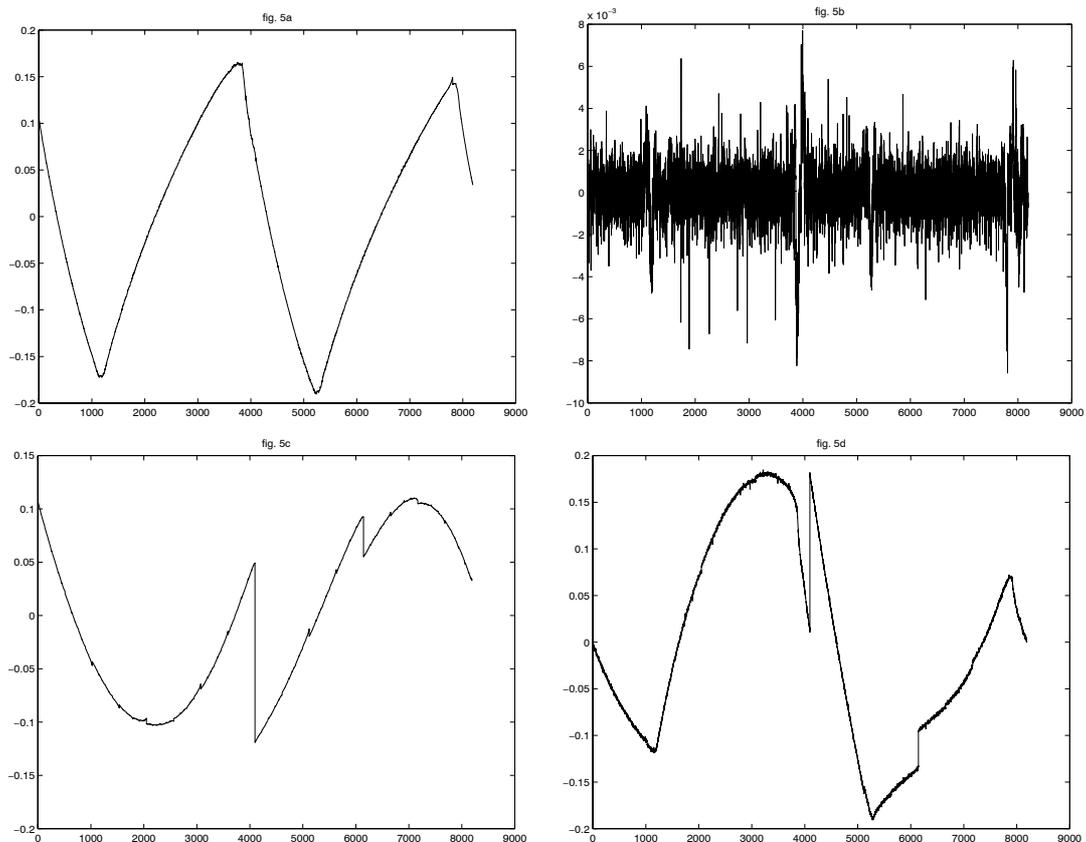


Abbildung 4.16: Synthetisiertes Signal aus modifizierten MRA Packets und der Unterschied zum Original-Signal von Abb. 4.13. Obere Bilder: Aus Niveau 8 ist Aussage (I) für alle Packets erzwungen worden, indem der gewichtete Mittelwert als Referenz für alle Packets der gleichen Differential-Ordnung gesetzt wurde. Untere Bilder: An Stelle von Niveau 8 ist das tiefste Niveau 13 gewählt worden.

unteren Bild von Abb. 4.16 gesehen werden. Es gibt Bereiche, in denen sich die höheren Ableitungen kritisch verhalten. Der Unterschied zwischen dem Synthetisierten und dem Original (siehe Bild rechts unten) ist in diesem Fall beträchtlich.

Die Konstruktion eines Differentialgleichungssystems, welches das Signal als Lösung hat kann im gegenwärtigen Fall vereinfacht werden, weil die Dimension (Ordnung) der Differentialgleichung als zwei angenommen werden darf. Andererseits entstehen Schwierigkeiten in Bereichen scharfer Verwerfungen, da der erste Differentialquotient eine rechteckige Kurve der zweite und höhere Peaks erzeugen. Dennoch zeigt Abb. 4.17 die Beziehung zwischen dem Signal und dessen Ableitungen in dem dreidimensionalen Raum der durch das Signal, die erste und zweite Ableitung aufgespannt wird. Jede Hyper-Fläche die diese Kurve einschließt, liefert eine Differentialgleichung(4-3.45) mit dem Signal als Lösung.

Insbesondere zeigt die Bildreihe (b) bis (d) in Abb. 4.17 wie der Original-Graph, der eher einer Punktwolke ähnelt durch Anwendung von Aussage (I) auf Niveau 8 und Synthese in das Signal 4.17(d) transformiert wird. Damit ist deutlich Demonstriert ist, daß die Kurve $\mathcal{S}(f_0, f_1)$ existiert.

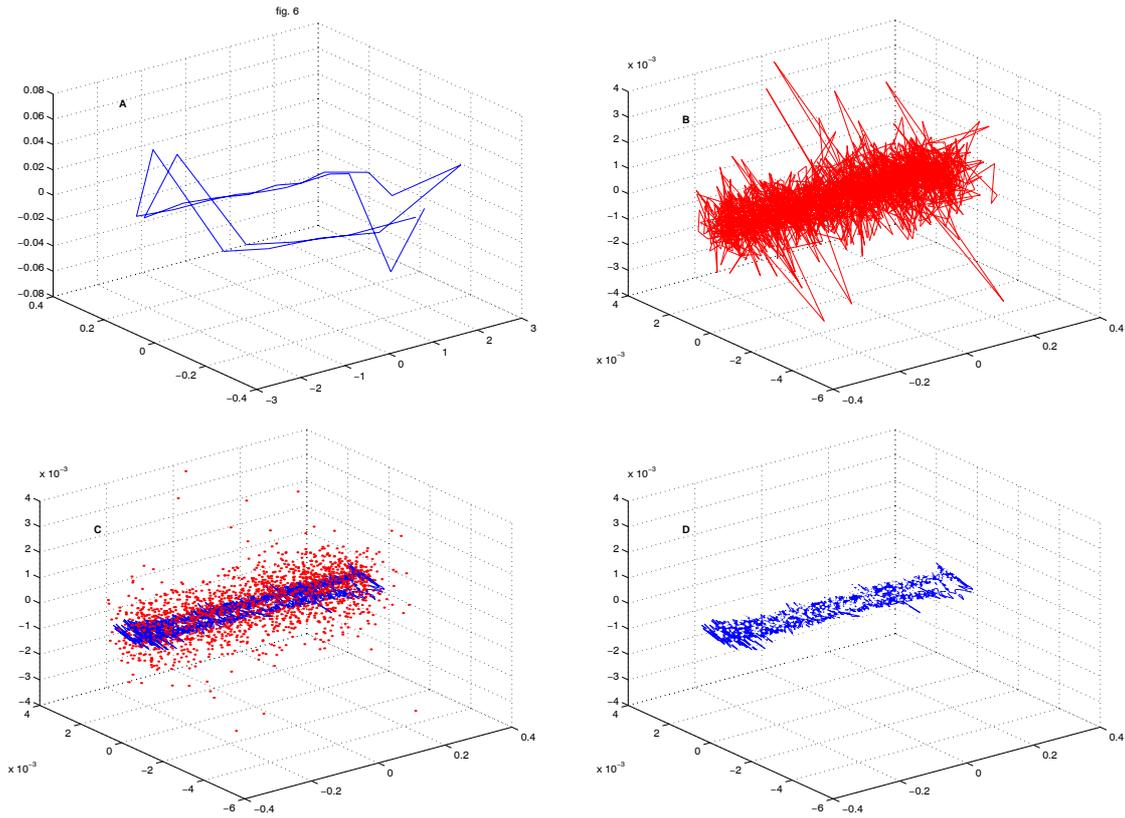


Abbildung 4.17: Signal von Abb. 4.13 als Lösung eines Differentialgleichungssystems

$$\left(\frac{d}{dt} f_0 = f_1, \frac{d}{dt} f_1 = f(f_0, f_1) \text{ wobei } f_0 = \hat{a} \hat{a} f, f_1 = \hat{d} \hat{a} f \text{ und } \frac{d}{dt} f_1 = \hat{d} \hat{d} f \right)$$

Die Achsen für f_0 zeigt nach vorne, für f_1 nach rechts und $f(f_0, f_1)$ nach oben. Gezeichnet sind die Koeffizienten der Packets (A) auf DownSample-Niveau 8 und (B) auf DownSample-Niveau 2. In (C) und (D) ist auf Niveau 8 Aussage (I) für alle Packets erzwungen worden. Das synthetisierte Signal ist auf Niveau 2 zwei in (C) und (D) gezeichnet ohne die Original-Koeffizienten in (B).

Die erhaltene beschreibende Differentialgleichung kann einige Aspekte des chemischen Systems ausdrücken, welches das Signal ausgesendet hat. In diesem Fall über den Grenz-Zyklus (Abb 4.17) der nicht-lineare Oszillationen generiert. Der

Zugang zu dem Signal über Differentiale läßt beträchtliche Freiheiten offen, um die Beschreibung zu vervollständigen.

Andererseits läßt die Entwicklung in eine Potenzreihe, die ebenso lokalisierte Differentialquotienten zur Approximation benutzt, keine Freiheiten offen.

Mit Aussage (I) kann man die notwendigen Differentialquotienten für jedes diskrete Zeit-Skalen Intervall erhalten (siehe 4-3.37 und 4-3.38). Die Potenzreihe repräsentiert eine Beschreibt der Beziehung zwischen den Packet-Koeffizienten eines Signals. Der Term $\varepsilon(t)$ gibt dabei ein Maß für die Approximation und kann benutzt werden um die besten Differentialquotienten zu finden, indem aus verschiedenen Packets unterschiedliche Zeit-Skalen Intervalle ausgewählt werden (in denen sich dann die Quotienten lokalisieren).

In dem rechten Bild von Abb. 4.18 ist die Norm (ε) auf vier verschiedenen Skalen (Niveau 3 bis 6) über alle Koeffizienten in allen Packets bewertet worden. Ein Intervall eines Taylorpolynoms in einem Packet ist gestreckt, wobei in diesem die Norm $\varepsilon < \varepsilon_{max}$ des tiefsten Niveaus gilt.

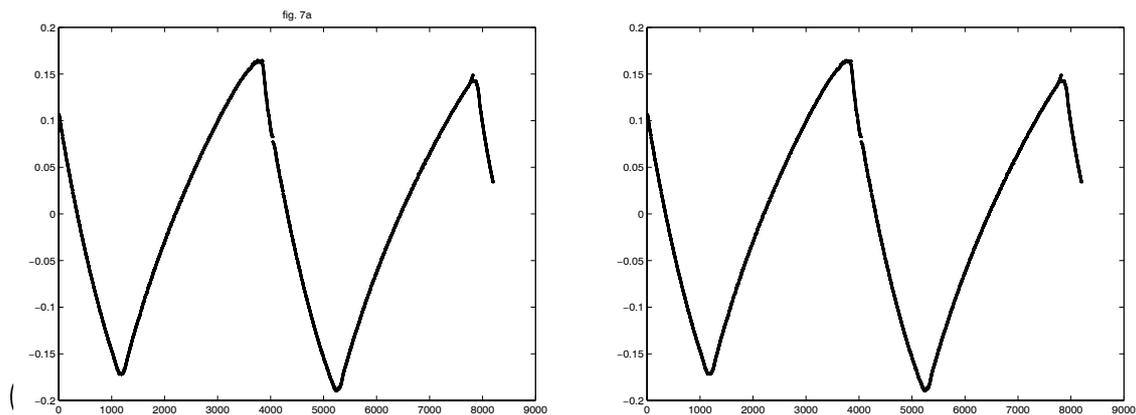


Abbildung 4.18: *Approximation eines Signals durch eine Reihe von Taylor-Polynomen. Das linke Bild: Auf Niveau 5 ist in jedem Zeit-Intervall der MRA-Packets das Signal aus Taylor-Polynomen zusammengesetzt, die aus den Ableitungen in dem entsprechenden Intervall bestehen. Rechtes Bild: wie im rechten Bild nur das auf Niveau 3 und 9 die besten Approximationen der Differential-Quotienten bezüglich dem minimalen $\varepsilon_{max} = 0.001$ in Gleichung 4-3.38 zur Synthese benutzt wurden, um in einem Packet-Intervall ein Taylor-Polynom zu konstruieren.*

4.4 Rauschen

In diesem Abschnitt ist angegeben, wie auf dem erzeugten Spektrumäquivalent der Packet-Dekomposition (3-3.95) Kriterien angesetzt werden können, um die beobachtete Messung y in zwei Teile zu zerlegen. Ein Teil wird das gesuchte und bereinigte Signal sein, der andere als Rauschen bezeichnet. Wir geben dazu zwei Verfahren – “shrinkage” und “basis pursuit de-noising” – an.

Gegeben sei eine verrauschte zeitlich diskretisierte Messung $y = f + z$, wobei f das Signal und z als Rauschen der Ordnung $\mathcal{N}(0, 1)$ bezeichnet wird. Als Beispiel eignet sich eine Aufnahme des Tenors “Enrico Caruso” [Don97] [Inc97], die durch Rauschen beeinträchtigt sein dürfte. Diese Aufnahmen 4.19 werden üblicher Weise mit Filter vom Rauschen befreit.

An dieser Stelle sei aber angemerkt, das auch im Rauschspektrum durchaus Informationen enthalten sein können. In steganographischen Verfahren wird diese Möglichkeit genutzt. Zuerst wird das Rauschspektrum analysiert um dann mit einer Funktion zwischen einzelnen Manipulierten und scheinbar zusammenhangslosen Anteilen des Spektrums eine Beziehung herzustellen. In der Menge der manipulierten Anteile ist dann eine Information formuliert, wobei die Verteilung des Spektrums nicht verändert wird.

“Wavelet Shrinkage” Im Abschnitt 3.1.7 ist die approximative Eigenschaft der Synthese und der Koeffizienten-Funktionen \tilde{f} in (3-1.29) und g in (3-1.29) erwähnt.

Das aus der manipulierten Koeffizienten-Funktion $\tilde{f} \in \mathcal{F}$ synthetisierte Signal (für das es im \mathcal{H} kein Signal mehr gibt) ist die “least-square Approximation” eines pseudo-Original-Signals $f_{\text{Approx}} \in L^2(\mathbf{R})$, das heißt die Approximation kommt diesem pseudo-signal am nächsten. Und nach 3-1.29 maximiert die Koeffizienten-Funktion g die Energie.

Donoho und Johnstone [DI94] [DJ94a] [DJ94b] haben in einer Reihe von Veröffentlichungen eine Methode zum Entrauschen von Signalen. Die Autoren haben bewiesen, daß das Verfahren gut in der praktischen Anwendung funktioniert und auch theoretisch optimal ist.

Das Konzept dieses “Shrinkage”-Verfahrens ist nun sehr einfach. Wenn also ein Signal $f \in \mathcal{H}$ in ein Spektrum aus Koeffizienten-Funktionen $\tilde{f} = g \in L^2(\mu)$ überführt wird, sollten diese Koeffizienten-Funktionen die Energie maximieren. Dieses Spektrum wird mit (3-3.95) erzeugt und besteht aus dem downgesampelten Signal $f = f + \sum_m \tilde{f}_m$. Alle Funktionsanteile des Spektrum die nicht die Energie maximieren, leisten demnach auch keinen Beitrag zu dem (- “wahren” bzw. zu approximierenden -) Signal, und werden deshalb gleich Null gesetzt. Die übrig gebliebenen Teile des Spektrums werden zu einer Funktion synthetisiert, die dann als “least-square-Approximation” einem bereinigten aus Signal $f_{\text{Approx}} \in \mathcal{H}$ am nächsten kommt. Dieses Vorgehen wird in an der Aufnahme von “Enrico Caruso” 4.20 kurz gezeigt:

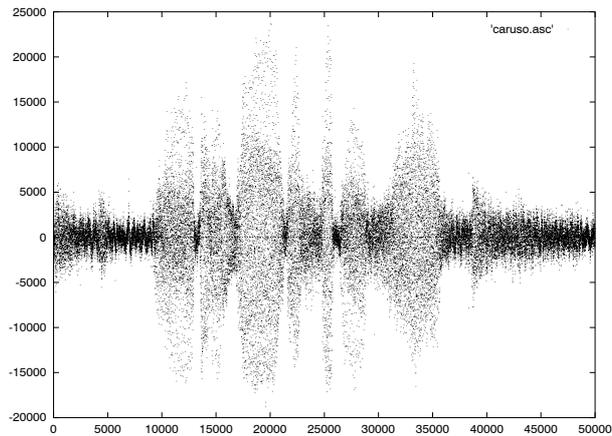


Abbildung 4.19: Signal : Enrico Caruso

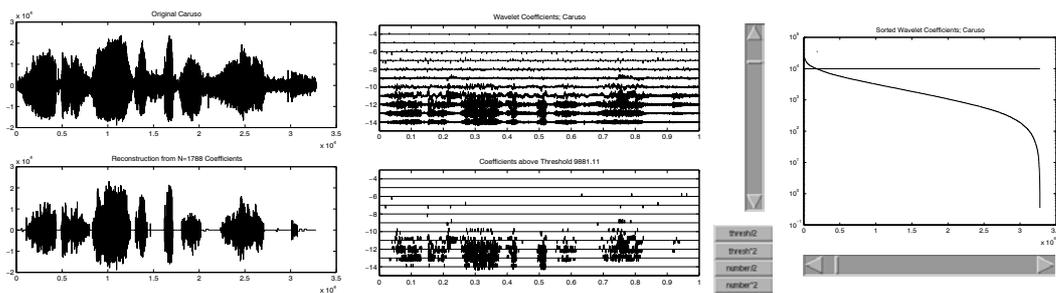


Abbildung 4.20: Caruso's Signal links oben:Original, links unten: bereinigtes Signal; Mitte oben: Spektrum Original; Mitte unten: Spektrum bereinigtes Signal, rechts sortierte Koeffizienten und "threshhold" als wagerechte Linie eingezeichnet.

In Abb. 4.20 (rechts) sind Koeffizienten des Spektrums von 4.20 (Mitte oben) links mit der l^2 Norm bewertet und der Größe nach sortiert. Die eingezeichnete "threshhold" teilt die sortierte Menge der Koeffizienten in zwei Anteile. Die unter der "threshhold" liegenden Werte werden zu Null gesetzt. Nur die darüber liegenden (Abb. 4.20-(rechts)) werden für die Synthese genutzt. Das bereinigte Signal ist in Abb. 4.20 links unten zu sehen. Die verrauschte und bereinigte Aufnahme kann mit dem Befehl `sound(Signal,8193)` angehört werden.

"Basis Pursuit" Das Verfahren von Donoho operiert auf den Koeffizientenfunktionen des Spektrums, daß mit (3-3.95) erzeugt wurde. Das Konzept ist

verallgemeinert auch auf Spektren anzuwenden, die mit (3-3.103) gebildet werden. Dabei wird jeder der Sub-Räume in der gleichen Weise untersucht wie es in Abb 4.20 gezeigt ist.

Hier wird ein weiterer Aspekt berücksichtigt. In Abschnitt 3.3.3 ist der Sub-Raum W_m wie auch V_m durch eine Basis charakterisiert. Die Signalinformation in W_m bzw. V_m ist mit Koeffizienten bezüglich dieser Basis dargestellt. Nun können wiederum wie oben die Koeffizienten mit einem Kriterium bewertet und für eine Synthese ausgewählt werden. So werden in jedem Sub-Raum nur die Basen mit den dazu gehörenden Koeffizienten ausgewählt, die wie oben dem Selektionskriterium genügen. Schließlich wird aus der Menge der Sub-Räume die Gruppe zusammengestellt, mit der das Selektionskriterium am besten erfüllt werden kann. Im vorhergehenden Abschnitt wurde die l^2 Norm als Kriterium gewählt. Hier wird die l^1 Norm genutzt und wiederum nur die maximierenden Koeffizienten für die Synthese berücksichtigt.

Ein weit entwickeltes Optimierungsverfahren ist "Basis Pursuit". Es stammt von Scott Chen [Che95]. Dieses stellt einen Satz diskreter Wavelet-frames (vergleiche hier (3-3.86)) zusammen, mit dem das bereinigte Signal synthetisiert werden kann.

Es liegen physikalische Messungen vor, die aber nicht erheblich verrauscht sind. Um zu demonstrieren, daß die Signaldarstellung in dem durch (3-3.103) erzeugten Phasenraum gegen Rauschen invariant wird, benutzen wir wie schon vorher das Signal der Aufnahme von Enrico Caruso. Obwohl dieses Signal hinreichend verrauscht sein sollte, wird es zusätzlich mit einem Rauschen (- in einem Verhältnis vom Signal zu Rauschen von eins -) entstellt. Das so künstlich belastete Signal wird (- als "Caruso-Blau" bezeichnet -) mit 3-3.103 zerlegt und wie beschrieben synthetisiert.

Das Ergebnis ist in Abb. 4.21 links gezeigt. Aus dem künstlich entstellten Signal (blau) kann eine Information isoliert werden (gelb), die sich zudem noch deutlich gegen die Original-Aufnahme (schwarz) abhebt. Abb. 4.21 rechts zeigt das künstliche Rauschen (schwarz), das Rauschen in Original (rot) und die synthetisierte Information (gelb). Die im Abschnitt 5.8 analysierten Meßwerte sind im Vergleich zum Signal "Caruso-Blau" nur unwesentlich verrauscht (mit etwa 1%).

Das Spektrum jedes Sub-Raumes ist in zwei Teile getrennt worden. In einen Synthese-Anteil und in einen Rausch-Anteil. Die Aufteilung ist durch die Wahl eines Kriteriums (- l^2 bzw. l^1 Norm -) möglich geworden. Damit konnte für die Signalsynthese das notwendige Maß in den diskreten reziproken Sub-frames gebildet werden.

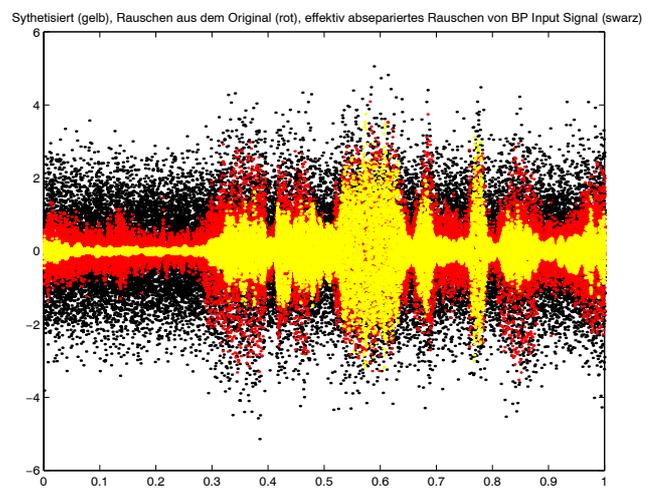
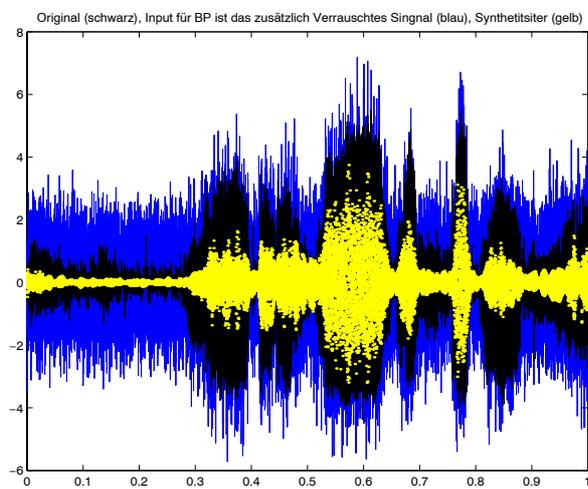


Abbildung 4.21: Das Basis Pursuit Verfahren auf das Caruso Signal angewandt. Links als "Caruso-Blau" das zusätzlich im Verhältnis 1:1 verrauschte Signal. Schwarz Original-Aufnahme. Rechts: Das Rauschen in Signal "Caruso-Blau" ist schwarz gezeichnet und rot das Rauschen in Original-Signal. Das isolierte Signal ist jeweils gelb dargestellt.

Kapitel 5

Diskussion

Ausgangspunkt der Arbeit war eine Zeitserie einer fotometrischen Messung des Metaboliten NADH (Nicotinadenindinukleotid) in einem zellfreien Extrakt aus Bäckerhefe. Unter speziellen Bedingungen der alkoholischen Gärung schwingen die Zwischenprodukte des biochemischen Stoffwechselweges, in dem Glucose zu Äthanol umgesetzt wird. Es handelt sich bei dieser Schwingung um eine nicht-lineare Oszillation, die durch einen Umlauf auf einen Zyklus (auch als Limitzyklus bekannt) beschrieben wird. Eine Test-analyse der Schwingung mit dem Multi-resolutionsverfahren (MRA) der Signalanalyse ergab bei einer Darstellung der Pakete der Multiresolutionsanalyse gegeneinander, die von anderen Auftragungen bekannte Kurvenform eines Limitzyklus. Bei Stoffwechselwegen handelt es sich um vernetzte chemische Reaktionsschemata, die häufig Regelmechanismen unterworfen sind. Das Ziel bei der Aufklärung der Stoffwechselwege ist einerseits, die Reaktionsabfolge zu kennen und andererseits, die Dynamik mit ihren Regelmechanismen darzustellen. Es ergab sich daraus die Frage, inwieweit die modernen signalanalytischen Verfahren der generalisierten frames, wie z.B. die MRA Aufschluß über die Vernetzung ("Connectivity") der Komponenten eines Systems (hier der Stoffwechselweg) und der Dynamik (hier der Kinetik) geben kann. Hierfür sind die Verfahren und die Theorie der Signalanalyse unter diesem Gesichtspunkt aufgearbeitet sowie auch die theoretischen Grundlagen für die Beschreibung von Systemen.

Dabei wurde die folgende Arbeitsthese aufgestellt.

These 1 *Für das Signal eines den Gesetzen der Thermodynamik unterliegenden komplexe Systems kann eine abstrakte erzeugende Beschreibung gefunden werden. Die Beschreibung kann als Netzwerk-Analogon interpretiert werden. Es besteht aus generalisierten System-Komponenten und einer generalisierten Vernetzung (– Connectivity –) dieser Komponenten. Wenn die generalisierten Systemvariablen eine physikalische Realisierung haben (Prozesse), dann kann das Signal derart synthetisiert werden, als wäre es aus einem diskreten Satz von miteinander vernetzten physikalischen Prozessen erzeugt.*

5.1 Deutung von Basen als Prozesse

Die Grundidee, die in dieser Arbeit verfolgt wurde, ergab sich aus der Signalanalyse mit der Paketzerlegung der MRA, in der ein und dasselbe (bzw. eine Zeitreihe) Signal nicht nur einfach, sondern in vielfacher Weise dargestellt bzw. zerlegt werden kann. Dabei werden die Meßwerte a_i einer Zeitreihe ($i = 1 \dots n$) von n Werten als Komponenten eines Vektors von Funktionen in einem Funktionsraum, den Hilbertraum, gedeutet, d.h. das Signal in der Form $S = \sum_i a_i \cdot \phi_i$ geschrieben wird, wobei die $\phi_i(t)$ zeitabhängig sind und die a_i zeitunabhängig. Für die Anschauung ist es hilfreich, die Haar-Basis zu verwenden, bei der die $\phi_i(t)$ eine Serie von aneinander gereihten Rechteckfunktionen

$$\phi_i(t) = \begin{cases} 1 & : t \leq t_0 + (i-1)\Delta t \quad \text{oder} \quad t > t_0 + (i)\Delta t \\ 0 & : \text{sonst} \end{cases} \quad (5-1.1)$$

der Rechtecklänge Δt sind. Die $\phi_i(t)$ bilden eine orthonormierte Funktionenvektorbasis. Die zeitliche Ableitung des Signals $\dot{S} = \sum_i a_i \cdot \dot{\phi}_i(t) \simeq \sum_i b_i \cdot \psi_i(t)$ kann in einer weiteren Funktionalbasis $\psi_i(t)$ mit dem Koeffizienten b_i dargestellt werden, wobei die $\psi_i(t)$, die "Wavelets" wieder in der Funktionalbasis der $\phi_i(t)$, d.h. $\psi_i(t) = \sum_j g_{ij} \cdot \phi_j(t)$ dargestellt werden sollen, so daß die $b_i = \sum_j g_{ij} \cdot a_j$. Bei der Haar-Basis erhält man die ψ_i , indem das Zeitintervall Δt halbiert und ψ_i aus zwei Rechteckfunktionen, im ersten Halbintervall mit dem Wert $g_1 = 1$ und im zweiten mit dem Wert $g_2 = -1$ zusammensetzt wird. Damit wird die Ableitung einer Rechteckfunktion grob angenähert. In der MRA werden beide Funktionalbasen zur Darstellung des Signals verwandt, d.h.

$$S = \sum_i (\bar{a}_i \cdot \phi_i(t) + \bar{b}_i \cdot \psi_i(t)) \quad (5-1.2)$$

und zudem das Zeitintervall Δt variiert in Schritten, die es halbieren bzw. verdoppeln. Daraus ergibt sich eine Kaskade von möglichen Darstellungen mit unterschiedlichen Zeitintervallen, den Skalen. Sie wird in einem Schema, der Paketzerlegung, in der MRA angegeben. Betrachtenswert ist die unterste Ebene in diesem Schema, bei dem der Zeitintervall Δt gleich dem Zeitfenster der gesamten Meßreihe umfaßt. Die Koeffizienten repräsentieren hier gewissermaßen ein Spektrumanalog von dem Signal. Das Meßsignal S ist auf der Ebene allein durch Basen von "Wavelets" (Schwingungen) $S = \sum_{k=0}^n c_k \cdot \psi_k(t)$ dargestellt, die sich über die gesamte Zeitreihe erstrecken. So gesehen entsteht das Signal, in dem ein konstanter Wert über Zeitreihe, durch successives Hinzufügen eines $c_k \cdot \psi_k(t)$ nach dem anderen aufgebaut wird. Es baut sich nicht zeitlich nacheinander auf, sondern durch Prozesse (Schwingungen), die sich über die gesamte Zeitreihe erstrecken, und die sich aus den Ableitungen (Differentialquotienten)

des Signals herleiten [PH98] [RPA98]. Die Prozesse müssen sich nicht notwendigerweise über die gesamte Meßreihe erstrecken, sie können auch auf Zeitintervalle (Zeitskalen) beschränkt sein, dadurch wird eine Vielzahl von Darstellungen des Signals erreicht, indem “Wavelets” mit unterschiedlichen Zeitskalen kombiniert werden. Dieses Bild bekommt eine anschauliche Bedeutung, wenn man annimmt, daß dieses Signal die Anzahl von Teilchen zu einem Zeitpunkt, z.B. Moleküle, sind. Die zeitliche Änderung des Teilchens werde durch chemische Umwandlungen bewirkt, dann setzt sich das Signal aus dem Anfangszustand und den ablaufenden chemischen Reaktionen (Prozesse) zusammen. In einem Zeitintervall stellt $\psi_i(t)$ die zeitliche Prozeßcharakteristik dar und der zugehörige Koeffizient b_i die Häufigkeit mit der der Prozeß (Anzahl der Umsätze) abgelaufen ist. So ist das Signal in einer hochauflösenden Zerlegung aus mikroskopischen Prozessen aufgebaut. Wird aus dieser Sicht noch einmal die Darstellung (5-1.2) gedeutet, so entsprechen die \bar{a}_i den Teilchenanzahlen (Teilchenpotentialen) zu einem Zeitpunkt und die \bar{b}_i , den Umsätzen von Teilchen in Prozessen (Flüsse) im zugehörigen Zeitintervall [SSS98] [SSS98]. Es ist demnach eine Zerlegung in Flüsse und zugehörige Potentiale möglich, die je nach Wahl der Basen unterschiedliche Koeffizienten \bar{a}_i und \bar{b}_i aufweist. Stellt die Basis realistische Prozesse dar, so sollten zwischen Flüssen und Potentialen Gesetzmäßigkeiten gelten. Anderenfalls ergibt sich eine Zerlegung in generalisierte Potentiale und Flüsse. Dieses Konzept war die Grundidee thermodynamische Systeme und speziell chemische Reaktionssysteme aus dieser Sicht zu analysieren.

5.2 Quantentheorie und Hilbert-Raum

Die Quantentheorie ist wohl die bekannteste Theorie, die im Hilbert-Raum \mathcal{H} von Funktionen formuliert ist. Bei ihr wird die Basis von Funktionen aus den Eigenfunktionen von Differentialgleichungen gewonnen, die das reale Geschehen beschreiben, d.h. $\phi_i(t)$ (3-3.47) sind Eigenfunktionen. Im Gegensatz dazu werden bei der Signalanalyse die $\phi_i(t)$ nach bestimmten Konstruktionsprinzipien ermittelt und sind im allgemeinen keine Eigenfunktionen des Systems, von dem das Signal erzeugt wurde. Dennoch ist anzunehmen, daß bekannte Eigenschaften der Quantentheorie, wie die Unschärferelation [BHW92] und die Quantelung, auch bei den Methoden der Signalanalyse wiederzufinden sein sollte. Dies sei nur angemerkt, da es nicht Gegenstand der Arbeit ist.

Da die Quantentheorie sich im Wesentlichen mit linearen Systemen (Operatoren) beschäftigt, ist eine aus Eigenfunktionen linear zusammengesetzte Funktion wieder eine Realisierung eines Zustandes des Systems. Bei der Signalanalyse kann dagegen das Signal von einem nicht-linearen System herrühren und dann gilt nicht mehr allgemein, daß die lineare Überlappung zweier Signale des Systems wieder ein Signal des Systems sein muß. Die in der Arbeit betrachteten Relaxationsoszillation werden von nicht-linearen Systemen erzeugt.

5.3 Anmerkung zur Konstruktion der System-Topologie

Ausgehend von den Signal kann natürlich nicht deduktiv auf eine Systemstruktur geschlossen werde. Durch den Meßvorgang in der Zeit wird nur die System-Dynamik erfaßt. Sämtliche Information der zeitlich invarianten System-Topologie ist dabei nicht erfaßt. Es drängt sich die Frage auf ob es prinzipiell möglich ist Signale so zu analysieren, das Aussagen über die System-Topologie gemacht werden können.

Wenn ein Signal nur begrenzte Information enthält, kann aus dieser auch nicht durch eine Transformation mehr gemacht werden. In diesem Sinn kann (3-1.9) so interpretiert werden, das durch die Transformation keine Information verloren geht, aber auch keine Information produziert wird.

Die topologische und dynamische Beschreibung eines Systems enthält tatsächlich mehr Information als z.B. eine Differentialgleichung der Dynamik. Die zeitlich invarianten topologischen Systemcharakteristika aus einem Signal zu deduktiv zu formulieren ist gleichbedeutend mit einer Produktion von Information. Dies würde aber nicht nur (3-1.9) verletzen sondern auch zu nicht eindeutigen Lösungen des Problems führen, deren Menge (–das wäre die Menge allen möglichen Netzwerk-Modelle die das Signal erzeugen können –) selbst Lösung des Inversen Problems ist und somit jede einzelne Lösung der Menge bedeutungslos wird.

Normalerweise wird diese Produktion der Information durch Annahmen unterstützt. Die Annahmen führen dazu die Lösungsmenge des Inversen Problems einzuschränken. Die verbleibenden Lösungen sind dann aber sehr durch den Charakter der Annahmen geprägt, und erfassen die physikalische Realität des Systems meist nur in dem Ausmaß, wie es durch die genutzten Annahmen nicht ausgeschlossen wird.

In der Vorgehensweise eine System-Topologie zu konstruieren wird die Aufgabe der Annahmen durch das ansetzen physikalischer Gesetze übernommen. Dies führt zu einer Strategie die Lösungsmenge des Inversen Problem derart einzuschränken, daß die verbleibenden Lösungen (– Netzwerk-Modelle des Systems –) durch die physikalischen Gesetze geprägt sind, welche etwa wie Randbedingungen als Auswahlkriterium zum Ansatz gebracht werden.

Der mathematische Formalismus läßt es zu, Gesetze als Zusammenhang zwischen generalisierten Koordinaten zu formulieren. Die generalisierten Koordinaten sind aber genutzt worden, um phänomenologische Prozesse (– differenzierbare zeitliche Vorgänge –) zu beschreiben.

Durch die Vorgabe von Gesetzen kann erzwungen werden, daß zeitlich differenzierbare Vorgänge als Prozesse erfaßt formuliert werden, die unter den physikalischen Bedingungen so ablaufen könnten.

Wenn diese Bedingungen für alle generalisierten Koordinaten erzwungen wer-

den, ist ein Signal als Ergebnis einer Synthese verschiedener Prozesse zu interpretieren, wobei die Prozesse physikalische Gesetze realisieren.

Auch wenn die in einem Zeitintervall isolierten differenzierbaren zeitlichen Phänomene Vorgänge simulieren, die durch physikalisch Gesetze realisiert sein könnten, muß das Signal nicht notwendigerweise durch diese “physikalischen Prozesse” erzeugt worden sein [CB97] [LBK98] [TOS98].

Außerdem ist die erzeugte MRA von der gewählten Potentialfunktion ϕ in (3-3.47) abhängig. Im Prinzip könnte sich für jede Potentialfunktion, mit der sich eine MRA erzeugen läßt auch ein Koordinatensystem aus physikalischen Prozessen als Systemdarstellung ergeben.

Für das Inverse Problem kann die Menge der Lösungen wesentlich eingeschränkt werden, indem in der Signalsynthese Gesetzmäßigkeiten erzwungen werden. Auf die verbleibenden Lösungen kann dann ein weiteres Selektionskriterium angewendet werden. Wir wenden dazu das von Igor Novikov [CN96] entwickelte Prinzip Selbstkonsistenz auf die Menge der Funktionen an, die eine Zustandsgleichung des Prozesses lösen bzw. die einen physikalischen Prozeß realisieren. Dieser Ansatz führt auf Verteilungen der Lösungsmenge, die gegen die Translation im Phasenraum invariant sind.

5.4 Test-Systeme

5.4.1 Experimentelles Test-System

Das experimentelle Signal aus Abb. 4.13 ist eine verrauschte Zeitreihe. Wavelet-Analyse kann nicht nur das Rauschen effektiv von dem Signal abtrennen und dem Detail hinzufügen [Mal98] sondern kann auch Differential-Quotienten des Signals approximieren, wie in Abb. 4.15 demonstriert.

Es gibt effizientere Methoden um verrauschte Signale vom Rauschen zu bereinigen, als es hier durch Unterdrückung vom Rauschen in Form des Mitteln des Signals während des DownSampelns realisiert wurde [Mal98]. Hingegen ist das Zerlegen der Signal-Information in den Synthese-Anteil und einen Rest (– der dann als Rauschen bezeichnet wird –) durch das benutzte Maß in (3-1.17) bedingt. Im letzteren Fall ist das Rauschen nicht unterdrückt sondern durch Synthese entfernt.

Im wesentlichen ging es darum die Gültigkeit der Aussage (I) zu prüfen, die nicht für Rauschen erfüllt sein sollte. Abb. 4.15a demonstriert das auf den oberen Skalen keine lineare Beziehung zwischen den Daten in den entsprechenden Packets (– wie durch Aussage (I) gefordert –) besteht. Dennoch, je mehr das Signal durch die mittelnde Operation geglättet wird, um so mehr nähert es sich der Differenzierbarkeit und die linearen Beziehung der Aussage (I) beginnt sichtbar zu werden (siehe Abb. 4.15b–e).

Wenn das Signal zu einer differenzierbaren Kurve wird, sollte Aussage (I)

erfüllt sein. In der MRA kann aber auch erzwungen werden, daß Aussage (I) erfüllt wird, indem für eine DownSampel-Niveau (Skala) alle Packets derselben Differential-Ordnung proportional zu einem Referenz-Packet gesetzt werden. Das Referenz-Packet repräsentiert die Ableitung des Signals.

Es gibt verschiedene Wege das Referenz-Packet zu konstruieren. Das Packet mit der höchsten Anzahl von mittelnden Operationen auf die eine differenzierende folgt, oder eine gewichtete Summe aller Packets der selben Differential-Ordnung und des gleichen DownSampel-Niveaus kann als Referenz-Packet gewählt werden.

Es gibt auch verschiedene Möglichkeiten den Packets Proportionalitätsfaktoren zuzuweisen. Eine ist nach dem besten kleinsten Fehler der linearen Beziehung des Original Packet mit dem Referenz-Packet zu suchen.

Dies bringt das beste Synthese-Signals hervor, unter der Bedingung das Aussage (I) erfüllt wird.

Eine andere Möglichkeit ist theoretische Faktoren nutzen und die Referenz-Packets auf diese anzupassen. Dies liefert ein synthetisiertes Signals welches Aussage (I) erfüllt und zusätzlich die Differenzierbarkeit approximiert. Die theoretischen Faktoren können aus einer Multiresolution-Analyse der Kurve x^n berechnet oder erhalten werden.

Auf dem tiefsten Niveau ist das Signal aus nur wenigen Werten synthetisierbar (d.h. die Anzahl der Ableitungen plus 1). Sehr komplexe Signale sind nicht aus den Werten des tiefsten Niveaus synthetisierbar, da sich recht große Abweichungen von Aussage (I) ergeben. Sehr viele Signalinformation wird vernichtet, in dem, auf dem tiefsten Niveau die "Kommutator-Bedingung" 4-3.32 (Aussage (I)) erzwungen wird [DGS98].

In Abb. 4.17D ist die Kurve synthetisiert nachdem auf Niveau 8 Aussage (I) erzwungen wurde. Diese Kurve sieht immer noch verrauscht aus. Dennoch, die Kurve besteht nur noch aus den besten approximierten Differential-Quotienten, also aus differenzierbaren (glatten) Abschnitten der Zeitreihe auf unterschiedlichen Skalen. Tatsache ist, das es auf dem Niveau 8 Ableitungen gibt, von denen aber nur zwei unabhängig sein sollten.

Somit zeigt Abb. 4.17 das für die Reproduktion eines Signals durch ein Differentialgleichungssystem nur die Koeffizienten benötigt werden, die nach Anwendung der Aussage (I) auf Niveau 8 übrigbleiben, und die zu keinem Differentialquotienten der Ordnung größer 2 gehören. Sie bilden eine Kurve in der Hyperfläche des Phasenraumes, der mit den Ableitungen des Signals gebildet wird. Die anderen Koeffizienten der Fläche, die das Signal im Hyper-Raum darstellt, sollten nicht zufällig verteilt sein sondern eher eine in der (glatten) differenzierbare Fläche liegen, und somit der Aussage (I) genügen.

Variationen von Systemparametern oder Anfangswerten in dem experimentellen System führen zu neuen Signalen und zusätzlichen Kurven in dem Diagramm und liefern weitere Koeffizienten die die Fläche und somit das Differentialgleichungssystem charakterisieren. Das Differentialgleichungssystem ist von beschreibender Natur, da es sich aus *frames* zusammen setzt in denen lediglich

phänomenologischen Prozesse (– differenzierbare Vorgänge in der Zeit –) dargestellt werden.

Eine Koordinatentransformation mit der die generalisierten Koordinaten in reale physikalische Variablen überführt werden können wird nun benötigt, um eine Darstellung des Systems mit physikalischer Realität zu erhalten. Normalerweise wird eine solche Koordinaten-Transformation die Systemeigenschaften invariant lassen (– z.B. ein Grenz-Zyklus bleibt ein Grenz-Zyklus. Die Koordinatentransformation ändert lediglich die Erscheinungsform im Phasenraum. –)

Die Approximation eines Signal durch eine Serie aus Taylor-Polynomen (siehe Abb. 4.18) verlangt ebenfalls die Differenzierbarkeit im Sinne von (4-3.32) (– siehe [Mal98] Kapitel 6 “Lipschitz regularity”). Für den Spezialfall einer Haar-Basis ist die Approximation durch eine Reihe aus Taylor-Polynomen auf dem ersten DownSampel-Niveau exakt und reproduziert das Signal vollständig. Auf höheren Niveaus ist die Approximation nur dann möglich, wenn die 2^k Werte des Polynoms durch $k + 1$ Koeffizienten festgelegt sind. Der Fehler ϵ (siehe 4-3.38) ist ein Maß für die Güte der Approximation. Im linken Bild von Abb. 4.18 ist das approximierte Signal von dem DownSampel Niveau 5 gezeigt. Dabei ist für zweiunddreißig sukzessive Werte des Signals ein Taylorpolynom der Ordnung 5 eingesetzt. Obwohl das Signal um den Faktor $32 : 5$ komprimiert ist, kann es immer noch das Original zurückbringen. Dies mag als Verifizierung der Aussage (I) interpretiert werden.

Eine weitere Kompression ist erreichbar, wenn die Fehlergrenze ϵ über ein Zeitintervall niedriger gewählt wird, und wenn dazu das höchste Niveau (– das dieser Fehler-Grenze genügt –) als Polynom genutzt wird, um das Signal in diesem Zeitintervall zu approximieren.

Andererseits kann ein so approximiertes Intervall als Analogon zu einem Rhythmus in einem Musikstück betrachtet werden. In diesem Sinne haben die Koeffizienten in der gefundenen Serie als Taylorpolynome die Aufgabe, die in der Musik den “Noten” zufällt. Man erkennt, daß das Signal mit einem sehr begrenzten Satz dieser “Noten” (– deren Dauer mit den Skalen identisch ist –) erzeugt werden kann.

Das rechte Bild in Abb. 4.18 kann als Beispiel für diese Sichtweise dienen, wobei der Grund-Rhythmus das achtfache der Abtastrate ist. Die “Noten” können durch eine begrenzte Zahl von Längenangaben, also das 1,2,4 und 8 fache des Grund-Rhythmus beschrieben werden. Die Intensität ist gegeben durch die Koeffizienten im Polynom (für weitere Details über Kodierung der Intensität siehe [Mal98] Kapitel XI). Sollte eine System-Grammatik für diese “Noten” existieren, kann mit dieser Technik eine ganze Klasse von Signalen erzeugt werden, so wie Musik die Menge aller Töne ist.

Eine weitere Konsequenz der Aussage (I) ist, daß wenn sie für ein DownSampel-Niveau erfüllt ist, sie auch für alle feineren Skalen über dem Niveau gilt.

5.4.2 Mathematisches Test-System

Im mathematischen Test-Modell wurde eine Zeitreihe durch Vorgabe eines Differentialgleichungssystems erzeugt. Es wurde dafür ein Modell gewählt, das einem realistischen System nahe kommt. Um den umgekehrten Weg vom Signal zum Differentialgleichungssystem möglichst gut nachvollziehen zu können. Dabei wird angenommen, daß eine Messung das Zeit-diskretisierte Verhalten von genau einer Variable System-Variable ξ_1 zugänglich gemacht hat. In dem Phasenraum bildet diese eine Dimension, die orthogonal zu einer weiteren ξ_2 sein soll. In diesem Sinn bezeichnen wir die Messung von ξ_1 als "rein" (– in Anlehnung des Begriffs des "reinen Zustandes" –), da in ihr keine Anteile von ξ_2 enthalten sind.

Für den speziellen Fall, in dem eine "reine" System-Variable verfügbar ist, sind die Berechnungen der Phasendarstellungen in Abschnitt 4.2 und 4.3 durchgeführt, über den differentiellen und integralen Zusammenhang der Variablen des System (– wie im Modell gegeben in Form einer Differentialgleichung –) konnte die jeweils fehlende berechnet werden, wobei eine Eigenschaft von Relaxationsoszillationen ausgenutzt wurde. Bei ihnen ist $\xi_2 \approx \dot{\xi}_1$

Die Variablen ξ_1 bzw. ξ_2 unterscheiden sich durch ihre Differenzierbarkeit charakteristisch vom Rauschen. Für eine reine Variable kann eine Regel angegeben werden, die den zeitlich kausalen Zusammenhang zwischen zwei Meßwerten ihrer diskreten Zeitreihe formuliert. Zum gegenwärtigen Zeitpunkt ist mir nicht bekannt wie so ein zeitlich kausaler Zusammenhang in z.B. stochastischem Rauschen formuliert werden kann (und nicht nur für Anteile wie in der Steganographie). Deshalb fassen wir dies in einer Aussage zusammen: "Rauschen ist nicht differenzierbar."

Ein diskreter zeitlich kausaler Zusammenhang zwischen Meßwerten wie er z.B. in der Filtertheorie mit einem ARMA Prozeß beschrieben wird, bezeichnen wir als "phänomenologischen Prozeß". Auch für die gemessene Zeitreihe in Abb. 4.13, ist so eine Approximation möglich. Sie führt auf einen phänomenologischen Prozeß, da das Signal keine Aussage über die tatsächlich ablaufenden physikalischen Prozesse zuläßt. Es sei denn man hat weitere Informationen über das System.

Wir Vermuten nun, daß es einen Zusammenhang zwischen phänomenologischen Prozessen und differenzierbaren Erscheinungen in der Signalinformation einer Messung gibt. Es ist anzunehmen, daß nur in seltenen Fällen "reine" Variablen gemessen werden könne. Außerdem ist es bei unbekannter System-Struktur nie möglich festzustellen ob eine reine Systemvariable gemessen wurde oder ob gegebenenfalls auch noch andere Größen die gemessenen hineingefalten worden sind.

Im Test ist ein Differentialgleichungssystem gewählt, daß von einem "Continuous Stirred Tank Reactor" stammen könnte, der durch einen konstanten Fluß versorgt wird. Es wurde getestet, ob die linearen Anteile des Differentialgleichungssystems separiert werden können, um eine Funktion zu erhalten die die Abläufe im Reaktor beschreibt. Abb.4.8 zeigt das dies möglich ist. Da eine Messreihe

nur eine Kurve darstellt, die charakteristische Funktion des Reaktors aber eine Funktion in den Variablen ξ_1 und ξ_2 ist, zeigt Abb.4.9 die theoretische Fläche über x_1 und x_2 , in der die Meßreihe nach abtrennen der linearen Anteile eine Kurve wird.

Die Nullklinen sind die rechten Seiten des Differentialgleichungssystems. Für sie sind für Relaxationsoszillationen im Phasendiagramm Approximationen zu finden. Sie sind die Schnittkurven der linearen Anteile mit der charakteristischen Fläche des Reaktors. Sie sind in Abb.4.9 in die theoretische Fläche eingezeichnet. Das Test-System zeigte, daß es möglich ist die Nullklinen-Approximationen aus nur einer Zeitreihe herzuleiten(Abschnitt 4.2.1).

Hieraus folgt für ein Experiment, daß der singuläre Punkt (– der Schnittpunkt beider Nullklinen –) geschätzt werden kann. Die ist für Bifurkationsexperimente ein wichtiger Ansatzpunkt. Außerdem lassen sich Mischexperimente planen, um Teile der Fläche der Reaktorfunktion zu bestimmen. Bei einem Mischexperiment hat man zwei Reaktoren, die im Fall der Relaxationsoszillationen lediglich mit unterschiedlicher Phase Schwingen. Gibt man zu einem Zeitpunkt einen Anteil des einen in den anderen, so springt im Phasendiagramm die Bahnkurve an eine definierte Stellen (– neue Anfangsbedingung –) von der aus sich das System wieder auf den Limit-Zyklus zubewegt. Auf diese Weise läßt sich gezielt ein Phasenportrait, wie in Abb.4.11 gezeigt, erzeugen, aus dem die Reaktorcharakteristik (4-2.2) approximiert werden kann.

5.5 Anmerkung zu physikalischen Realisierungen und *frames*

In Abschnitt 4 wurden Berechnungen ausgeführt, die auf eine phänomenologische Beschreibung der Dynamik in Abb. 4.17. Auf den Achsen des Phasenraumes werden die sich zeitlichen ändernden Konzentrationen chemischer Substanzen erfaßt. Die System-Topologie, wie sie für den Modellmechanismus (2-3.32) in Abb.2.3 gezeigt ist, kann mit dieser Basis nicht dargestellt werden. Dazu wären die Dimensionen weiter zu zerlegen um schließlich auf eine Darstellung verschiedener phänomenologischer Prozesse in verschiedenen Zeitintervallen und auf unterschiedlichen Skalen zu erhalten. In einem phänomenologischen Phasenraum kann das System genauso vollständig formuliert werden, wie in dem der aus physikalischen Prozessen aufgespannt wird. Beide Phasenräume (– also der phänomenologische und der physikalische –) lassen sich durch eine Koordinaten-Transformation ineinander überführen.

Die Berechnung für den phänomenologischen Phasenraum ist mit Wavelets gemacht worden. Mit der Packet-Dekomposition kann sogar eine orthogonale Wavelet-Basis phänomenologischer Prozesse erzeugt werden. Wenn diese Basis einer Koordinatentransformation unterzogen wird, kann nicht erwartet werden,

daß sich hinterher Wavelets finden lassen die zueinander auch noch orthogonal sind. Wir erwarten statt dessen analog den Eigenfunktionen der Quantenmechanik, integrierbare Funktionen die physikalische Prozeß-Gleichungen lösen und in frames dargestellt werden können. Die *frames* können sich auch aus Wavelets zusammensetzen, (– also Wavelet-frames –) aber werden dann linear abhängig sein.

Da nach einer Koordinaten-Transformation des phänomenologischen Phasenraumes eine Darstellung entsteht, die nur noch sehr wenig an die Struktur aus Wavelet-Basen der Packet-Dekomposition oder an die Wavelet-Transformation selbst erinnern wird, ist voraussichtlich die Theorie der generalisierten frames anzuwenden [Vol95].

In Abschnitt 4.3.4 ist gezeigt wie aus den Differentialquotienten auf dem tiefsten DownSample-Niveau (– auch als “Differential-Noten” bezeichnet –) eine MRA up-gesampelet werden kann, in der die Aussage (I) gilt. Somit werden in den einzelnen Packets Differentialquotienten approximiert die zu einer Differentialgleichungs-Näherung mit dem Signal als Lösung führen [AW97].

Soweit der aus den Differential-Quotienten aufgespannte Phasenraum keiner Koordinaten-Transformation unterzogen wurde, handelt es sich um eine phänomenologische Beschreibung.

Für das Signal können wegen der frei wählbaren Potentialfunktion ϕ (3-3.47) viele verschiedenen phänomenologische Phasenräume gebildet werden, in denen mit Sub-frames Prozesse erfaßbar sind.

Eine Koordinaten-Transformation kann die phänomenologische System-Beschreibung verschiedene physikalische Realisierungen überführen, je nachdem welche physikalischen Gesetzmäßigkeiten in dem realen System erzwungen werden müssen [XS95].

Demnach können aus der phänomenologischen Beschreibung durch eine Änderung des Satzes vorgegebener physikalischer Gesetze mit der Koordinaten-Transformation verschiedene physikalische Realisierungen gewonnen werden. Das bedeutet: Das untersuchte Signal kann z.B. durch einen CSTR erzeugt werden. Es ist aber auch denkbar, eine elektronische Schaltung zu entwerfen die dieses Signal erzeugt. Beide physikalischen Realisierungen, also der CSTR und das elektronische Netz unterscheiden sich in den sie regierenden Gesetzen. Sie können als unterschiedliche physikalische Realisierungen der phänomenologischen Beschreibung (– ,hier als abstrakte übergeordnete System-Formulierung verstanden, –) interpretiert werden.

Eine Analogie kann in der Quantenmechanik konstruiert werden. Der Doppelspalt-Versuch kann auch im “Ein-Elektron-Experiment” (– einzelne Elektronen werden nacheinander auf den Doppelspalt geschossen und erzeugen das charakteristische Interferenzmuster [Nol94] –) realisiert werden. Ein Detektor registriert hinter dem Doppelspalt das Signal der nacheinander auftreffenden Elektronen, die zunächst chaotisch verteilt erscheinen.

Die Schrödinger-Gleichung [Lew94] charakterisiert das Verhalten der Elek-

tronen. Der Versuch zeigt die verschiedenen Realisierungen der Gleichung, die einmal mit einem Wellen- und zum anderen mit einem Teilchen-Ansatz gelöst werden kann. Anders interpretiert realisiert sich die Schrödinger-Gleichung (– als abstrakte übergeordnete Beschreibung –) einmal als Welle, und andererseits als Teilchen.

Analog sollte das Signal des Detektors in der MRA durch die Differentialgleichung approximiert werden und mit der Koordinaten-Transformation unter Vorgabe der entsprechenden physikalischen Gesetze auf verschiedene physikalische Realitäten führen. Einmal auf ein System das als Teilchen das Detektor Signal erzeugt, und zum anderen auf ein System das als Welle das gleiche Signal erzeugt. Hierbei ist die Welle und das Teilchen nicht als Lösung, sondern als System identifiziert. Das, was das Detektor-Signal erzeugt ist einmal ein Teilchen (als System) und ein andermal eine Welle (als System).

5.6 Ausblick

In Abschnitt 4 ist die Anwendung der Aussage (I) in der Multiresolution Analyse mit Haar Wavelets gezeigt worden. Die Aussage ist nicht auf Haar Wavelets-Basen beschränkt sondern sollte auch *frames* und Funktionen erfüllt sein mit den einen Multiresolution Analyse definiert werden kann. Dies ist insbesondere dann von Bedeutung, wenn durch eine Koordinaten Transformation die Wavelet-Basis in einen frame aus Funktionen überführt wird, indem sich nicht nur phänomenologische sondern auch physikalische Prozesse formulieren lassen. Außerdem ist das Verfahren nicht auf zweidimensionale Systeme und Signale beschränkt, es können auch zwei-dimensionale Signale(Bilder) bzw. drei und mehr dimensionale Systeme formuliert werden.

In dem Beispiel 4.3.4 wird Aussage (I) benutzt um Differentiale aus dem Signal zu extrahieren bzw. es in Differentiale zu zerlegen. Zusätzlich kann ein Maß konstruiert werden, das z.B Basis Pursuit [Coi92] als Synthese Kriterium übergeben wird. Auch kann die Standardabweichung in den Bildern von Abb. 4.15 als Maß für verwandt werden. Das Signal ist dann aus den Packets zu synthetisieren, für die die Aussage (I) optimal erfüllt ist. Umgekehrt kann das Maß benutzt werden um Funktionen aus einer Menge auszuwählen [CDS96].

In dem Beispiel kann das Signal durch ein Differentialgleichungssystem von zweiter Ordnung erzeugt werden. Dies impliziert das Ableitungen von höherer als zweiter Ordnung von denen niederer abhängen sollten. Sie sollten keine zusätzlichen Informationen formulieren können die nicht schon mit den Ableitungen zweiter Ordnung dargestellt sind. Dies beschränkt sowohl die Gültigkeit von Aussage (I), wie auch die Unabhängigkeit der Packets in einer Multiresolution Analyse.

In dem extremen aber unrealistischen Fall des tiefsten DownSampel-Niveaus würden nur drei Werte genügen um alle Packets der MRA und somit das vollständige dynamische System-Verhalten (– durch UpSampeln –) zu generieren.

Dies illustriert wie wichtig es ist, die Ordnung des zu erwartenden Differentialgleichungssystems zu bestimmen. Die Ordnung ist die Dimension der Fläche in Abb. 4.17.

Neben der Signalbeschreibung mit einer Differentialgleichung kann das Signal auch mit einer Serie von Polynomen approximiert werden. Im ersten Fall ist ein Signal derart generiert, indem dessen Werte und dessen Ableitungen durch Funktionen zu spezifischen Zeitpunkten gegeben sind.

Im letzten Fall reicht ein Satz diskreter Zahlen zu definierten Zeitintervallen aus. Dies erlaubt die Darstellung von Signalen, die nur schwer durch reguläre Funktionen zugänglich sind und zeigt eine Unabhängigkeit von festen Zeitintervallen. Unter diesem Gesichtspunkt sei erwähnt, das auf dem tiefsten DownSampel-Niveau in einem MRA nur ein Zeitintervall übrig bleibt. Die zeitliche Signallänge über dem gesamten Beobachtungszeitraum und die Packet Koeffizienten gelten in dem demselben Intervall. Das heißt das jede Form der Lokalisation eines

Signalmerkmals in der Zeit verschwindet. Dieser Umstand begründet sich durch eine Unschärfe-Relation, die dem Raum \mathcal{H} zugrunde liegt [BHW92]. So wie es eine Unschärfe-Relation zwischen einem Zeitintervall Δt und einer in diesem Intervall gemessenen Frequenz $\Delta t \Delta \omega = c$ gibt, sollte es eine entsprechende Relation zwischen einem Zeitintervall und einem in diesem Intervall lokalisierten Prozeß geben. Entweder kann das Intervall genau angegeben werden (auf dem höchsten DownSampel-Niveau), in dem ein Prozeß abgelaufen ist, oder der Prozeß kann durch einen Packet-Koeffizienten (auf dem tiefsten DownSampel-Niveau) exakt charakterisiert werden und ist dafür aber zeitlich nicht lokalisierbar.

Eine wesentliche Eigenschaft des beschreibenden Differentialgleichungssystems ist in der Arbeit nur beiläufig betrachtet. Es kann mit Transformationen der Variablen in äquivalente beschreibende Gleichungssysteme überführt werden. Die Lie-Theorie von Differentialgleichungen behandelt dies Gebiet. Es sein hier nur darauf hingewiesen, daß spezielle Transformationen das beschreibende Differentialgleichungssystem in andere beschreibende überführen können, bei dem die Differentialgleichungen aus vorgegebenen Gesetzen hergeleitet werden können. Das Differentialgleichungssystem entspräche demjenigen, welches aus dem Ersatzschaltbild im elektrischen Fall erhalten würde. Diese Transformation die das beschreibende Differentialgleichungssystem an die vermuteten Gesetze anpaßt, zu finden, ist eine weiter wichtige Aufgabe.

Die Entwicklung der Theorie der Multiresolution-Analyse zeigt in der Literatur zeigt folgende Richtung. Zum einen wird versucht auf verschiedenen Skalen Prozesse zu isolieren [Ste98] (ein Ansatz physikalische Prozesse zu isolieren konnte in der Literatur nicht gefunden werden) [MvSD98]. Es wird auch versucht mit phänomenologischen Prozessen Systeme zu identifizieren [LBK98], [TOS98] und [RPA98]. Zum anderen wird versucht die Bedingung der äquidistanten Abtastintervalle auf einer Skala mit einer Kommutator-Relation durch irreguläre Abtastraten zu ersetzen [DGS98].

Darüber hinaus haben sich verschiedene Institute in mit der Zielsetzung Theorien der redundanten mehrskaligen Darstellung von Information [IDR99] bzw. der Multiresolution-Analysen [TMR98] zu entwickeln in zwei Netzwerken formiert.

5.7 Anmerkung zur Konstruktion der System-Topologie

Ausgehend von den Signal kann natürlich nicht deduktiv auf eine Systemstruktur geschlossen werde. Durch den Meßvorgang in der Zeit wird nur die System-Dynamik erfaßt. Sämtliche Information der zeitlich invarianten System-Topologie ist dabei nicht erfaßt. Es drängt sich die Frage auf ob es prinzipiell möglich ist Signale so zu analysieren, das Aussagen über die System-Topologie gemacht werden können.

Wenn ein Signal nur begrenzte Information enthält, kann aus dieser auch nicht durch eine Transformation mehr gemacht werden. In diesem Sinn kann (3-1.9) so interpretiert werden, das durch die Transformation keine Information verloren geht, aber auch keine Information produziert wird.

Die topologische und dynamische Beschreibung eines Systems enthält tatsächlich mehr Information als z.B. eine Differentialgleichung der Dynamik. Die zeitlich invarianten topologischen Systemcharakteristika aus einem Signal zu deduktiv zu formulieren ist gleichbedeutend mit einer Produktion von Information. Dies würde aber nicht nur (3-1.9) verletzen sondern auch zu nicht eindeutigen Lösungen des Problems führen, deren Menge (–das wäre die Menge allen möglichen Netzwerk-Modelle die das Signal erzeugen können –) selbst Lösung des Inversen Problems ist und somit jede einzelne Lösung der Menge bedeutungslos wird.

Normalerweise wird diese Produktion der Information durch Annahmen unterstützt. Die Annahmen führen dazu die Lösungsmenge des Inversen Problems einzuschränken. Die verbleibenden Lösungen sind dann aber sehr durch den Charakter der Annahmen geprägt, und erfassen die physikalische Realität des Systems meist nur in dem Ausmaß, wie es durch die genutzten Annahmen nicht ausgeschlossen wird.

In der Vorgehensweise eine System-Topologie zu konstruieren wird die Aufgabe der Annahmen durch das ansetzen physikalischer Gesetze übernommen. Dies führt zu einer Strategie die Lösungsmenge des Inversen Problem derart einzuschränken, daß die verbleibenden Lösungen (– Netzwerk-Modelle des Systems –) durch die physikalischen Gesetze geprägt sind, welche etwa wie Randbedingungen als Auswahlkriterium zum Ansatz gebracht werden.

Der mathematische Formalismus läßt es zu, Gesetze als Zusammenhang zwischen generalisierten Koordinaten zu formulieren. Die generalisierten Koordinaten sind aber genutzt worden, um phänomenologische Prozesse (– differenzierbare zeitliche Vorgänge –) zu beschreiben.

Durch die Vorgabe von Gesetzen kann erzwungen werden, daß zeitlich differenzierbare Vorgänge als Prozesse erfaßt formuliert, die unter den physikalischen Bedingungen so ablaufen könnten.

Wenn diese Bedingungen für alle generalisierten Koordinaten erzwungen wer-

den, ist ein Signal als Ergebnis einer Synthese verschiedener Prozesse zu interpretieren, wobei die Prozesse physikalische Gesetze realisieren.

Auch wenn die in einem Zeitintervall isolierten differenzierbaren zeitlichen Phänomene Vorgänge simulieren, die durch physikalisch Gesetze realisiert sein könnten, muß das Signal nicht notwendigerweise durch diese “physikalischen Prozesse” erzeugt worden sein.

Außerdem ist die erzeugte MRA von der gewählten Potentialfunktion ϕ in (3-3.47) abhängig. Im Prinzip könnte sich für jede Potentialfunktion, mit der sich eine MRA erzeugen läßt auch ein Koordinatensystem aus physikalischen Prozessen als Systemdarstellung ergeben.

Für das Inverse Problem kann die Menge der Lösungen wesentlich eingeschränkt werden, indem in der Signalsynthese Gesetzmäßigkeiten erzwungen werden. Auf die verbleibenden Lösungen kann dann ein weiteres Selektionskriterium angewendet werden. Wir wenden dazu das von Igor Novikov [CN96] entwickelte Prinzip Selbstkonsistenz auf die Menge der Funktionen an, die eine Zustandsgleichung des Prozesses lösen bzw. die einen physikalischen Prozeß realisieren.

5.8 Mathematisches Test-System

Im mathematischen Test-Modell wurde eine Zeitreihe durch Vorgabe eines Differentialgleichungssystems erzeugt. Es wurde dafür ein Modell gewählt, das einem realistischen System nahe kommt. Um den umgekehrten Weg vom Signal zum Differentialgleichungssystem möglichs gut nachvollziehen zu können. Dabei wird angenommen, daß eine Messung das Zeit-diskretisierte Verhalten von genau einer Variable System-Variable ξ_1 zugänglich gemacht hat. In dem Phasenraum bildet diese eine Dimension, die orthogonal zu einer weiteren ξ_2 sein soll. In diesem Sinn bezeichnen wir die Messung von ξ_1 als “rein” (– in Anlehnung des Begriffs des “reinen Zustandes” –), da in ihr keine Anteile von ξ_2 enthalten sind.

Für den speziellen Fall, in dem eine “reine” System-Variable verfügbar ist, sind die Berechnungen der Phasendarstellungen in Abschnitt 4.2 und 4.3 durchgeführt, über den differentiellen und integralen Zusammenhang der Variablen des System (– wie im Modell gegeben in Form einer Differentialgleichung –) konnte die jeweils fehlende berechnet werden, wobei eine Eigenschaft von Relaxationsoszillationen ausgenutzt wurde. Bei ihnen ist $\xi_2 \approx \xi_1$

Die Variablen ξ_1 bzw. ξ_2 unterscheiden sich durch ihre Differenzierbarkeit charakteristisch vom Rauschen. Für eine reine Variable kann eine Regel angegeben werden, die den zeitlich kausalen Zusammenhang zwischen zwei Meßwerten ihrer diskreten Zeitreihe formuliert. Zum gegenwärtigen Zeitpunkt ist mir nicht bekannt wie so ein zeitlich kausaler Zusammenhang in z.B. stochastischem Rauschen formuliert werden kann (und nicht nur für Anteile wie in der Steganographie). Deshalb fassen wir dies in einer Aussage zusammen: “Rauschen ist nicht differenzierbar.”

Ein diskreter zeitlich kausaler Zusammenhang zwischen Meßwerten wie er z.B. in der Filtertheorie mit einem ARMA Prozeß beschrieben wird, bezeichnen wir als “phänomenologischen Prozeß”. Auch für die gemessene Zeitreihe in Abb. ??, ist so eine Approximation möglich. Sie führt auf einen phänomenologischen Prozeß, da das Signal keine Aussage über die tatsächlich ablaufenden physikalischen Prozesse zuläßt. Es sei denn man hat weitere Informationen über das System.

Wir Vermuten nun, daß es einen Zusammenhang zwischen phänomenologischen Prozessen und differenzierbaren Erscheinungen in der Signalinformation einer Messung gibt. Es ist anzunehmen, daß nur in seltenen Fällen “reine” Variablen gemessen werden könne. Außerdem ist es bei unbekannter System–Struktur nie möglich festzustellen ob eine reine Systemvariable gemessen wurde oder ob gegebenenfalls auch noch andere Größen die gemessenen hineingefalten worden sind.

Im Test ist ein Differentialgleichungssystem gewählt, daß von einem “Continuous Stirred Tank Reactor” stammen könnte, der durch einen konstanten Fluß versorgt wird. Es wurde getestet, ob die linearen Anteile des Differentialgleichungssystems separiert werden können, um eine Funktion zu erhalten die die Abläufe im Reaktor beschreibt. Abb.4.8 zeigt das dies möglich ist. Da eine Messreihe nur eine Kurve darstellt, die charakteristische Funktion des Reaktors aber eine Funktion in den Variablen ξ_1 und ξ_2 ist, zeigt Abb.4.9 die theoretische Fläche über x_1 und x_2 , in der die Meßreihe nach abtrennen der linearen Anteile eine Kurve wird.

Die Nullklinen sind die rechten Seiten des Differentialgleichungssystems. Für sie sind für Relaxationsoszillationen im Phasendiagramm Approximationen zu finden. Sie sind die Schnittkurven der linearen Anteile mit der charakteristischen Fläche des Reaktors. Sie sind in Abb.4.9 in die theoretische Fläche eingezeichnet. Das Test-System zeigte, daß es möglich ist die Nullklinen-Approximationen aus nur einer Zeitreihe herzuleiten(Abschnitt 4.2.1).

Hieraus folgt für ein Experiment, daß der singuläre Punkt (– der Schnittpunkt beider Nullklinen –) geschätzt werden kann. Die ist für Bifurkationsexperimente ein wichtiger Ansatzpunkt. Außerdem lassen sich Mischexperimente planen, um Teile der Fläche der Reaktorfunktion zu bestimmen. Bei einem Mischexperiment hat man zwei Reaktoren, die im Fall der Relaxationsoszillationen lediglich mit unterschiedlicher Phase Schwingen. Gibt man zu einem Zeitpunkt einen Anteil des einen in den anderen, so springt im Phasendiagramm die Bahnkurve an eine definierte Stellen (– neue Anfangsbedingung –) von der aus sich das System wieder auf den Limit-Zyklus zubewegt. Auf diese Weise läßt sich gezielt ein Phasenportrait, wie in Abb.4.11 gezeigt, erzeugen, aus dem die Reaktorcharakteristik (4-2.2) approximiert werden kann.

5.9 Wavelets versus *frames*

In Abschnitt 4 wurden Berechnungen ausgeführt, die auf eine phänomenologische Beschreibung der Dynamik in Abb. 4.17. Die Dimensionen dieses Phasenraumes erfassen die sich zeitlich ändernden Konzentrationen chemischer Substanzen. Die System-Topologie, wie sie für den Modellmechanismus (2-3.32) in Abb. 2.3 gezeigt ist, kann mit dieser Basis nicht dargestellt werden. Dazu wären die Dimensionen weiter zu zerlegen um schließlich auf eine Darstellung verschiedener phänomenologischer Prozesse in verschiedenen Zeitintervallen und auf unterschiedlichen Skalen zu erhalten. In einem phänomenologischen Phasenraum kann das System genauso vollständig formuliert werden, wie in dem der aus physikalischen Prozessen aufgespannt wird. Beide Phasenräume (– also der phänomenologische und der physikalische –) lassen sich durch eine Koordinaten-Transformation ineinander überführen. Auf die Realisierung der Koordinatentransformation gehen wir unten ein.

Die Berechnung für den phänomenologischen Phasenraum ist mit Wavelets gemacht worden. Mit der Packet-De-Komposition kann sogar eine orthogonale Wavelet-Basis phänomenologischer Prozesse erzeugt werden. Wenn diese Basis einer Koordinatentransformation unterzogen wird, kann nicht erwartet werden, daß sich hinterher Wavelets finden lassen die zueinander auch noch orthogonal sind. Wir erwarten stattdessen analog den Eigenfunktionen der Quantenmechanik, integrierbare Funktionen die physikalische Prozeß-Gleichungen lösen und in frames dargestellt werden können. Diese frames können sich auch aus Wavelets zusammensetzen, (– also Wavelet-frames –) aber werden dann linear abhängig sein. Gerade die lineare Abhängigkeit der frame-Funktionen ermöglicht es einen physikalischen Prozeß (als Vektor) zu erfassen, der durch alternative Lösungen (formuliert durch die Menge der Linearkombinationen) realisiert werden kann.

ZOMBI PROZESS

FRAGE ?? Kann eine Lösungs-Schar mit einer linear abhängigen Funktionen formuliert werden

ZOMBI PROZESS

Da nach einer Koordinaten-Transformation des phänomenologischen Phasenraumes eine Darstellung entsteht, die nur noch sehr wenig an die Struktur aus Wavelet-Basen der Packet-De-Komposition oder an die Wavelet-Transformation selbst erinnern wird, kann die gestellte Aufgabe aus Abschnitt 1.2 mit Wavelets nicht bewältigt werden. Aus diesem Grund ist der die Theorie der generalisierten frames notwendig.

5.10 Abstrakte Beschreibung für physikalische Realisierungen

In Abschnitt 4.3.4 ist gezeigt wie aus den Differentialquotienten auf dem tiefsten DownSample-Niveau (– auch als “Differential-Noten” bezeichnet –) eine MRA up-gesampelet werden kann, in der die Aussage (I) gilt. Somit werden in den einzelnen Packets Differentialquotienten approximiert die zu einer approximierten Differentialgleichung mit dem Signal als Lösung führen.

Soweit der aus den Quotienten aufgespannte Phasenraum keiner Koordinaten-Transformation unterzogen wurde, handelt es sich um eine phänomenologische Beschreibung.

Für das Signal können wegen der frei wählbaren Potentialfunktion ϕ (3-3.47) viele verschiedenen phänomenologische Phasenräume gebildet werden, in denen mit Sub-frames Prozesse erfassbar sind.

Eine Koordinaten-Transformation kann die phänomenologische System-Beschreibung verschiedene physikalische Realisierungen überführen, je nachdem welche vorgebaren physikalischen Gesetzmäßigkeiten in dem realen-experimentellen System erzwungen werden sollen.

Demnach können aus der phänomenologischen Beschreibung durch eine Änderung des Satzes vorgegebener physikalischer Gesetze mit der Koordinaten-Transformation verschiedene physikalische Realisierungen gewonnen werden. Das bedeutet: Das untersuchte Signal kann z.B. durch einen CSTR erzeugt werden. Es ist aber auch denkbar, eine elektronische Schaltung zu entwerfen die dieses Signal erzeugt. Beide physikalischen Realisierungen, also der CSTR und das elektronische Netz unterscheiden sich in den sie regierenden Gesetzen. Sie können als unterschiedliche physikalische Realisierungen der phänomenologischen Beschreibung (– ,hier als abstrakte übergeordnete System-Formulierung verstanden, –) interpretiert werden.

Eine Analogie kann in der Konstruiert Quantenmechanik werden. Der Doppelspalt-Versuch kann auch im “Ein-Elektron-Experiment” (– einzelne Elektronen werden nacheinander auf den Doppelspalt geschossen und erzeugen das charakteristische Interferenzmuster [Nol94] –) realisiert werden. Ein Detektor registriert hinter dem Doppelspalt das Signal der nacheinander auftreffenden Elektronen, die zunächst chaotisch verteilt erscheinen.

Die Schrödinger-Gleichung charakterisiert das Verhalten der Elektronen. Der Versuch zeigt die verschiedenen Realisierungen der Gleichung, die einmal mit einem Wellen- und zum anderen mit einem Teilchen-Ansatz gelöst werden kann. Anders interpretiert realisiert sich die Schrödinger-Gleichung (– als abstrakte übergeordnete Beschreibung –) einmal als Welle, und andererseits als Teilchen.

Analog sollte das Signal des Detektors in der MRA die Differentialgleichung approximiert werden und mit der Koordinaten-Transformation unter Vorgabe der entsprechenden physikalischen Gesetze auf verschiedene physikalische Realitäten

führen. Einmal auf ein System das als Teilchen das Detektor Signal erzeugt, und zum anderen auf ein System das als Welle das gleiche Signal erzeugt. Hierbei ist die Welle und das Teilchen nicht als Lösung, sonder als System identifiziert. Das, was das Detektor-Signal erzeugt ist einmal ein Teilchen (System) und ein ander mal eine Welle (als System).

5.11 System-*frame* und Labor-*frame*

in das System wird ein frame reingelegt und durch a) Symmetrie Transformation mit der Physik gekoppelt b) durch gesetzte mit einer Eich-Transformation angeglichen. unter diesen Gesetzten muß das Signals selbst konsistent sein.

5.12 Physikalische *frames*

in einem frame werden Meßwerte von Prozessen sichtbar. diese Prozesse sind das auch selektiv störbar. wie das Exp zeigt ist in einem Packet ξ und im anderen $\dot{\xi}$

5.13 Kommutator Maß

die Kommutator Bedingung a) erzeugt Differentiale b) ordnet die frames zueinander an.

5.14 Existenz einer Dgl ist nicht notwendig

es ist nicht notwendig da für das System eine DGL existiert.

wenn ein keine Eigenfunktionen gibt dann keine Basis in \mathcal{H}

dann kann aus Differential-Noten auf dem untersten Niveau eine MRA generiert werden, die Differential-Quotienten generiert, die eine DGL approximieren, die als Lösung das Signal generiert. (vielleicht macht es die Natur ja auch so ...?)

5.15 nicht-stationäres, nicht-lineares und Kausalität

ist formulierbar ein ein frame Prozeß durch Messung oder durch Störung äußere Parameter einkoppelt und das Prozeß verhalten ändert. und über die Connectivity mit enderen Prozessen ein neues Signal generiert.

5.16 Koordinatentransformation auf die Reale Physik

mit der Lie-Gruppen Darstellung kann die K-T des DGL ausgeführt werden. Wenn bestimmt meßbare Kriterien erfüllt sind fällt der frame mit einer physikalischen Realität zusammen.

5.17 Connectivity

Die Connectivity kann als freie Funktion bestimmt werden. Auf dem Untersten Level ist dieser Zeit vollständig verschwunden und ein topologisches Netz der "Noten" kann formuliert werden.

5.18 Ausblick

In Abschnitt ?? ist die Anwendung der Aussage (I) in der Multiresolution Analyse mit Haar Wavelets gezeigt worden. Die Aussage ist nicht auf Haar Wavelets-Basen beschränkt sondern sollte auch *frames* und Funktionen erfüllt sein mit den einen Multiresolution Analyse definiert werden kann. Dies ist insbesondere dann von Bedeutung, wenn durch eine Koordinaten Transformation die Wavelet-Basis in einen frame aus Funktionen überführt wird, indem sich nicht nur phänomenologische sondern auch physikalische Prozesse formulieren lassen. Außerdem ist das Verfahren nicht auf zweidimensionale Systeme und Signale beschränkt, es können auch zwei-dimensionale Signale(Bilder) bzw. drei und mehr dimensionale Systeme formuliert werden.

In dem Beispiel 4.3.4 wird Aussage (I) benutzt um Differentiale aus dem Signal zu extrahieren bzw. es in Differentiale zu zerlegen. Zusätzlich kann ein Maß konstruiert werden, das z.B Basis Pursuit [Coi92] als Synthese Kriterium übergeben wird. Auch kann die Standardabweichung in den Bildern von Abb. 4.15 als Maß für verwandt werden. Das Signal ist dann aus den Packets zu synthetisieren, für die die Aussage (I) optimal erfüllt ist. Umgekehrt kann das Maß benutzt werden um Funktionen aus einer Menge auszuwählen [CDS96].

In dem Beispiel kann das Signal durch ein Differentialgleichungssystem von zweiter Ordnung erzeugt werden. Dies impliziert das Ableitungen von höherer als zweiter Ordnung von denen niederer abhängen sollten. Sie sollten keine zusätzlichen Informationen formulieren können die nicht schon mit den Ableitungen zweiter Ordnung dargestellt sind. Dies beschränkt sowohl die Gültigkeit von Aussage (I), wie auch die Unabhängigkeit der Packets in einer Multiresolution Analyse.

In dem extremen aber unrealistischen Fall des tiefsten DownSampel-Niveaus

würden nur drei Werte genügen um alle Packets der MRA und somit das vollständige dynamische System-Verhalten (– durch UpSampeln –) zu generieren.

Dies illustriert wie wichtig es ist, die Ordnung des zu erwartenden Differentialgleichungssystems zu bestimmen. Die Ordnung ist die Dimension der Fläche in Abb. 4.17.

Neben der Signalbeschreibung mit einer Differentialgleichung kann das Signal auch mit einer Serie von Polynomen approximiert werden. Im ersten Fall ist ein Signal derart generiert, indem dessen Werte und dessen Ableitungen durch Funktionen zu spezifischen Zeitpunkten gegeben sind.

Im letzten Fall reicht ein Satz diskreter Zahlen zu definierten Zeitintervallen aus. Dies erlaubt die Darstellung von Signalen, die nur schwer durch reguläre Funktionen zugänglich sind und zeigt eine Unabhängigkeit von festen Zeitintervallen. Unter diesem Gesichtspunkt sei erwähnt, das auf dem tiefsten DownSampel-Niveau in einem MRA nur ein Zeitintervall übrig bleibt. Die zeitliche Signallänge über dem gesamten Beobachtungszeitraum und die Packet Koeffizienten gelten in dem demselben Intervall. Das heißt das jede Form der Lokalisation eines Signalmerkmals in der Zeit verschwindet. Dieser Umstand begründet sich durch eine Unschärfe-Relation, die dem Raum \mathcal{H} zugrunde liegt. So wie es eine Unschärfe-Relation zwischen einem Zeitintervall Δt und einer in diesem Intervall gemessenen Frequenz $\Delta t \Delta \omega = c$ gibt, sollte es eine entsprechende Relation zwischen einem Zeitintervall und einem in diesem Intervall lokalisierten Prozeß geben. Entweder kann das Intervall genau angegeben werden (auf dem höchsten DownSampel-Niveau), in dem ein Prozeß abgelaufen ist, oder der Prozeß kann durch einen Packet-Koeffizienten (auf dem tiefsten DownSampel-Niveau) exakt charakterisiert werden und ist dafür aber zeitlich nicht lokalisierbar.

Eine wesentliche Eigenschaft des beschreibenden Differentialgleichungssystems ist in der Arbeit nur beiläufig betrachtet. Es kann mit Transformationen der Variablen in äquivalente beschreibende Gleichungssysteme überführt werden. Die Lie-Theorie von Differentialgleichungen behandelt dies Gebiet. Es sein hier nur darauf hingewiesen, daß spezielle Transformationen das beschreibende Differentialgleichungssystem in andere beschreibende überführen können, bei dem die Differentialgleichungen aus vorgegebenen Gesetzen hergeleitet werden können. Das Differentialgleichungssystem entspräche demjenigen, welches aus dem Ersatzschaltbild im elektrischen Fall erhalten würde. Diese Transformation die das beschreibende Differentialgleichungssystem an die vermuteten Gesetze anpaßt, zu finden, ist eine weiter wichtige Aufgabe.

Kapitel 6

Zusammenfassung

Systeme, die der Thermodynamik unterliegen, sind überall in der belebten und unbelebten Natur zu finden. Sie werden meist durch Differentialgleichungssysteme beschrieben, deren Lösungen die Dynamik des Systemverhaltens wiedergeben. Gerade für die komplexen Systeme, die in der belebten Natur angetroffen werden, stellt sich bei ihrer Analyse häufig die Frage, daß sich ein Teilaspekt über ein Signal (z.B. der zeitliche Verlauf an einem Fotometer) messen läßt und dieses Signal so auszuwerten ist, daß möglichst viele Informationen über das System erhalten werden. Hierzu wurde untersucht, inwieweit über die Signalanalyse mit generalisierten “frames” und speziell mit Wavelets Aussagen über die Struktur eines Systems zu erhalten sind. Für lineare Systeme gibt die Analyse von Signalen mit der Laplace-Transformation weitgehende Aussagen über die Systemstruktur. Sie ist deshalb in ihren Grundzügen noch einmal aufgeführt und besonders die Netzwerkfunktion herausgearbeitet, die Information über die Systemstruktur enthält, die aus Signalen zu gewinnen ist. An einem Beispiel einer elektrischen Schaltung ist das Prinzip der Analyse veranschaulicht und verdeutlicht, daß die beschreibende Netzwerkfunktion zwar ein Ersatzschaltbild (d.h. eine mögliche Vernetzung von Komponenten zu einem System) liefert, das die Dynamik des Systems vollständig wiedergeben kann, nicht aber seine reale Struktur.

In einem nächsten Schritt ist die Darstellung von Vernetzungen von elektrischen Schaltkomponenten zu Schaltbildern auf thermodynamische Systeme erweitert und hier besonders für chemische Reaktionssysteme hervorgehoben, indem ein biochemisches Stoffwechselmodell [Gol97] detaillierter ausgearbeitet ist. Es ist der Schaltplan und das Differentialgleichungssystem für die Dynamik (Kinetik) aufgestellt. Es handelt sich hierbei um ein nicht-lineares System, das durch ein autonomes Differentialgleichungssystem mit zwei unabhängigen Variablen dargestellt wird. Auf die Bedeutung von Tellegens Theoremen für Netzwerke, und insbesondere für die Vernetzung von thermodynamischen Systemkomponenten, wird eingegangen und auf die Zerlegung in zueinander orthogonale Unterräume hingewiesen, da auch in der Signalanalyse eine solche Zerlegung auftritt. Außerdem wird auf den Zusammenhang mit dem Prinzip der minimalen Entropieproduktion

verwiesen.

Für die Signalanalyse sind die wesentlichen Gesichtspunkte der generalisierten "frames" eine wesentliche Verallgemeinerung der Fourieranalyse noch einmal hervorgehoben. So ist dargestellt, daß als zentrale Eigenschaft ein Signal durch die Analyse in ein Spektrum zerlegt und aus dem Spektrum vollständig wiedergewonnen werden kann und daß hieran ein Analyse-, ein Synthese- und ein Metrik-Operator beteiligt sind. Weiterhin wird auf die Eigenschaften der Wahrscheinlichkeitsdichte, "resolution of unity", einschränkende Bedingungen und des Differenzierens von den Basisfunktionen eingegangen. Insbesondere ist die differenzierende Eigenschaft der Transformation erwähnt, da sie für die hier behandelte Systemanalyse von zentraler Bedeutung ist.

Bei Messungen ist im allgemeinen eine diskrete Zeitreihe von Daten gegeben, die spezielle Anforderungen an Abtastrate und Diskretisierung stellen, auf die hingewiesen wird. Schließlich werden die wesentlichen Aspekte der "Multiresolution" Analyse von Signalen abgehandelt, wobei die Paketzerlegung des Signals auf verschiedenen Skalen und die dazu notwendigen Unterräume und Operatoren aufgezeigt werden.

Im experimentellen Teil ist dann die Signalanalyse auf eine nicht-lineare Schwingung einer Relaxationsoszillation angewandt, um das System, das sie erzeugt hat, durch sie zu charakterisieren. Dabei ist zuerst ein mathematisches Testsystem, nämlich das eingangs erwähnte Modell für den biochemischen Stoffwechselweg, verwandt. Das zugehörige Differentialgleichungssystem ist mit Computerhilfe gelöst und ergibt für die zwei Variablen Zeitreihen (für die zeitlich langsam variierende Folgevariable und für die sich zeitlich schnell ändernde Steuervariable, die die Folgevariable regelt). Aus diesen beiden Zeitreihen soll die Information über das System zurückgewonnen werden, d.h. das Differentialgleichungssystem möglichst rekonstruiert werden. Im Phasenraum, in dem die beiden Signale (Zeitreihen) gegeneinander aufgetragen werden, lassen sich zwei Funktionen, die Nullklinen, finden, die das Differentialgleichungssystem schon weitgehend beschreiben. Für ihre Ermittlung sind Approximationsalgorithmen angegeben. Chemische Reaktionssysteme, wie das Stoffwechselmodell, lassen eine Darstellung in Form eines chemischen Durchflußreaktors zu, in der die Flußanteile (die umgebungsbestimmt sind) von dem eigentlichen Reaktionsgeschehen abgetrennt werden, das dann durch eine beschreibende Funktion charakterisiert werden kann. Mit den Zeitreihen ist diese Separation durchgeführt und gezeigt, daß Teile der beschreibenden Funktion rekonstruiert werden können. Da in der Realität meist nur eine Zeitreihe von einem System gemessen werden kann, soll unter der Annahme, das entweder nur die Folgevariable oder nur die Steuervariable gemessen wird, versucht werden, die jeweils andere Zeitreihe zu rekonstruieren. Ein Vergleich mit den tatsächlichen Zeitreihen zeigt, daß in beiden Fällen die Kurvenform sehr gut wiedergegeben wird, und somit auch die Nullklinen und die charakterisierende Funktion des Reaktors. Auf diese Weise kann ein beschreibendes Differentialgleichungssystem rekonstruiert werden, das als eine Lösung das Signal hat.

Als experimentelles Test-System ist die Zeitreihe der Relaxationsoszillation des chemischen Reaktionssystems von Belousov-Zhabotinsky verwandt und mit den gleichen Algorithmen wie das mathematische System behandelt. Hier ist angenommen, daß die Folgevariable gemessen und nunmehr das Rauschen der Messung zu berücksichtigen ist. Es ließ sich eine Phasenraumdarstellung aus der Messung rekonstruieren. Da die “Multiresolution”-Analyse zum Approximieren des Differentialquotienten der Folgevariablen eingesetzt wurde, ist eine Darstellung der Folgevariablen mit einer Taylorreihe auf verschiedenen Skalen durchgeführt (quasi wie ein Musiksignal durch Noten beschrieben wird). Das Signal wird bei Verwendung von vier Skalenebenen sehr gut wiedergegeben. Bei den “Multiresolution”-Analysen ist das Haar-Wavelet verwandt.

Experimentelle Signale sind oft verrauscht und somit schwierig zu differenzieren. *frames* bieten Techniken die Signale vom Rauschen zu reinigen. Ein Verfahren wird daher an einem Beispiel aufgezeigt.

In diesem Kontext ist die “Multiresolution”-Analyse (MRA) so gedeutet, daß ihre Basisfunktionen das Prozeßgeschehen auf der mikroskopischen Ebene widerspiegeln und aus diesem Geschehen durch Skalenveränderung das Signal erzeugt wird. Die Gesetze, die das Prozeßgeschehen beschreiben, sollten danach Relationen zwischen den Unterräumen der MRA darstellen, bei denen der Rotationsoperator eine Rolle spielt. Außerdem konnte eine spezielle Relation zwischen Unterräumen hergeleitet werden, die mit der differenzierenden Eigenschaft zwischen einigen Unterräumen zusammenhängt und durch eine Kommutatorrelation formuliert werden kann.

Literaturverzeichnis

- [AW97] K. Amaratunga and J.R. Williams. Wavelet-galerkin solution of boundary value problems. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 1997.
- [Bau92] Heinz Bauer. *Maß und Integrations Theorie*. NewYork: de Gruyter, 1992.
- [BHW92] J. Benedetto, C. Heil, and D. Walnut. Uncertainty principles for time-frequency operators. *Operator Theory: Advances and Applications*, 1992.
- [BJ76] George E. P. Box and Gwilym M. Jenkins. *Time series analysis : forecasting and control*. San Francisco, Calif. Holden-Day, 1976.
- [CB97] D. Coca and S.A. Billings. Continuous-time system identification for linear and nonlinear systems using wavelet decompositions. *International journal of bifurcation and chaos in applied sciences and engineering.*, 1997.
- [CD91] Frank M. Callier and Charles A. Desoer. *Linear System Theory*. Springer Verlag, 1991.
- [CDS96] S. Chen, D. Donoho, and M.A. Saunders. Atomic decomposition by basis pursuit. Technical report, IBM T.J. Watson Research Center, 1996.
- [Che95] S.S Chen. *Dissertation: Basis Pursuit*. PhD thesis, Stanford University, 1995.
- [Chu92] C.K. Chui. *Wavelet Analysis and its Applications*. Academic Press, 1992.
- [CN96] A. Carlini and I.D. Novikov. Time machines and the principles of self-consistency as a consequence of the principle of stationary action(ii): The cauchy problem for a self-interacting relativistic particle. *International Journal of Modern Physics*, 1996.

- [Coi92] M.V. Coifman, R.R. and Wickerhauser. Entropy-based algorithms for best-basis selection. *IEEE Transactions on Information Theory*, 1992.
- [Dau92] I. Daubechies. Ten lectures on wavelets. *SIAM Philadelphia PA.*, 1992.
- [DGS98] I. Daubechies, I. Guskov, and W. Sweldens. Commutation for irregular subdivision. Technical report, Bell Laboratories Lucent Technologies, Nov. 1998.
- [DI94] D. Donoho and Johnstone I. Ideal spatial adaptation via wavelet shrinkage. *Biometrika*, 1994.
- [DJ94a] D. Donoho and I.M. Johnstone. Adapting to unknown smoothness via wavelet shrinkage. Technical report, Department of Statistics Stanford University, 1994.
- [DJ94b] D Donoho and I.M. Johnstone. Ideal denoising in an orthonormal basis chosen from a library of basis. Technical report, Department of Statistics Stanford University, 1994.
- [Dob84] Guido Dobravsky. *Box-Jenkins und Exponential-Smoothing-Prädikatoren im theoretischen und praktischen Vergleich.* nn, 1984.
- [Don97] David Donoho. Software toolboxes of wavelab. <ftp://playfair.stanford.edu/pub/wavelab>, 1997.
- [Eig63] M. Eigen. Protonenübertrag, säure-basen-katalyse und enzymatische hydrolyse. teil i elementarvorgänge. *Angewandte Chemie*, 1963.
- [EKKO83] I.R. Epstein, K. Kustin, P. Kepper, and M. Orban. Oscillating chemical reactions. *The journal of chemical physics*, 1983.
- [FAH95] Gunter Faust, Jhon Agryis, and Maria Haase. *Die Erforschung des Chaos.* Vieweg, 1995.
- [GDLM88] A. Goldbeter, O. Decroly, Y.X. Li, and F. Moran. Finding complex oscillatory phenomena in biochemical systemes; an empirical approach. *Biophysical Chemistry*, 1988.
- [Gei74] Wolfgang Geiseler. *Erregungsphysiologische Phänomene an Auslösbaren und Periodischen Chemischen Reaktionen.* PhD thesis, Technische Hochschule Aachen, 1974.
- [GL72] A. Goldbeter and R. Lefever. Dissipative structures for an allosteric model. application to glycolytic oscillations. *Biophysical Journal*, 1972.

- [Gol90] G. Goldbeter, A. and Dupont. Allosteric regulation, cooperativity, and biochemical oscillations. *Biophysical Chemistry*, 1990.
- [Gol97] Albert Goldbeter. *Biochemical oscillations and cellular rhythms : the molecular bases of periodic and chaotic behaviour*. Cambridge [u.a.] : Cambridge University Press,, 1997. 0-521-59946-6 - ISBN 0-521-40307-3 (hd.).
- [GS85] S. Guisau and A. Shenitzer. The principle of maximum entropy. *The Mathematical Intelligencer, Springer-Verlag New York*, 1985.
- [Hak83] Herman Haken. *Synergetics An Introduction*. Springer-Verlag, 1983.
- [IDR99] IDR. Wavelet center for ideal data representation, 1999. <http://www.waveletidr.org/>.
- [Inc97] MathWorks Inc. *MatLab - The Language of Technical Computing*. The MathWoks Inc. Natick MA., 1997.
- [Jia97] Q. Jiang. Wavelet transform and orthogonal decomposition of l^2 space on the cartan domain $bdi(q = 2)$. *Transactions of the American Mathematical Society*, 1997.
- [JP95] Q Jiang and L Peng. Phase space, wavelet transform and toeplitz-hankel type operators. *Israel Journal of Mathematics*, 1995.
- [Kai92] G. Kaiser. An algebraic theory of wavelets. *SIAM J. Math. Anal.*, 1992.
- [Kai94] G Kaiser. *A Friendly Guide to Wavelets*. Birkhäuser, 1994.
- [LBK98] G.P. Liu, S.A. Billings, and V. Kadiramanathan. System identification ii - nonlinear system identification using wavelet networks. *Institution of Electrical Engineers: IEE conference publication*, Dec 1998.
- [Lew94] J. Lewalle. Wavelet transform of some equations of fluid mechanics. *Acta Mechanica*, 1994.
- [Maa94] P Maaß. Wavelet-projection methods for inverse problems. *Beiträge zur angewandten Analysis und Informatik*, 1994.
- [Mal98] S Malat. *A Wavelet Tour of Signal Processing*. Acad. Press, 1998.
- [MvSD98] Stephane Mallat, Rainer von Sachs, and D. Donoho. Estimating covariances of locally stationary processes: Convergence of best-basis methods. *Preprint*, Feb. 1998.

- [No194] W. Nolting. *Theoretische Physik Quantenmechanik Teil 1*, volume 5. Ulmen, 1994.
- [OD71] G.F. Oster and C.A. Desors. Tellegen's theorem and thermodynamic inequalities. *Journal of theoretical Biology*, 1971.
- [Ons31] L. Onsager. . *Phys. Rev.*, 38:2265, 1931.
- [OPK71] G. Oster, A. Perelson, and A. Katchalsky. Network thermodynamics. *Nature*, 1971.
- [P.C94] Sabatier P.C, editor. *Inverse problems versus an algebraic spectral method for nonlinear evolution equation*. Lapland Conference Proceedings, 1994.
- [PH98] M. Pawlak and Z. Hasiewicz. Papers - signal processing - nonlinear system identification by the haar multiresolution analysis. *Institute of Electrical and Electronics Engineers: IEEE transactions on circuits and systems*, Dec 1998.
- [Pri47] Ilya Prigogine. *Etude Thermodynamique des Processus Irreversibles*. Liege, 1947.
- [RPA98] A.N. Robertson, K.C. Park, and K.F. Alvin. Extraction of impulse response data via wavelet transform for structural system identification. *Journal of vibration and acoustics*, Sep. 1998.
- [SSS98] T.W. Simpson, H. Shimizu, and Gregory Stephanopoulos. Experimental determination of flux control coefficients in metabolic networks. *Biotechnology & bioengineering*, Dec. 1998.
- [Ste98] George Stephanopoulos. Wavelet-based modulation in control relevant process identification. *AIChE*, Feb. 1998.
- [TMR98] TMR. Tmr network : Wavelets and multiscale methods in numerical analysis and simulation, 1998. <http://dragon.ian.pv.cnr.it/wavelet/>.
- [TOS98] M. Takahashi, H. Ohmori, and A. Sano. System identification i - system identification based on wavelet packets decomposition. *Institution of Electrical Engineers: IEE conference publication*, Dec. 1998.
- [Vol95] H. Volkmer. Frames of wavelets in hardy space. *Analysis*, 1995.
- [Wil96] J.R. Wilson. Linear system theory. *Prentice Hall, Upper Saddle River, N.J.*, 1996.

- [XS95] Jingmin Xin and Akira Sano. Adaptive system identification based on generalized wavelet decomposition. *Applied mathematics and computation*, 1995.

Danksagung

Ich danke Herrn Prof.Dr. H.G. Busse für die Aufnahme in die Arbeitsgruppen sowie für die interessante Aufgabenstellung.

Der gesamten Arbeitsgruppe danke ich für die lockere Arbeitsatmosphäre. Speziell gilt mein Dank denen, die mir mit hilfreichen Hinweisen weitergeholfen haben.

Erklärung

Hiermit erkläre ich an Eides Statt, die vorliegende Arbeit unter Anleitung meines akademischen Lehrers und nur mit Hilfe der angegebenen Quellen selbständig angefertigt zu haben.

Kiel, den