

Universität Bremen

Partikelmethoden zur Datenassimilation in der Paläoozeanographie

Diplomarbeit im Studiengang Technomathematik
von
Matthias Bremer

Betreuerin: Prof. Dr. Angelika Bunse-Gerstner
AG Numerik (Fachbereich 3)

Zweitgutachter: Dr. André Paul
Geosystemmodellierung (Fachbereich 5)

Dezember 2010

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	6
2. Einführung in die Parameterschätzung	9
2.1. Problembeschreibung	9
2.2. Zwei-Box-Atmosphärenmodell	10
2.3. Parameteroptimierung	11
2.3.1. Tangent-lineare und adjungierte Modelle	13
2.3.2. Partikelfilter	17
2.3.3. Partikel-Schwarm-Optimierung	19
3. Partikelmethode zur Parameteroptimierung	21
3.1. Allgemeine Problembeschreibung	21
3.2. Partikelmethode	23
3.3. Kostenfunktionale und Gewichtungsfunktionen	24
3.4. Partikelfilter	26
3.4.1. Einführung	27
3.4.2. Bayes-Schätzung	29
3.4.3. Partikelauswahl und Sampling	31
3.4.4. Monte-Carlo-Sampling	33
3.4.5. Rejection Sampling (Verwerfungsmethode)	34
3.4.6. Importance Sampling	35
3.4.7. Sampling Importance Resampling (SIR)	36
3.4.8. Dichteschätzung	38
3.4.9. Konvergenz	39
3.5. Partikel-Schwarm-Optimierung	42
3.5.1. Informationsfluss zwischen den Partikeln	44
3.5.2. Konfiguration der PSO	44
3.5.3. Erweiterungen	45
3.5.4. Untersuchungen der PSO	46
3.5.5. Einfluss der Zufallszahlen	50
4. Anwendung der Partikelmethode auf Ozeanmodelle	51
4.1. Vier-Box-Modell der thermohalinen Zirkulation im Atlantik	51
4.1.1. Modellbeschreibung	51
4.1.2. Konstanten und Parameter	53
4.1.3. Experimente	54
4.1.4. Erzeugung eines geringeren Overturnings	55
4.1.5. Kostenfunktionale	57
4.1.6. Experimente mit der PSO	58
4.1.7. Experimente mit dem Partikelfilter	60
4.1.8. Beurteilung der Experimente	61
4.2. HANSE-Modell des Atlantik	65
4.2.1. Modellbeschreibung	65
4.2.2. Implementierung	67

4.2.3. Kostenfunktionale	67
4.2.4. Experimente	70
4.2.5. Experimente mit der PSO	74
4.2.6. Experimente mit dem Partikelfilter	74
5. Zusammenfassung	77
5.1. Rechenaufwand	77
5.2. Bewertung der Partikelmethode	77
5.3. Ausblick	78
A. Nomenklatur	80
B. Tabellen	80
Literatur	91

1. Einleitung

Die Paläoozeanographie ist das Teilgebiet der Geowissenschaften, das das Ziel hat, vergangene Zustände des Ozeans und die Wechselwirkung mit dem übrigen Erdsystem zu erforschen. Besonders interessant sind dabei Zeitabschnitte, in denen es rapide Veränderungen gab, aber auch Zeiten außergewöhnlicher Stabilität und die Ursachen der Zustände. Ein stabiler Zeitraum war zum Beispiel das Letzte Glaziale Maximum (LGM) vor etwa 20000 Jahren. Es dauerte mehrere tausend Jahre an.

Daten über klimageschichtlichen Ereignisse werden aus Klimaproxies gewonnen. Solche Proxies erlauben das indirekte Erheben von Klimadaten für Zeiträume, in denen es keine direkten Beobachtungen gab. Beispiele für Klimaproxies sind fossile Pollen, Eis- und Sedimentkerne. Die daraus gewonnenen Paläodaten sind, verglichen mit der direkten Messung, aber recht ungenau. Eine zusätzliche Schwierigkeit ist, dass nicht für alle Orte auf der Erde und alle Arten von Klimadaten Proxies zur Verfügung stehen. Ein einfaches Beispiel, das diesen Umstand verdeutlicht, ist die Niederschlagsmenge. Diese lässt sich heute mit geringem technischen Aufwand sehr genau messen. Für die Klimageschichte können diese Werte außerhalb der Polargebiete aber nur schwer ermittelt werden. Die Rekonstruktion von Daten dieser Art mit Hilfe mathematischer Modelle ist eine zentrale Aufgabe der vorliegenden Arbeit.

Ein wichtiges Werkzeug der Paläoozeanographie ist die mathematische Modellierung. Mathematische Klima- und Ozeanmodelle existieren dafür in unterschiedlicher Komplexität und finden hier Anwendung. Diese Modelle beinhalten immer auch physikalische Größen als variable Parameter. Die Parameter müssen aus Proxies gewonnen oder geschätzt werden. Für stabile Ozeanzustände sollen hier schwer oder gar nicht zugängliche Daten in Form von Parametern eines Ozeanmodells bestimmt werden.

Einen Ansatz für die Lösung des Problems liefert die Datenassimilation. Allgemein versteht man unter Datenassimilation das Angleichen eines numerischen Modells an gemessene Daten. Wird ein Ozeanmodell unter Verwendung der geschätzten Parameter fortwährend iteriert, so tritt nach hinreichend vielen Zeitschritten ein Gleichgewichtszustand, z.B. eine bestimmte Temperaturverteilung, ein. Dieser errechnete Gleichgewichtszustand kann mit einem Zustand aus Paläodaten verglichen werden. Dabei misst ein Kostenfunktional die Abweichungen. Dieses kann durch die Quadrate der Abweichungen zwischen dem Modellzustand y unter Verwendung bestimmter Parameter p und Messung \hat{y} beschrieben werden. Dann ist $J(p) = \|y - \hat{y}\|_2^2$ ein solches Kostenfunktional. Sind sich beide Zustände sehr ähnlich, sind auch die ermittelten Kosten gering und die der Modellierung zugrundeliegenden Parameter beschreiben die physikalischen Gegebenheiten gut. Es muss also das inverse Problem, Modellparameter zu finden, die das Kostenfunktional minimieren, gelöst werden. Ob solche Lösungen existieren und eindeutig sind, ist zunächst nicht klar.

Verbreitete Verfahren um das Assimilationsproblem anzugehen sind der Kalman-Filter und die linear-tangente Methode. Beide setzen die Kenntnis der Modellgleichungen und deren Linearisierung voraus. Bei sehr umfangreichen Klima- und Ozeanmodellen ist es aufwendig und fehleranfällig, die Gleichungen zu linearisieren. Es ist sogar denkbar, dass die Modellgleichungen in der Anwendung nicht bekannt sind und die Modellimplementierung als „Black Box“ betrachtet werden muss. Hier können Partikelmethoden helfen. Das Partikel ist eine Metapher für einen Punkt, der sich durch den Parameterraum bewegt. Durch Partikelmethoden lassen sich die Parameter simulationsbasiert, also durch direkte Anwendung in einem Modell, bestimmen. Ableitungen der Modellgleichungen werden dafür nicht benötigt, es genügt eine Implementierung des numerischen Modells.

Zwei Partikelmethoden werden hier untersucht: die Partikel-Schwarm-Optimierung und der Partikelfilter. Die Partikel-Schwarm-Optimierung sucht das Minimum eines Kostenfunktional durch Exploration des Parameterraums. Ein Partikel p_i wird dazu entsprechend einer Bewegungsgleichungen der Form

$$p_i(t + 1) = p_i(t) + v_i(t + 1)$$

von einem Iterationsschritt zum nächsten bewegt. Der Vektor v_i wird entsprechend der bereits gewonnenen Kenntnisse über die Kosten an bestimmten Stellen des Parameterraums gewählt. Diese Bewegungen finden tendenziell in die Richtung der besten bekannten Partikelpositionen statt. Bei einem stetigen Kostenfunktional kann man annehmen, dass in einer Umgebung des kostenbesten bekannten Punktes eine weitere Verringerung der Kosten möglich ist. In der Praxis wird die Partikel-Schwarm-Optimierung zur näherungsweise Lösung nichtlinearer Optimierungsprobleme benutzt. Sie ist in kurzer Zeit zu implementieren und eignet sich damit, um eine einfache Lösungsmethode für ein Optimierungsproblem bereitzustellen.

Der Partikelfilter verfolgt dagegen einen statistischen Ansatz und beschreibt sowohl die Zustände als auch die Parameter als Wahrscheinlichkeitsdichten. Dabei bilden die Partikel eine Stichprobe, die die zugrundeliegende Wahrscheinlichkeitsverteilung der Parameter widerspiegelt. Es wird genutzt, dass sich mit dem Satz von Bayes bedingte Wahrscheinlichkeiten gleichsam umkehren lassen. Aus der bedingten Wahrscheinlichkeit der Modellzustände unter verschiedenen Parametern lässt sich auf die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Parameter unter bestimmten Modellzuständen (Messungen) schließen. Das Maximum der Wahrscheinlichkeitsdichte kann dann als gesuchter Parameter interpretiert werden. Gleichzeitig liefert der Partikelfilter mit der ermittelten Verteilung ein Maß für die Güte der geschätzten Parameter. Anwendung findet der Partikelfilter u.a. in der Signalverarbeitung, der Positionsbestimmung und der Objektverfolgung.

Das Anliegen dieser Arbeit ist es, in numerischen Experimenten zu untersuchen, wie gut sich Partikelmethoden für die Parameterbestimmung in zwei unterschiedlich komplexen Ozeanmodellen eignen.

Die Partikelmethode sind teuer in Bezug auf die Rechenzeit. Eine Iteration eines aufwendigen Ozeanmodells bis zum Erreichen des Gleichgewichtszustandes ist sehr rechenintensiv. Hinzukommend benötigt vor allem der Partikelfilter viele Partikel um die Wahrscheinlichkeitsdichte im Parameterraum zu beschreiben. Die Partikel-Schwarm-Optimierung benötigt bei weniger Partikeln mehrere Iterationen, um das Minimum des Kostenfunktional anzunähern. Pro Iteration muss dabei für jedes Partikel das Gleichgewicht des Ozeanmodells ausgewertet werden. Die Matlab-Implementierungen dafür haben leicht eine Laufzeit von mehreren Tagen.

Weiterhin kann die Lösung des Assimilationsproblems uneindeutig sein. Die Partikelmethode dienen der Minimierung des Kostenfunktional. Besitzt das Kostenfunktional ein eindeutiges Minimum, arbeiten die Partikelmethode am effektivsten. Durch ungenaue Messdaten kann es passieren, dass das Kostenfunktional durch Parameter aus einem ganzen Gebiet des Parameterraums minimiert wird. Dann gibt es keine eindeutige Lösung der Parameterschätzung. Die Stärke des Partikelfilters ist, dass er Hinweise auf das Vorhandensein eines solchen Problems liefert. In der Partikel-Schwarm-Optimierung spiegelt sich das erst nach mehreren Schätzungen in einer hohen Varianz der Ergebnisse wider.

Die Arbeit ist wie folgt aufgebaut: Kapitel 2 stellt am Beispiel eines einfachen Atmosphärenmodells ein etabliertes Verfahren der Parameterschätzung, die tangent-lineare Methode, vor. Anschließend werden durch Anwendung auf das Beispielmotell der Partikelfilter und die Partikel-Schwarm-Optimierung eingeführt. Dadurch werden Fragen deutlich, die in den weiteren Kapiteln geklärt werden sollen.

Eine systematische Einführung und Untersuchung der Partikelmethode liefert Kapitel 3. Die Verfahren werden näher erläutert und analytisch untersucht. Anschließend werden in Kapitel 4 der Partikelfilter und die Partikel-Schwarm-Optimierung auf zwei unterschiedlich komplexe Modelle der thermohalinen Zirkulation im Atlantik angewendet. Untersucht wird, wie gut sich die Partikelmethode für die Parameterschätzung in Ozeanmodellen eignen. Kapitel 5 fasst abschließend die wesentlichen Ergebnisse zusammen.

2. Einführung in die Parameterschätzung

Anhand eines einfachen Atmosphärenmodells werden im Folgenden die Grundlagen der adjungierten Methode, des Partikelfilters und der Partikel-Schwarm-Optimierung gezeigt. Die adjungierte Methode findet bereits Anwendung in der Geomodellierung, benötigt allerdings Ableitungen des Modells $\mathcal{M} : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$, welches hier als Abbildung der Modellparameter und eines Anfangszustandes auf einen Modellzustand aufgefasst wird. In aufwendigen Modellen sind diese Ableitungen schwer zu erzeugen. Zwei simulationsbasierte Methoden, der Partikelfilter und die Partikel-Schwarm-Optimierung, kommen ohne Differentiation aus. Diese werden kurz vorgestellt und in den nächsten Kapiteln näher beleuchtet.

In der geowissenschaftlichen Modellierung trifft man häufig auf das Problem, dass es Parameter gibt, die nicht festgelegt sind und anhand anderweitig gewonnener Daten bestimmt werden müssen. In diesem Kapitel ist das Ziel der Datenassimilation, Werte für diese Parameter zu finden, so dass die durch das Modell erzeugten Daten mit den Messwerten möglichst gut übereinstimmen. Gemessen wird die Übereinstimmung anhand eines Kostenfunktional.

2.1. Problembeschreibung

Geomodelle werden oft parametrisiert, wenn physikalische Teilsysteme aus Komplexitäts- und Rechenzeitgründen nicht explizit modelliert werden. Das kann etwa der Fall sein, wenn Niederschlag in einem Modell berücksichtigt werden soll, die Physik des Niederschlagsverhaltens aber nicht ausreichend bekannt ist. Dann ist es möglich, den Niederschlag durch den Parameter Niederschlagswahrscheinlichkeit zu beschreiben. In paläoozeanographischen Modellen ist ein zusätzliches Problem die fehlende Kenntnis über viele Größen. Da die Daten durch Proxys gewonnen werden, können sie zusätzlich mit großen Fehlern behaftet sein.

Es soll untersucht werden, inwieweit sich Partikelmethoden zur Parameterschätzung in Modellen der Paläoozeanographie eignen. Die beiden Partikelmethoden, Partikel-Schwarm-Optimierung und Partikelfilter, haben einen unterschiedlichen Fokus. Die Partikel-Schwarm-Optimierung soll möglichst effektiv und mit geringem Fehler das globale Minimum eines Kostenfunktional finden, also eine Punktlösung liefern. Der Partikelfilter soll die Wahrscheinlichkeitsdichte im Parameterraum darstellen und damit ebenfalls die Minima eines Kostenfunktional approximieren. Der Partikelfilter liefert also nicht nur eine Näherung des Minimums eines Kostenfunktional, sondern auch Informationen, wie sehr man dem gefundenen Wert vertrauen kann.

Folgende Aspekte sind von Interesse:

- Was sind geeignete Kostenfunktionale?
- Lässt sich das globale Minimum eines Kostenfunktional finden?
- Konvergieren die Partikelmethoden gegen ein Kostenminimum?

- Ist dieses eindeutig?
- Wie verhalten sich die Partikelmethode bei stark unterbestimmten Problemen?

2.2. Zwei-Box-Atmosphärenmodell

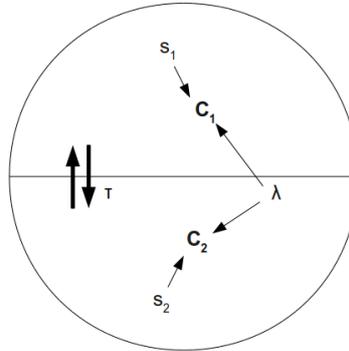


Abbildung 1: Schematische Darstellung des Zwei-Box-Atmosphärenmodells einer Tracerkonzentration in der nördlichen (c_1) und südlichen (c_2) Hemisphäre.

Ein einfaches geochemisches Zwei-Box-Modell zur Einführung in die hier betrachteten Methoden liefert Kasibhatla et al. (2000, [9]). Es werden die Konzentrationen eines Tracers in der Atmosphäre der Nord- und der Südhalbkugel betrachtet. Im konkreten Fall ist Methylchloroform (1,1,1-Trichlorethan, CH_3CCl_3) der Tracer, dessen Verhalten in der Atmosphäre modelliert wird. Die jeweilige Konzentration in den beiden Hemisphären hängt dabei von der Emissionsrate, dem Massenfluss zwischen den Hemisphären und der chemischen Lebenszeit des Tracers ab. Die zeitliche Ableitung der Tracermasse in einer Hemisphäre kann folgendemmaßen modelliert werden:

$$\begin{aligned} \frac{M}{2} \frac{d}{dt} c_1(t) &= \text{Emissionsrate} - \text{Massenfluss} - \text{chemische Abbaurate} \\ &= \tilde{s}_1(t) - \frac{M}{2} \frac{1}{\tau} (c_1(t) - c_2(t)) - \frac{M}{2} \frac{1}{\lambda} c_1(t). \end{aligned}$$

M ist dabei die Masse der gesamten Atmosphäre, c_1 die Tracerkonzentration in Teilchen pro Masseneinheit der nördlichen Hemisphäre, c_2 selbige in der südlichen Hemisphäre, τ die Durchmischungszeit und λ die chemische Lebenszeit des Tracers. Der Ausdruck $\frac{M}{2} c_1(t)$ beschreibt also die Masse des Tracers in der nördlichen Hemisphäre.

Geht man von einer konstanten Masse der Atmosphäre aus, kann die Gleichung mit $\frac{2}{M}$ multipliziert werden und man erhält

$$\frac{d}{dt} c_1(t) = s_1(t) - \frac{1}{\tau} (c_1(t) - c_2(t)) - \frac{1}{\lambda} c_1(t). \quad (1)$$

Dabei ist s_1 nun die relative Traceremission in der nördlichen Hemisphäre. Für die südliche Hemisphäre geht man analog vor und erhält

$$\frac{d}{dt}c_2(t) = s_2(t) - \frac{1}{\tau}(c_2(t) - c_1(t)) - \frac{1}{\lambda}c_2(t). \quad (2)$$

Dieses Tracer-Atmosphärenmodell ist in Abb. 1 schematisch dargestellt. Mithilfe des expliziten Eulerverfahrens erhält man diskretisierte Gleichungen c_1^d und c_2^d für die Tracerkonzentrationen mit einer Zeitschrittweite h :

$$\begin{aligned} c_1^d(t+h) &= c_1^d(t) + h \left(s_1(t) - \frac{1}{\tau}(c_1^d(t) - c_2^d(t)) - \frac{1}{\lambda}c_1^d(t) \right) \\ c_2^d(t+h) &= c_2^d(t) + h \left(s_2(t) - \frac{1}{\tau}(c_2^d(t) - c_1^d(t)) - \frac{1}{\lambda}c_2^d(t) \right) \end{aligned}$$

Anfangswerte $c_1^d(0)$ und $c_2^d(0)$ sind gegeben. Ebenfalls gegeben sind eine Tabelle mit der jährlichen Emission des Tracers in der nördlichen und der südlichen Hemisphäre von 1977 bis 1995 und eine Tabelle mit monatlichen Messwerten der Tracerkonzentration in der Atmosphäre von Juli 1978 bis Dezember 1995. Die erfassten Messwerte weisen allerdings einige Lücken auf.

Um die Stabilität der Diskretisierung zu gewährleisten, muss die Schrittweite h so gewählt werden, dass sich die Iteration im absoluten Stabilitätsgebiet des expliziten Eulerverfahrens $\{z \in \mathbb{C} \mid |1+z| < 1\}$ befindet. Dazu kann man (1) und (2) als

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix} + b$$

mit

$$A = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\tau} - \frac{1}{\lambda} & \frac{1}{\tau} \\ \frac{1}{\tau} & -\frac{1}{\tau} - \frac{1}{\lambda} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad b = \begin{pmatrix} s_1(t) \\ s_2(t) \end{pmatrix}$$

schreiben. Die Eigenwerte von A sind $\mu_1 = -\frac{1}{\lambda}$ und $\mu_2 = -\frac{2\lambda-\tau}{\lambda\tau}$. Damit muss

$$\left| 1 - h \cdot \frac{1}{\lambda} \right| < 1 \quad \text{und} \quad \left| 1 - h \cdot \frac{2\lambda - \tau}{\lambda\tau} \right| < 1$$

sein. Es folgt, dass die Zeitschrittweite h so gewählt werden muss, dass $h < 2\lambda$ und $h < \frac{2\lambda\tau}{2\lambda-\tau}$ gilt.

2.3. Parameteroptimierung

Im eben vorgestellten Modell gibt es zwei Parameter, die noch gewählt werden müssen. Das sind die Durchmischungszeit τ und die chemische Lebenszeit des Tracers λ , beide werden als zeitunabhängig angenommen. Mittels dieser Parameter soll das Atmosphärenmodell möglichst optimal an gegebene Messwerte angepasst werden. Zu diesem Zweck wird das Kostenfunktional

$$J(\tau, \lambda) = \sum_{t \in T} J_t(\tau, \lambda)$$

mit

$$\begin{aligned} J_t(\tau, \lambda) &= \frac{1}{2} \left\langle \left(\begin{array}{c} c_1^d(t) \\ c_2^d(t) \end{array} \right) - \left(\begin{array}{c} \hat{c}_1(t) \\ \hat{c}_2(t) \end{array} \right), \left(\begin{array}{c} c_1^d(t) \\ c_2^d(t) \end{array} \right) - \left(\begin{array}{c} \hat{c}_1(t) \\ \hat{c}_2(t) \end{array} \right) \right\rangle \\ &= \frac{1}{2} (c_1^d(t) - \hat{c}_1(t))^2 + (c_2^d(t) - \hat{c}_2(t))^2 \end{aligned} \quad (3)$$

gewählt. Dabei ist $\langle \cdot, \cdot \rangle$ das euklidische Skalarprodukt auf \mathbb{R}^2 und T die Menge der diskreten Zeitpunkte, für die das Kostenfunktional ausgewertet werden soll. Es wird also zu den Zeitpunkten $t \in T$ der quadratische „Abstand“ der numerisch ermittelten Konzentrationswerte $(c_1^d(t), c_2^d(t))^T$ von den Sollwerten $(\hat{c}_1(t), \hat{c}_2(t))^T$ ermittelt und aufsummiert.

Sind Anfangswerte $c_1^d(t_0)$ und $c_2^d(t_0)$ gegeben, lassen sich numerisch die Modelldaten $c_1^d(t)$ und $c_2^d(t)$ zu den Zeitpunkten $t = t_0 + i \cdot h$, $i \in \mathbb{N}$ berechnen. Diese Anfangswerte sollen hier den Beobachtungen $\hat{c}_1(t_0)$ und $\hat{c}_2(t_0)$ entsprechen. Weiterhin seien Beobachtungen zu späteren Zeitpunkten gegeben, z.B. $\hat{c}_1(t_2), \hat{c}_2(t_2)$ und $\hat{c}_1(t_4), \hat{c}_2(t_4)$. Das Optimierungsproblem ist dann

$$\min_{\tau, \lambda} J(\tau, \lambda) = \min_{\tau, \lambda} \sum_{t \in T} J_t(\tau, \lambda).$$

Es soll dabei T die Menge der Zeitpunkte sein, zu denen Messwerte in das Kostenfunktional einfließen.

Die Differenzen im Kostenfunktional (3) sind für gewöhnlich noch mit der Inversen der Fehlerkovarianzmatrix der Beobachtungen zu multiplizieren. Dadurch wird erreicht, dass Messfehler in den Beobachtungen berücksichtigt werden und die errechneten Kosten einheitenlos sind. Das ist vor allem wichtig, wenn Werte mit unterschiedlichen Fehlern, in unterschiedlichen Einheiten oder verschiedene Größen beobachtet werden, z.B. Konzentration in mol/kg und Geschwindigkeit in m/s. In der Praxis wird die Kovarianzmatrix nicht vollständig bekannt sein. Sie wird dann in der Regel durch eine Diagonalmatrix ersetzt, deren Diagonalelemente die entsprechenden Varianzen sind. Dann reduziert sich das Multiplizieren mit der Inversen der Fehlerkovarianzmatrix auf das Dividieren durch die Varianzen der Messwerte.

Die Vorgehensweise besteht gewöhnlich darin $\nabla_{\tau, \lambda} J$ zu bestimmen und Nullstellen zu finden. Für diskrete Zeitpunkte $t_i := t_0 + i \cdot h$, $i \in \mathbb{N}$ gilt

$$\begin{aligned} J_{t_i}(\tau, \lambda) &= \left(c_1^d(t_{i-1}) + h \left[s_1(t_{i-1}) - \frac{1}{\tau} (c_1^d(t_{i-1}) - c_2^d(t_{i-1})) - \frac{1}{\lambda} c_1^d(t_{i-1}) \right] \right. \\ &\quad \left. - \hat{c}_1(t_{i-1}) \right)^2 \\ &\quad + \left(c_2^d(t_{i-1}) + h \left[s_2(t_{i-1}) - \frac{1}{\tau} (c_2^d(t_{i-1}) - c_1^d(t_{i-1})) - \frac{1}{\lambda} c_2^d(t_{i-1}) \right] \right. \\ &\quad \left. - \hat{c}_2(t_{i-1}) \right)^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \nabla_{\tau,\lambda} J_{t_i}(\tau, \lambda) &= \left(\frac{\partial J_{t_i}(\tau, \lambda)}{\partial \tau}, \frac{\partial J_{t_i}(\tau, \lambda)}{\partial \lambda} \right) \\
 &= \left(2 \cdot \frac{h}{\tau^2} (c_1^d(t_{i-1}) - c_2^d(t_{i-1})) \right. \\
 &\quad \cdot \left(c_1^d(t_{i-1}) + h \left[s_1(t_{i-1}) - \frac{1}{\tau} (c_1^d(t_{i-1}) - c_2^d(t_{i-1})) - \frac{1}{\lambda} c_1^d(t_{i-1}) \right] \right. \\
 &\quad \left. \left. - \hat{c}_1(t_{i-1}) \right) \right. \\
 &\quad \left. + 2 \cdot \frac{h}{\tau^2} (c_2^d(t_{i-1}) - c_1^d(t_{i-1})) \cdot \right. \\
 &\quad \left(c_2^d(t_{i-1}) + h \left[s_2(t_{i-1}) - \frac{1}{\tau} (c_2^d(t_{i-1}) - c_1^d(t_{i-1})) - \frac{1}{\lambda} c_2^d(t_{i-1}) \right] \right. \\
 &\quad \left. \left. - \hat{c}_2(t_{i-1}) \right) \right), \\
 &2 \cdot \frac{h}{\lambda^2} c_1^d(t_{i-1}) \\
 &\quad \cdot \left(c_1^d(t_{i-1}) + h \left[s_1(t_{i-1}) - \frac{1}{\tau} (c_1^d(t_{i-1}) - c_2^d(t_{i-1})) - \frac{1}{\lambda} c_1^d(t_{i-1}) \right] \right. \\
 &\quad \left. \left. - \hat{c}_1(t_{i-1}) \right) \right. \\
 &\quad \left. + 2 \cdot \frac{h}{\lambda^2} c_2^d(t_{i-1}) \cdot \right. \\
 &\quad \left(c_2^d(t_{i-1}) + h \left[s_2(t_{i-1}) - \frac{1}{\tau} (c_2^d(t_{i-1}) - c_1^d(t_{i-1})) - \frac{1}{\lambda} c_2^d(t_{i-1}) \right] \right. \\
 &\quad \left. \left. - \hat{c}_2(t_{i-1}) \right) \right).
 \end{aligned}$$

Dies ist der Gradient zum Zeitpunkt t_i . Für einige Anwendungen zur Parameteroptimierung minimiert man allerdings ein Kostenfunktional, das aus einer Summe über mehrere Zeitschritte besteht.

$$\nabla_{\tau,\lambda} J(\tau, \lambda) = \left(\sum_{t \in T} \frac{\partial J_t(\tau, \lambda)}{\partial \tau}, \sum_{t \in T} \frac{\partial J_t(\tau, \lambda)}{\partial \lambda} \right)$$

Gleichzeitig benötigt man zur Bestimmung jedes Gradienten auch die entsprechenden Modellwerte, so dass einer Parameteroptimierung ein Modelllauf mit gleichzeitiger Aufzeichnung der Modellwerte vorangeht.

2.3.1. Tangent-lineare und adjungierte Modelle

Das im Folgenden beschriebene Verfahren dient dazu, den Gradient des Kostenfunktionals $\nabla_{\tau,\lambda} J_{t_i}$ für den Zeitpunkt t_i auf eine etwas andere Art zu berechnen. Kasibhatla et al. (2000, [9]) und Errico (1997, [6]) führen das Verfahren

der adjungierten Modelle auf unterschiedliche Weise ein. Giering und Kaminski (1999, [7]) stellen daneben auch eine Methode vor, die aus bestehendem Fortran-Modellcode den tangent-linearen und adjungierten Programmcode automatisch erzeugen kann. Diese Methode wird als automatische Differentiation bezeichnet. Sie beruht darauf, dass Implementierungen mathematischer Modelle als eine Verkettung elementarer Funktionen betrachtet werden. Die Ableitungen dieser Abfolge von Funktionen können, bei Kenntnis der Ableitungen der elementaren Funktionen, mit Hilfe der Kettenregel automatisch erzeugt werden. Dafür sind keine Approximationen durch Differenzenquotienten nötig. Der daraus resultierende „Tangent linear and Adjoint Model Compiler“ (TAMC) wird in vielen weiteren Arbeiten benutzt.

Im Zusammenhang der eben genannten Veröffentlichungen aus dem Bereich der Meteorologie und Klimatologie liegt in der Regel ein zeitdiskretes Modell in Form einer Abbildung $\mathcal{M} : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ vor. Es wird ein Anfangszustand $x \in \mathbb{R}^m$ auf einen Endzustand $y \in \mathbb{R}^m$ abgebildet. Dabei wird \mathcal{M} als Vorwärtsmodell oder auch als Modelloperator bezeichnet. Liegt eine Störung δx der Eingangsgröße von $y + \delta y = \mathcal{M}(x + \delta x)$ vor, so kann die Störung δy des Ausgangs durch

$$\delta y \approx A(x)\delta x$$

approximiert werden, wobei A die Jacobi-Matrix von \mathcal{M} an der Stelle x ist. Die Jacobi-Matrix wird auch linearer Modelloperator genannt. Das zeitdiskrete Modell \mathcal{M} kann man als Verknüpfung von Funktionen \mathcal{M}_n betrachten, die den Modellzustand des Zeitpunktes t_n auf den Zustand zum Zeitpunkt t_{n+1} abbilden:

$$\mathcal{M}(x) = \mathcal{M}_N \circ \mathcal{M}_{N-1} \circ \dots \circ \mathcal{M}_1 \circ \mathcal{M}_0(x).$$

Die Störungen des Modellzustandes $\delta y^{(n)}$ zum Zeitpunkt t_n lassen sich bei einer Anfangsstörung δx als Verkettung der Jacobi-Matrizen annähern:

$$\begin{aligned} \delta y &= \delta y^{(N)} \\ \delta y^{(n)} &= A_n(y_n)\delta y^{(n-1)} & N \geq n \geq 1 \\ \delta y^{(0)} &= A_0(x)\delta x \end{aligned}$$

Existieren die Jacobi-Matrizen A_n ($n = 0, \dots, N$) entlang der Modelltrajektorie, dann wird die Verkettung

$$A_N(y^{(N)}) \circ A_{N-1}(y^{(N-1)}) \circ \dots \circ A_2(y^{(2)}) \circ A_1(y^{(1)}) \circ A_0(x)$$

als tangent-lineares Modell bezeichnet. Dieses ist also aus stückweisen Linearisierungen des Modells \mathcal{M} zusammengesetzt und beschreibt die Empfindlichkeit des Endzustandes gegenüber Störungen des Anfangszustandes.

Das zum tangent-linearen Modell adjungierte Modell ist die Verknüpfung

$$A_0^*(x) \circ A_1^*(y^{(1)}) \circ A_2^*(y^{(2)}) \dots \circ A_{N-1}^*(y^{(N-1)}) \circ A_N^*(y^{(N)}).$$

Die zu A adjungierten Matrizen entsprechen den transponierten: $A^* = A^T$. Das tangent-lineare Modell kann als Abbildung von Störungen des Endzustandes auf Störungen des Anfangszustandes aufgefasst werden.

Das Verfahren der adjungierten Modelle lässt sich auf das Problem der Parameteroptimierung anwenden, indem das Vorwärtsmodell als Abbildung $\mathcal{M} : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$, $y = \mathcal{M}(p, x)$ eines Anfangszustandes x mit Parametern p auf einen Endzustand y betrachtet wird. Es werden dann Störungen δp der Parameter untersucht. Hier soll aber ein einfacherer Weg aufgezeigt werden.

Es soll das Kostenfunktional

$$J(p) = \frac{1}{2} \langle y - \hat{y}, y - \hat{y} \rangle = \frac{1}{2} \|y - \hat{y}\|_2^2$$

mit den Modellzuständen $y \in \mathbb{R}^m$ und den dazugehörigen Beobachtungen \hat{y} minimiert werden. $\mathcal{M} : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ sei die Funktion, die die Parameter $p \in \mathbb{R}^n$ des untersuchten Modells und den Anfangszustand $x \in \mathbb{R}^m$ auf die Modellwerte $y \in \mathbb{R}^m$ abbildet. Es ist

$$J(p) = \frac{1}{2} \langle \mathcal{M}(p, x) - \hat{y}, \mathcal{M}(p, x) - \hat{y} \rangle = \frac{1}{2} \|\mathcal{M}(p, x) - \hat{y}\|_2^2. \quad (4)$$

Durch Anwendung der Kettenregel erhält man den Gradient des Kostenfunktionals (4)

$$\begin{aligned} \nabla_p J(\hat{p}) &= \nabla_p \left(\frac{1}{2} \|\mathcal{M}(p, x) - \hat{y}\|_2^2 \right) \\ &= (\mathcal{M}(\hat{p}, x) - \hat{y})^T A(\hat{p}) \\ &= A^T(\hat{p}) (\mathcal{M}(\hat{p}, x) - \hat{y})^T \\ &= A^*(\hat{p}) (\mathcal{M}(\hat{p}, x) - \hat{y})^T. \end{aligned}$$

Die Matrix A^* entspricht dabei dem adjungierten Modell von \mathcal{M} bzgl. der Parameter. Dieses kann z.B. mit dem Modellcompiler TAMC automatisch erzeugt werden um den Gradient des Kostenfunktionals zu ermittelt. Das Minimum von J bezogen auf die Parameter p erhält man mit dem Gradientenverfahren.

Wird ein Assimilationsproblem mit Hilfe des adjungierten Modells gelöst, erlangt man keine Informationen über die Güte der geschätzten Parameter. Der Partikelfilter beschreibt hingegen die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Parameter und liefert eine Approximation der Wahrscheinlichkeitsdichte im gesamten Parameterraum.

Anwendung am Beispielmodell

Es soll ein Kostenfunktional J wie zuvor gewählt und bzgl. der Modellparameter τ und λ minimiert werden. Wie eben gezeigt, liefert das adjungierte Modell A^* liefert hierfür den Gradient $\nabla_{(\tau, \lambda)} J$.

Die oben definierte Abbildung \mathcal{M} ist nun für jeden Zeitpunkt t_i , $i \in \mathbb{N}$ folgendermaßen rekursiv definiert:

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{t_i}(\tau, \lambda) &= \begin{pmatrix} c_1(t_i) \\ c_2(t_i) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} c_1(t_{i-1}) + h(s_1(t_{i-1}) - \frac{1}{\tau}(c_1(t_{i-1}) - c_2(t_{i-1})) - \frac{1}{\lambda}c_1(t_{i-1})) \\ c_2(t_{i-1}) + h(s_2(t_{i-1}) - \frac{1}{\tau}(c_2(t_{i-1}) - c_1(t_{i-1})) - \frac{1}{\lambda}c_2(t_{i-1})) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Die Jacobi-Matrix, im Umfeld der Geomodellierung tangent-lineares Modell genannt, von \mathcal{M}_t an einer Stelle $(\hat{\tau}, \hat{\lambda})$ des Parameterraums ist dann

$$\begin{aligned} A_{t_i}(\hat{\tau}, \hat{\lambda}) &= \begin{pmatrix} \frac{\partial c_1(t_i)}{\partial \tau} & \frac{\partial c_1(t_i)}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial c_2(t_i)}{\partial \tau} & \frac{\partial c_2(t_i)}{\partial \lambda} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{h}{\hat{\tau}^2}(c_1(t_{i-1}) - c_2(t_{i-1})) & \frac{h}{\hat{\lambda}^2}c_1(t_{i-1}) \\ \frac{h}{\hat{\tau}^2}(c_2(t_{i-1}) - c_1(t_{i-1})) & \frac{h}{\hat{\lambda}^2}c_2(t_{i-1}) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

und die adjungierte Jacobi-Matrix bzw. das adjungierte Modell

$$A_{t_i}^*(\hat{\tau}, \hat{\lambda}) = \begin{pmatrix} \frac{h}{\hat{\tau}^2}(c_1(t_{i-1}) - c_2(t_{i-1})) & \frac{h}{\hat{\tau}^2}(c_2(t_{i-1}) - c_1(t_{i-1})) \\ \frac{h}{\hat{\lambda}^2}c_1(t_{i-1}) & \frac{h}{\hat{\lambda}^2}c_2(t_{i-1}) \end{pmatrix}.$$

Man erhält für den Zeitpunkt t_i den Gradienten der Kostenfunktion J wie folgt:

$$\begin{aligned} (\nabla_{\tau, \lambda} J(\hat{\tau}, \hat{\lambda}))_{t_i} &= A^*(\hat{\tau}, \hat{\lambda}) (\mathcal{M}(\hat{\tau}, \hat{\lambda}) - \hat{y}) \\ &= \begin{pmatrix} \frac{h}{\hat{\tau}^2}(c_1(t_{i-1}) - c_2(t_{i-1})) & \frac{h}{\hat{\tau}^2}(c_2(t_{i-1}) - c_1(t_{i-1})) \\ \frac{h}{\hat{\lambda}^2}c_1(t_{i-1}) & \frac{h}{\hat{\lambda}^2}c_2(t_{i-1}) \end{pmatrix} \\ &\quad \cdot \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1(t_{i-1}) + h(s_1(t_{i-1}) - \frac{1}{\hat{\tau}}(c_1(t_{i-1}) - c_2(t_{i-1})) - \frac{1}{\hat{\lambda}}c_1(t_{i-1})) \\ c_2(t_{i-1}) + h(s_2(t_{i-1}) - \frac{1}{\hat{\tau}}(c_2(t_{i-1}) - c_1(t_{i-1})) - \frac{1}{\hat{\lambda}}c_2(t_{i-1})) \end{pmatrix} \\ -\frac{1}{\hat{\lambda}}c_1(t_{i-1}) \\ -\frac{1}{\hat{\lambda}}c_2(t_{i-1}) \end{pmatrix} - \hat{y} \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{5}$$

Da $c_1(t_{i-1})$ und $c_2(t_{i-1})$ wiederum durch die Werte im vorherigen Zeitschritt festgelegt sind, müssen für die Berechnung von $(\nabla_{\tau, \lambda} J(\hat{\tau}, \hat{\lambda}))_{t_i}$ zunächst alle Werte $c_1(t)$ und $c_2(t)$ für $t \in \{t_0, \dots, t_i\}$ bestimmt werden.

Ein einfaches Beispiel soll die tangent-lineare Methode verdeutlichen. Es sei der Startwert $\hat{c}(t_0) = c(t_0) = \begin{pmatrix} 84 \\ 60 \end{pmatrix}$, die Emission $s = \begin{pmatrix} 40 \\ 1 \end{pmatrix}$ und der Messwert $\hat{c}(t_1) = \begin{pmatrix} 83 \\ 66 \end{pmatrix}$ nach einem Eulerschritt mit der Schrittweite $h = 0.5$ gegeben. Die Aufgabe ist es Parameter τ und λ zu finden, die das Kostenfunktional (4) für den Zeitpunkt t_1 minimieren.

Zunächst muss ein Modelllauf mit einer Anfangsschätzung für die Parameter erfolgen. Eine Schätzung, wie sie auch bei Kasibhatla et al. (2000, [9]) verwendet wird, ist $\tau = 1$ und $\lambda = 4.7$. Ein Zeitschritt ergibt

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{t_1}(1, 4.7) &= \begin{pmatrix} c_1(t_0) + h(s_1 - \frac{1}{\tau}(c_1(t_0) - c_2(t_0)) - \frac{1}{\lambda}c_1(t_0)) \\ c_2(t_0) + h(s_2 - \frac{1}{\tau}(c_2(t_0) - c_1(t_0)) - \frac{1}{\lambda}c_2(t_0)) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 83.064 \\ 66.117 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Eingesetzt in (5) erhält man den Gradienten

$$d := (\nabla_{\tau, \lambda} J(1, 4.7))_{t_1} = \begin{pmatrix} -0.636 \\ 0.439 \end{pmatrix}.$$

Nun kann man das Gradientenverfahren benutzen und das Kostenfunktional J in die Richtung $-d$ minimieren

$$\min_{\alpha > 0} J((\tau, \lambda) - \alpha d)$$

und iterativ fortfahren. Man erhält

$$\tau = 1.003 \quad \text{und} \quad \lambda = 4.645$$

als Parameter, die das Kostenfunktional J minimieren.

2.3.2. Partikelfilter

Partikelfilter sind eine Klasse probabilistischer Methoden, die es erlauben, die Parameter eines Modells durch Experimente anzupassen, indem die Parameter als Zufallsvariablen betrachtet werden. Stichproben der Parameter werden als Partikel bezeichnet, die Entnahme einer Stichprobe als Sampling.

Für einen Partikelfilter wird eine Grundgesamtheit X benötigt, die dem Parameterraum entspricht. Die Idee ist, eine Stichprobe aus X so zu ziehen, dass sie entsprechend der Wahrscheinlichkeit ein Kostenfunktional zu minimieren verteilt ist. Für das Zwei-Box-Modell kann so ein Kostenfunktional, analog zum Beispiel in Kapitel 2.3.1,

$$J(\tau, \lambda) = \frac{1}{2}(c_1(t_1) - \hat{c}_1(t_1))^2 + (c_2(t_1) - \hat{c}_2(t_1))^2$$

sein. Weiterhin wird eine Gewichtsfunktion benötigt, die diese Wahrscheinlichkeit beschreibt. Eine mögliche Funktion ist

$$w(\tau, \lambda) = p((\hat{c}_1, \hat{c}_2) | (\tau, \lambda)) = \exp\left(-\frac{1}{R}J(\tau, \lambda)\right),$$

die die Wahrscheinlichkeit, die vorgegebenen Werte \hat{c}_1 und \hat{c}_2 zu erreichen, beschreiben soll. Erzeugen τ und λ niedrige Kosten, so ist diese Parameterwahl

wahrscheinlicher, als eine, die hohe Kosten erzeugt. Der Faktor $R > 0$ bestimmt die Varianz der Gewichtsfunktion und damit, wie schnell die Gewichtsfunktion für steigende Kosten abfällt. Weiterhin wird eine initiale Wahrscheinlichkeitsverteilung des Parameterraums benötigt. Dieser entsprechend werden anfänglich die Parameter gezogen. Für das Beispielpblem ist $X =]0, 3] \times]0, 10]$ mit der Gleichverteilung als Anfangsverteilung p_0 eine mögliche Wahl. In die Einschränkung des Parameterraums und die Auswahl der Anfangsverteilung kann das Vorwissen, das man über das Modell hat einfließen. Das Vorgehen bei einem einfachen Partikelfilter lässt sich dann wie folgt am Beispiel erläutern:

1. Ziehen von N Stichproben $(\tau_i, \lambda_i)_{i \in \{1, \dots, N\}}$ aus dem Parameterraum $X =]0, 3] \times]0, 10]$ entsprechend der Anfangsverteilung p_0
2. Auswerten der Modellgleichungen $c^i(t_1) = \mathcal{M}(\tau_i, \lambda_i)$ für $i = 1, \dots, N$
3. Gewichtung der Partikel $w(\tau_i, \lambda_i) = \exp\left(-\frac{1}{R}J(\tau_i, \lambda_i)\right)$ und Normalisieren $w_i = \frac{w(\tau_i, \lambda_i)}{\sum_{k=1}^N w(\tau_k, \lambda_k)}$
4. while(Abbruchbedingung nicht erfüllt)
 - a) Resampling: Ziehe eine neue Stichprobe $(\tilde{\tau}_i, \tilde{\lambda}_i)_{i \in \{1, \dots, N\}}$ aus der Stichprobe $(\tau_i, \lambda_i)_{i \in \{1, \dots, N\}}$. Das geschieht indem Partikel (τ_i, λ_i) mit der Wahrscheinlichkeit w_i in die neue Stichprobe übernommen werden bis die neue Stichprobe wieder N Partikel umfasst.
Ersetze $(\tau_i, \lambda_i)_{i \in \{1, \dots, N\}}$ durch $(\tilde{\tau}_i, \tilde{\lambda}_i)_{i \in \{1, \dots, N\}}$
 - b) Um die Fehlervarianzen σ_τ^2 und σ_λ^2 in die Verteilung einzubringen, variiere die Partikel entsprechend der Normalverteilungen $\mathcal{N}(\tau_i, \sigma_\tau^2)$ und $\mathcal{N}(\lambda_i, \sigma_\lambda^2)$
Gleichzeitig wird dadurch eine lokale Suche nach kostengünstigeren Parametern erreicht
 - c) Bestimme w_i
5. Ausgabe der Partikelverteilung

Der Resampling-Schritt führt dazu, dass Partikel (τ_i, λ_i) mit kleinem Gewicht w_i aus der Stichprobe entfernt und Partikel mit hohem Gewicht vervielfacht werden. Nach der Anwendung des Partikelfilters wird die Partikeldichte um das Minimum der Kostenfunktion besonders hoch sein.

Anders als hier, kann auch ein Problem mit variablen Parametern vorliegen. Das ist in der Anwendung des Partikelfilters der häufigste Fall. So ein Problem kann z.B. die Objektverfolgung sein, bei der der Ort eines Objekts bestimmt werden soll. Unter Punkt 4b wird dann das zugehörige statistischen Bewegungsmodell ausgewertet und die Partikel entsprechend fortbewegt. Bei der statischen Parameteroptimierung sind die Parameter über die Laufzeit des

Modells konstant, das kann z.B. eine zeitlich konstante Albedo der Erdoberfläche sein. Dann wird durch das lokale Variieren der Parameter entsprechend einer Normalverteilung der Fehler modelliert. Dadurch kann ggf. ein Parameterpaar mit geringeren Kosten gefunden werden.

Das Verfahren kann leicht parallelisiert werden, da lediglich im Resampling-Schritt Informationen über alle Partikel benötigt werden. Alle anderen Schritte können in N parallelen Prozessen durchgeführt werden. Ein weiterer Vorteil ist, dass fertige Implementierungen des zu optimierenden Modells ohne große Änderungen zur Parameterschätzung benutzt werden können ohne dass Ableitungen bestimmt werden müssen. Dieser Vorteil kommt vor allem bei sehr komplexen Modellen, wie zum Beispiel bei Klimamodellen, zum Tragen. Nachteilig ist jedoch ein hoher Bedarf an Rechenleistung, da zur Bestimmung der Partikelkosten gewöhnlich das zugrundeliegende Modell ausgewertet werden muss.

2.3.3. Partikel-Schwarm-Optimierung

Ähnlich dem Partikelfilter ist die Partikel-Schwarm-Optimierung (PSO) eine simulationsbasierte probabilistische Methode. Der wesentliche Unterschied zum Partikelfilter besteht darin, dass statt einer Verteilung ein Optimum in Form eines Punktes im Parameterraum X gesucht wird. Anschaulich formuliert „bewegt“ sich jedes Partikel (τ_i, λ_i) mit $i \in \{1, \dots, N\}$ im Parameterraum vom Iterationsschritt t zum Iterationsschritt $t + 1$ entsprechend der Gleichung

$$(\tau_i, \lambda_i)(t + 1) = (\tau_i, \lambda_i)(t) + v_i(t + 1)$$

mit einer Geschwindigkeit $v_i(t + 1)$. Die Bewegung ist tendenziell in die Richtung der bisher kleinsten gefundenen Kosten gerichtet. Die Ergebnisse der Partikel in der Nachbarschaft werden in die „Partikelbewegung“ einbezogen. Ein einfacher Algorithmus der PSO für das Beispielmmodell ist der folgende:

1. Ziehe N Stichproben $(\tau_i, \lambda_i)(0)$, $i \in \{1, \dots, N\}$ aus dem Parameterraum $X =]0, 3] \times]0, 10]$, in dem das Optimum der Parameter vermutet wird
2. Setze die Anfangsgeschwindigkeiten für alle Partikel:
 $v_i(1) = (1.5 \cdot r_{1,i}, 5.0 \cdot r_{2,i})$ mit Zufallszahlen $r_{1,i}, r_{2,i} \in [0, 1]$
 Die Geschwindigkeit ist dadurch auf die Hälfte des Durchmessers der jeweiligen Parameterraumdimension beschränkt
3. Auswerten der Modellgleichungen $c^{(i)} = \mathcal{M}((\tau_i, \lambda_i)(0))$ für $i = 1, \dots, N$ und Bestimmen der Partikelkosten $J((\tau_i, \lambda_i)(0))$
4. Setze den Iterationsschritt $t = 0$,
 die Gewichtungen der Geschwindigkeitskomponenten
 $a_0 = 0.7, a_1 = 1.5, a_2 = 1.5$,
 die „kognitive“ Geschwindigkeitskomponente $k_i(0) = (\tau_i, \lambda_i)(0)$,
 die „soziale“ Geschwindigkeitskomponente $g(0) = \arg \min_{k \in \{k_i(0) : i \in \{1, \dots, N\}\}} J(k)$

5. while(Abbruchbedingung nicht erfüllt)

- a) Wähle Zufallszahlen $r_{1,1}, r_{1,2}, r_{2,1}, r_{2,2}$ aus $[0, 1]$
 Bewege die Partikel entsprechend der Gleichungen

$$\begin{aligned} v_i(t+1) &= a_0 v_i(t) \\ &\quad + a_1 \cdot (r_{1,1}, r_{1,2}) \cdot (k_i(t) - (\tau_i, \lambda_i)(t)) \\ &\quad + a_2 \cdot (r_{2,1}, r_{2,2}) \cdot (g(t) - (\tau_i, \lambda_i)(t)) \end{aligned}$$

$$(\tau_i, \lambda_i)(t+1) = (\tau_i, \lambda_i)(t) + v_i(t+1)$$

bei komponentenweiser Multiplikation

- b) Auswerten der Modellgleichungen $c^{(i)} = \mathcal{M}((\tau_i, \lambda_i)(t+1))$ für $i = 1, \dots, N$ und Bestimmen der Partikelkosten $J((\tau_i, \lambda_i)(t+1))$
 c) Setze die kognitive und die soziale Geschwindigkeitskomponente neu:

$$\begin{aligned} k_i(t+1) &= \begin{cases} (\tau_i, \lambda_i)(t+1) & , \text{ falls } J((\tau_i, \lambda_i)(t+1)) < J(k_i(t)) \\ k_i(t) & , \text{ sonst} \end{cases} \\ g(t+1) &= \arg \min_{k \in \{k_i(t+1): i \in \{1, \dots, N\}\}} J(k) \end{aligned}$$

d) $t=t+1$

6. Ausgabe: Parameter mit den geringsten Kosten

Der Term in 5a, der die Partikelgeschwindigkeit beschreibt, besteht aus drei Summanden, die jeweils als zentrale Komponenten der Partikel-Schwarm-Optimierung gesehen werden können. Der erste Summand beschreibt eine Art Trägheit, der zweite die Bewegung in Richtung der kleinsten vom Partikel i gefundenen Kosten und der dritte die Bewegung hin zum Minimum aller Partikelkosten.

3. Partikelmethoden zur Parameteroptimierung

Stärken der simulationsbasierten Partikelmethoden in der Parameterschätzung sind, dass sie sich leicht parallelisieren lassen und sich für nichtlineare Systeme ebenso gut eignen wie für lineare Systeme. Die Implementierung der Algorithmen ist in der Regel nicht besonders aufwändig und damit wenig fehleranfällig. Die Varianten des Partikelfilters bieten zudem eine Schätzung der A-posteriori-Wahrscheinlichkeitsdichte der geschätzten Parameter, wobei die Wahrscheinlichkeitsdichte mehrere Maxima aufweisen kann. Ein großer Nachteil der Partikelmethoden ist allerdings der hohe Rechenaufwand, dem aber durch die wachsende Leistung der verfügbaren Rechner entgegengewirkt werden kann. Partikelmethoden werden durch die Verfügbarkeit leistungsstarker Rechner gerade erst interessant bzw. immer interessanter.

Eine umfangreiche Aufsatzsammlung zu Partikelfiltern findet man in Doucet et al. (2001, [4]). Eine Einführung in die Partikelschwarmoptimierung liefern Clerc (2006, [2]) und Trelea (2003, [17]). Die Literatur zum Partikelfilter ist, bis auf sehr wenige Ausnahmen, in englischer Sprache verfasst. So wird dort der Begriff „Sampling“ für die Auswahl einer Stichprobe aus einer Grundgesamtheit entsprechend der zugehörigen Wahrscheinlichkeit benutzt. „Resampling“ ist das wiederholte Ziehen einer Stichprobe aus einer Ausgangsstichprobe, wobei der Stichprobenumfang in der Regel erhalten bleibt. Da diese Begriffe im Umfeld der Partikelmethoden oft gebraucht werden und vor allem das Resampling zur deutschen Fachsprache gehört, werden hier die englischen Begriffe synonym für die deutschen Formulierungen benutzt.

3.1. Allgemeine Problembeschreibung

Gegeben sei ein zeitdiskretes mathematisches Modell \mathcal{M} und ein Anfangszustand $y_0 \in \mathbb{R}^m$. Das Modell wird als Abbildung seines Parameterraums $X \subset \mathbb{R}^n$ und des Zustandsraums $Y \subset \mathbb{R}^m$ auf den Zustandsraum betrachtet.

$$\mathcal{M} : X \times Y \rightarrow Y \quad \mathcal{M}(x, y_t) = y_{t+1}$$

Es beschreibt somit den Modellzustand zum Zeitpunkt $t + 1$ bei einem bekannten Modellzustand zum Zeitpunkt t . Das Modell \mathcal{M} soll für einen konstanten Parameter $x \in X$ und einen Anfangszustand $y_0 \in \mathbb{R}^m$ nach $t < \infty$ Iterationen einen Gleichgewichtszustand erreichen, so dass $\mathcal{M}(x, y_t) = \mathcal{M}(x, y_s) = y$ für alle $s \geq t$ gilt. Abbildung 2 verdeutlicht das an einem Beispiel. Alle Zustände vor dem Eintreten des Gleichgewichtszustandes, also y_s mit $s = 1, \dots, t - 1$, werden in der Weise vernachlässigt, dass sie für die Parameteroptimierung keine Relevanz haben. Ist der Anfangszustand $y_0 \in Y$ für alle Modellläufe konstant gewählt, so kann \mathcal{M} als Abbildung der Parameter x auf den Gleichgewichtszustand y betrachtet werden:

$$\mathcal{M} : X \rightarrow Y \quad \mathcal{M}(x) = y$$

Gegeben seien weiterhin eine A-priori-Wahrscheinlichkeitsdichte für die unbekannten Parameter $p_0(X)$ und ein Kostenfunktional $J : \mathcal{M}(X) \times Y \rightarrow \mathbb{R}_+$.

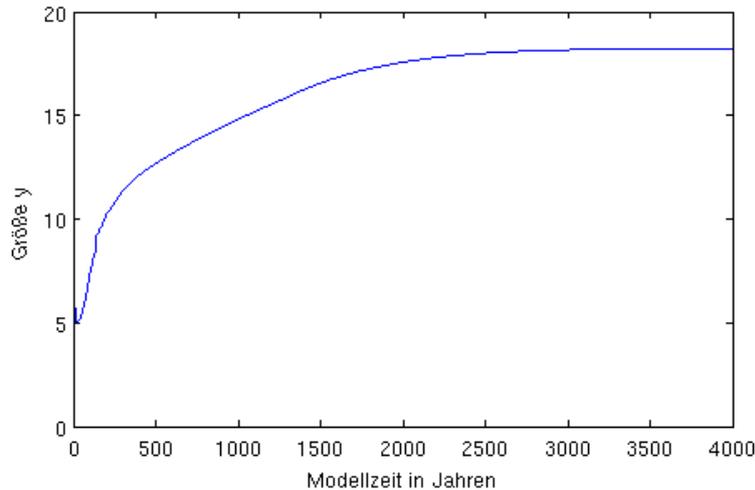


Abbildung 2: Beispiel eines geowissenschaftlichen Problems. Die Ergebnisse $y(t) = \mathcal{M}(x, t)$ sind von einem Parameter x abhängig. Der Anfangswert $y(0) = y_0$ ist festgelegt. Nach 3000 Modelljahren wird ein Gleichgewichtszustand erreicht. Es sollen Parameter x gefunden werden, so dass die Größe $y(T)$ mit $T \geq 3000$ einen bestimmten Wert \tilde{y} möglichst genau annimmt.

Gesucht werden Parameter $\tilde{x} \in X$, die das Kostenfunktional für ein geowissenschaftliches Modell \mathcal{M} und einen vorgegebenen Gleichgewichtszustand \tilde{y} minimieren. Also

$$\tilde{x} = \underset{x}{\operatorname{argmin}} J(\mathcal{M}(x), \tilde{y}).$$

Aus mathematischer Sicht handelt es sich bei der Parameteroptimierung in der Paläoozeanographie um ein inverses Problem, welches wie folgt definiert ist.

Definition 3.1 (Direktes und inverses Problem). *Sei $D \subset \mathbb{R}^n$ und $F : D \rightarrow \mathbb{R}^m$ eine gegebene Abbildung. Ein direktes Problem liegt vor, wenn zu einem $x \in D$ ein $y \in \mathbb{R}^m$ gesucht ist, für das $y = F(x)$ gilt. Ein inverses Problem liegt vor, wenn zu gegebenem $y \in \mathbb{R}^m$ ein $x \in D$ gesucht ist, für welches $F(x) = y$ gilt.*

Im Gegensatz zu direkten Problemen müssen inverse Probleme keine eindeutige Lösung besitzen. Es kann sich um ein schlecht gestelltes Problem handeln.

Definition 3.2 (Gut bzw. schlecht gestelltes Probelem nach Jacques Hadamard). *Ein inverses Problem wie in Definition 3.1 heißt gut gestellt, wenn es die folgenden Bedingungen erfüllt.*

1. *Existenz: Zu jedem $y \in \mathbb{R}^m$ gibt es ein $x \in D$, welches das inverse Problem löst.*

2. *Eindeutigkeit: Die Lösung $x \in D$ ist eindeutig bestimmt.*
3. *Stabilität: Bzgl. der Normen in D und \mathbb{R}^m hängt die Lösung $x \in D$ stetig von den Daten $y \in \mathbb{R}^m$ ab, d.h.*

Für jede Folge $(x_n) \subset D$ mit $\lim_{n \rightarrow \infty} F(x_n) = F(x)$ folgt $\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = x$.

Ist eine der Bedingungen nicht erfüllt, so heißt das Problem schlecht gestellt.

Um eine Parameterschätzung mithilfe der Partikelmethoden überhaupt zu ermöglichen, sollte Stabilität zumindest fast überall gegeben sein. In der Paläo-ozeanographie ist die Eindeutigkeit ein besonderes Problem. Fließen zu wenige Beobachtungen in das zu minimierende Kostenfunktional ein, kann es vorkommen, dass es kein eindeutiges Minimum gibt. Das Modell ist in dem Fall unterbestimmt und man erhält eine Lösungskurve oder ein Lösungsgebiet.

3.2. Partikelmethoden

Um Partikelmethoden gegenüber anderen Optimierungs- und Schätzverfahren abzugrenzen, müssen zunächst zwei Begriffe definiert werden. In der Literatur findet man in der Regel keine Definitionen von Partikel und Partikelwolke.

Definition 3.3 (Partikel). *Sei $\mathcal{M} : X \rightarrow Y$ eine Abbildung, $x \in X$ und w eine nichtnegative reelle Zahl, die auch als Gewicht bezeichnet wird. Ein Partikel im Sinn der Partikelmethoden ist ein Paar (x, w) .*

Ist das Gewicht w nicht von Bedeutung, kann der Wert $x \in X$ ohne Nennung des Gewichts als Partikel bezeichnet werden. Man erhält dann ein Partikel nach der obigen Definition durch Setzen von $w = 1$. Ein Partikel kann neben den genannten Werten allerdings noch weitere, wie den Zustand des Systems $\mathcal{M}(x)$, die Kosten $J(\mathcal{M}(x), y)$ oder die Entwicklung des Partikels über die Iterationen, enthalten. Die Kosten eines Partikels können gewöhnlich leicht in ein Gewicht überführt werden. Dazu reicht eine stetige streng monoton fallende Abbildung $g : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$. Für ein Kostenfunktional J gilt dann $w = g(J(\mathcal{M}(x), y))$. Das Gewicht erhält ein Partikel erst nach der Auswertung der Abbildung \mathcal{M} .

Oft ist die Entwicklung eines Partikels über einen iterativen Prozess von Interesse. Dann schreibt man für einen Partikel $(x(t), w(t))$ und meint mit $t \in \mathbb{N}$ den Iterationsschritt.

Definition 3.4 (Partikelschwarm / Partikelwolke). *Sei $\mathcal{M} : X \rightarrow Y$ eine Abbildung, $x_i \in X$ und w_i eine nichtnegative reelle Zahl für $i = 1, \dots, N$. Ein Partikelschwarm bzw. eine Partikelwolke ist eine Ansammlung von Partikeln $(x_i, w_i)_{i \in \{1, \dots, N\}}$.*

In einer Partikelwolke können zwei und mehr identische Partikel vorhanden sein. Wertet man mit $N > 1$ Partikeln $(x_i, w_i)_{i \in \{1, \dots, N\}}$ eine Abbildung $\mathcal{M}(x)$ aus und passt die Werte $x_i \in X$ der Partikel entsprechend einer Vorschrift, die von den Ergebnissen der Modellauswertung abhängt, an, so handelt es sich um eine Partikelmethode.

3.3. Kostenfunktionale und Gewichtungsfunktionen

Um die Güte einer Parameterschätzung angeben zu können, wird ein Kostenfunktional herangezogen. Dieses soll eine schlechte Schätzung mit hohen Kosten und eine gute Schätzung mit niedrigen Kosten bewerten. Eine dafür geeignete Definition eines Kostenfunktionals ist die folgende:

Definition 3.5 (Kostenfunktional). *Es sei ein Parameterraum X , ein Datenraum Y sowie ein Vorhersagemodell $\mathcal{M} : X \rightarrow Y$ gegeben. Eine Abbildung $J : X \times Y \times Y \rightarrow \mathbb{R}_+$ heißt Kostenfunktional, wenn gilt*

$$y = \mathcal{M}(x) \quad \Rightarrow \quad J(x, y, \mathcal{M}(x)) = 0.$$

Ist klar, um welche Beobachtungen $y \in Y$ und welches Modell \mathcal{M} es sich handelt, wird im weiteren Verlauf $J(x)$ statt $J(x, y, \mathcal{M}(x))$ verwendet. Die Kosten der Parameter x werden vor allem durch die Differenz $y - \mathcal{M}(x)$ beschrieben. Bei $x \in \mathbb{R}^M$, $y \in \mathbb{R}^K$ und der Varianz σ_i^2 des i -ten Messwertes sind mögliche Kostenfunktionale:

- das quadratische Kostenfunktional (Abbildung 3(a))

$$J(x, y) = \sum_{i=1}^K \frac{(y_i - (\mathcal{M}(x))_i)^2}{\sigma_i^2}, \quad (6)$$

- das lineare σ^2 -unempfindliche Kostenfunktional (Abbildung 3(b))

$$J(x, y) = \sum_{i=1}^K \max \{0, |y_i - (\mathcal{M}(x))_i| - \sigma_i\}$$

- und das logarithmische σ^2 -unempfindliche Kostenfunktional (Abbildung 3(c))

$$J(x, y) = \sum_{i=1}^K \max \left\{ 0, \ln \left(\frac{|y_i - (\mathcal{M}(x))_i|}{\sigma_i} \right) \right\}. \quad (7)$$

Es kann vorkommen, dass die Messwerte y nicht im Bild des Modells \mathcal{M} liegen oder sich die Kostenfunktionale nicht eindeutig minimieren lassen. Diesem Problem kann man begegnen, indem man ein an das Tychonoff-Funktional angelehntes Kostenfunktional

$$J(x, y) = \sum_{i=1}^K \frac{(y_i - (\mathcal{M}(x))_i)^2}{\sigma_i^2} + \lambda \Phi(x, y)$$

wählt. Der erste Term, die Diskrepanz, bewertet die Abweichung der Modellwerte von den Messwerten. Das Regularisierungsfunktional Φ beinhaltet Annahmen und Kenntnisse über die anzupassenden Modellparameter. Das können

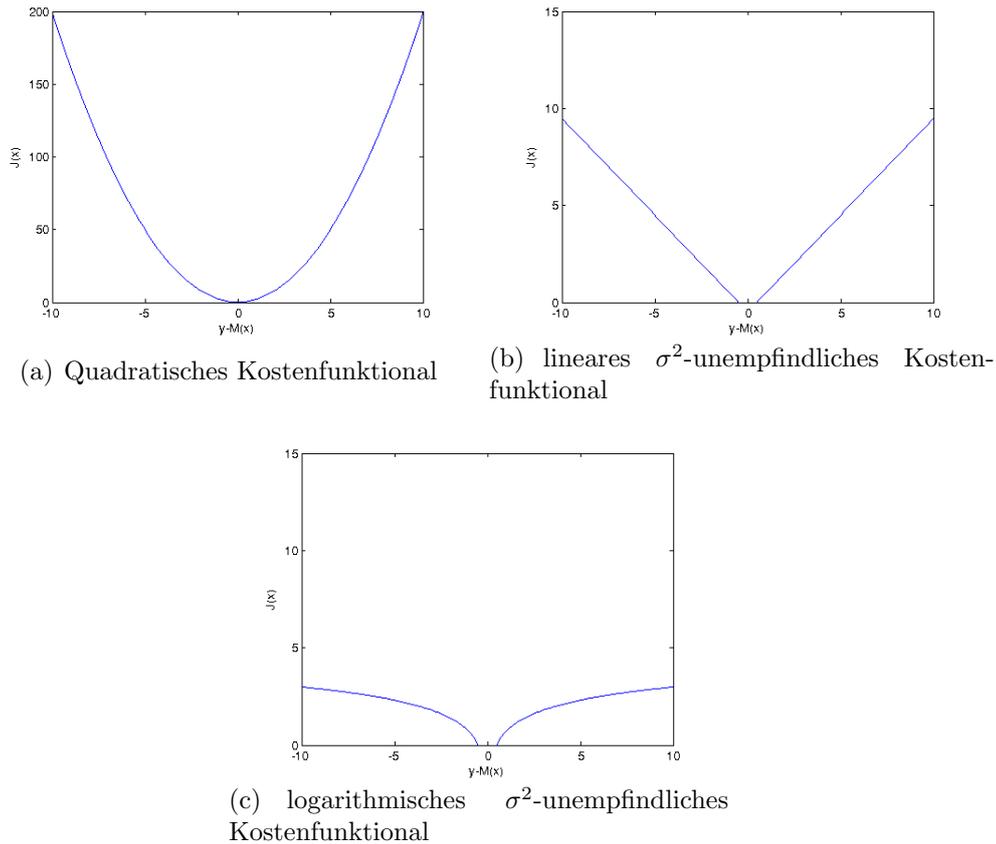


Abbildung 3: Verlauf verschiedener Typen von Kostenfunktionalen für $\sigma^2 = 0.5$ und $y - \mathcal{M}(x) \in \mathbb{R}$

zum Beispiel Anforderungen an die Glattheit sein. Es wird mit dem Faktor $\lambda \in \mathbb{R}_+$ gewichtet. Für einen stetigen linearen Operator \mathcal{M} existiert sogar ein Satz, der die Existenz einer Lösung der Minimierungsaufgabe garantiert. Dieser Satz ist für die Problemstellung in dieser Arbeit nicht anwendbar, da die verwendeten Operatoren nichtlinear sind.

Für die Anwendung des Partikelfilters ist es nötig Partikelkosten $J(x, y)$ in Partikelgewichte $w(x, y)$ zu transformieren. Die Gewichtsfunktionen sollen dabei stetig sein und folgende Eigenschaften aufweisen:

- $w(x, y) \geq 0$
- $J(x, y) = 0 \Rightarrow w(x, y) = \max\{w(\tilde{x}, \tilde{y}) : \tilde{x} \in X, \tilde{y} \in Y\}$
- $J(x, y) < J(\tilde{x}, \tilde{y}) \Leftrightarrow w(x, y) > w(\tilde{x}, \tilde{y})$

Eine Funktion, die diese Eigenschaften erfüllt, ist

$$w(x, y) = \exp\left(-\frac{1}{2R}J(x, y)\right). \quad (8)$$

Dabei ist $R \in \mathbb{R}$ ein Abklingfaktor, der bestimmt, wie stark hohe Kosten noch in die Gewichtung eingehen. Setzt man das quadratische Kostenfunktional (6) in (8) ein, so erhält man

$$\begin{aligned} w(x, y) &= \exp \left(-\frac{1}{2R} \sum_{i=1}^K \frac{1}{\sigma_i^2} (y_i - (\mathcal{M}(x))_i)^2 \right) \\ &= \left(\exp \left(-\frac{(y_1 - (\mathcal{M}(x))_1)^2}{\sigma_1^2} \right) \cdots \exp \left(-\frac{(y_K - (\mathcal{M}(x))_K)^2}{\sigma_K^2} \right) \right)^{\frac{1}{2R}} \end{aligned}$$

und mit dem logarithmischen Kostenfunktional (7)

$$\begin{aligned} w(x, y) &= \exp \left(\sum_{i=1}^K \max \left\{ 0, \ln \left(\frac{|y_i - (\mathcal{M}(x))_i|}{\sigma_i^2} \right) \right\} \right) \\ &= \exp \left(-\frac{1}{2R} \max \left\{ 0, \ln \left(\frac{|y_1 - (\mathcal{M}(x))_1|}{\sigma_1^2} \right) \right\} \right) \\ &\quad \cdots \exp \left(-\frac{1}{2R} \max \left\{ 0, \ln \left(\frac{|y_K - (\mathcal{M}(x))_K|}{\sigma_K^2} \right) \right\} \right) \\ &= \left(\min \left\{ 1, \frac{\sigma_1^2}{|y_1 - (\mathcal{M}(x))_1|} \right\} \cdots \min \left\{ 1, \frac{\sigma_K^2}{|y_K - (\mathcal{M}(x))_K|} \right\} \right)^{\frac{1}{2R}}, \end{aligned}$$

wenn man im Fall $|y_i - (\mathcal{M}(x))_i| = 0$ den Term $\frac{\sigma_K^2}{|y_i - (\mathcal{M}(x))_i|} = +\infty$ setzt.

3.4. Partikelfilter

Ein Problem vieler geowissenschaftlicher Modelle ist, dass die Ableitung einer durch Modelldaten erzeugten Kostenfunktion analytisch nicht oder schwer zu berechnen ist. Der Gradient bezüglich der Modellparameter ist nur über Differenzenquotienten zu schätzen, was bei einer hochdimensionalen Parameteroptimierung viel Rechenzeit in Anspruch nehmen kann. Die hier betrachteten Verfahren approximieren also keine Ableitungen, vielmehr sollen die zu optimierenden Parameter über probabilistische Wege gefunden werden. Ein Vorteil dieses Ansatzes ist, dass das physikalische Modell als Black-Box betrachtet werden kann.

Ein Partikelfilter ist eine stochastische Methode zur Schätzung nicht direkt zugänglicher innerer Zustände (Parameter) eines Systems anhand von Messungen. Sowohl die Messungen als auch die inneren Zustände werden als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert. Das unterscheidet die Partikelfilter deutlich von anderen Optimierungsverfahren, die lediglich einen Wert für das Optimum, ohne Berücksichtigung möglicher anderer Lösungen, liefern. Die Partikelfilter sollen genutzt werden, um das Optimierungsproblem in Kapitel 3.1 zu lösen. Ein generischer Partikelfilter für das Optimierungsproblem lässt sich durch folgendes Vorgehen beschreiben.

1. Erzeuge eine Partikelwolke $(x_i, w_i)_{i \in \{1, \dots, N\}}$ entsprechend einer A-priori-Wahrscheinlichkeitsdichte $p_0(X)$ und setze $w_i = 1$ für $i = 1, \dots, N$.

2. Werte das Modell \mathcal{M} mit den Parametern x_i ($i = 1, \dots, N$) aus.
Es ergeben sich Zustände $y_i = \mathcal{M}(x_i)$.
3. Gewichte die Partikel entsprechend ihrer Kosten $J(y_i)$.
4. Ändere entsprechend der Gewichtung die Zusammensetzung der Partikelwolke, so dass die Wahrscheinlichkeit, mit der ein Partikel auftaucht, seinem Gewicht entspricht
5. Gehe zu 2. falls die Abbruchbedingung nicht erfüllt ist

Die Wahrscheinlichkeitsdichte im Parameterraum wird durch die Partikelwolke approximiert. Die Anpassung der Partikel soll so geschehen, dass die Schätzung der Wahrscheinlichkeitsdichte möglichst gut ist. Durch die Betrachtung von Wahrscheinlichkeiten kann berücksichtigt werden, dass inverse Probleme, wie die vorliegenden, in der Regel nicht eindeutig lösbar sind.

3.4.1. Einführung

Die zu schätzenden Parameter $x \in X$ werden als verrauschter Zustand eines Systems betrachtet, der durch Messwerte $y \in Y$ zugänglich wird. Die Grundidee eines Partikelfilters ist, dass man eine gewisse Anzahl von unabhängigen Zufallsvariablen aus dem Parameterraum betrachtet, die die Wahrscheinlichkeitsverteilung des selbigen approximieren sollen. Die verschiedenen Partikelfilter-Algorithmen arbeiten so, dass die Menge der Partikel passend zum Problem generiert, gewichtet und entsprechend der zugrundeliegenden Modelle fortbewegt wird.

Aus diesem Grund folgt zunächst die Definition des zentralen Begriffs der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion. Als solche werden im Kontext eines Partikelfilter alle Modellgrößen interpretiert.

Definition 3.6 (Wahrscheinlichkeitsraum). *Ein Wahrscheinlichkeitsraum ist ein Tripel $\{\Omega, \mathcal{F}, P\}$, wobei \mathcal{F} eine σ -Algebra der Ergebnismenge Ω und P ein vollständiges, σ -additives Wahrscheinlichkeitsmaß von \mathcal{F} ist.*

Satz 3.1 (Radon-Nikodým). *Sei P eine σ -additive Funktion, μ ein Maß auf einer σ -Algebra \mathcal{F} und sei $P \prec \mu$. Dann existiert eine μ -integrierbare Funktion p , so dass für jede Menge $F \in \mathcal{F}$ gilt*

$$P(F) = \int_F p \, d\mu.$$

Ist \tilde{P} eine weitere Funktion mit dieser Eigenschaft, so stimmt sie μ -fast überall mit P überein. p heißt Radon-Nikodým-Dichte oder Radon-Nikodým-Ableitung von P bezüglich μ .

Definition 3.7 (Wahrscheinlichkeits(dichte)funktion). *Sei $p(x) = \frac{dP(x)}{d\mu}$ die Radon-Nikodým-Dichte der Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(x)$ bezüglich des*

Maßes μ . Ist $x \in X$ eine diskrete Zufallsgröße und μ das Zählmaß, so bezeichnet man $p(x)$ als Wahrscheinlichkeitsfunktion (pmf - probability mass function). Ist x eine kontinuierlich Zufallsgröße und μ das Lebesgue-Maß, so heißt $p(x)$ Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (pdf - probability density function)

Wird eine wahre Wahrscheinlichkeitsverteilung P durch simulierte Samples x_i beschrieben, so kann man die Wahrscheinlichkeitsverteilung mit

$$\hat{P}(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(x - x_i)$$

approximieren. Dabei ist δ die Radon-Nikodým-Dichte bezüglich des Dirac-Maßes. Es ist $\delta(x - x_i) = 0$ für $x \neq x_i$. Weiterhin ist für kontinuierliche Zufallsgrößen $\int \delta(x) dx = 1$ und für diskrete Zufallsgrößen $\sum_i \delta(x - x_i) = 1$.

Es wird ein dynamischer Prozess modelliert, der von Parametern x_i abhängt. Im hier untersuchten Fall der statischen Parameterschätzung reduziert sich der dynamische Prozess auf die Anfangs- und Endzustände, da nur für den Gleichgewichtszustand y_N Beobachtungen vorliegen.

$$\begin{array}{ccccccc}
 y_0 & \rightarrow & y_1 & \rightarrow & \dots & \rightarrow & y_N & & y_0 & \rightarrow & y_N \\
 \uparrow & & \uparrow & & & & \uparrow & \text{reduziert sich zu} & \uparrow & & \uparrow \\
 x_0 & & x_1 & & \dots & & x_N & & x_1 & & x_N
 \end{array}$$

Der erste Zustand repräsentiert die Initialisierung des Modells, der letzte Zustand den Gleichgewichtszustand des Modells, zu dem die Parameter x_N bestimmt werden sollen. Alle Zustände dazwischen sind hier unbekannt. Der dynamische Prozess wird durch zwei Funktionen beschrieben.

$$x_n = f_n(x_{n-1}, w_{n-1}) \tag{9}$$

$$y_n = h_n(x_n, v_n) \tag{10}$$

Die Funktion f_n beschreibt die zeitdiskrete Zustandsänderung, h_n bildet die Parameter auf den Beobachtungsraum ab. Dabei sind x_n der verborgene Zustand (Parameter), y_n die Beobachtung und w_n sowie v_n die entsprechenden Fehlervektoren. Gleichung (9) beschreibt die Wahrscheinlichkeit $p(x_n|x_{n-1})$ und Gleichung (10) $p(y_n|x_n)$.

Geschätzt werden soll die A-Posteriori-Dichte $p(x_n|y_{0:n})$ bei gegebener initialer Wahrscheinlichkeitsdichte $p(x_0)$, Übergangsdichte $p(x_n|x_{n-1})$ und der Likelihood-Funktion $p(y_n|x_n)$. Das geschieht nach folgendem Schema:

- Eine N Partikel umfassende Stichprobe $(x_i)_{i=1,\dots,N}$ wird entsprechend der Anfangsverteilung $p(x_0)$ aus dem Parameterraum X gezogen. Eine hohe Wahrscheinlichkeitsdichte führt dabei zu einer hohen Partikeldichte.
- Auswerten der Modellgleichungen $y_i = \mathcal{M}(x_i)$ für $i = 1, \dots, N$, Gewichtung der y_i durch die Likelihood-Funktion $p(y_n|x_n)$ und Ersetzen der Stichprobe $(x_i)_{i=1,\dots,N}$ durch eine N Partikel umfassende Stichprobe, die entsprechend der Likelihood-Funktion verteilt ist.

- Approximation der A-Posteriori-Wahrscheinlichkeitsdichte $p(x_n|y_{0:n})$ durch die Punktmasseverteilung der Partikel.

3.4.2. Bayes-Schätzung

Aus vorgegebenen Modellparametern $x \in X$ folgt ein bestimmter Gleichgewichtszustand $y \in Y$ des Modells. Dieser Gleichgewichtszustand wird im Zusammenhang der Bayes-Statistik als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert. Die Bayes-Schätzung ermöglicht es daraus eine Aussage über die Wahrscheinlichkeitsdichte der Parameter zu einem bestimmten Gleichgewichtszustand des Modells zu liefern. Somit begründet sie die Vorhersage der Parameterwerte $p(x|y)$ aus Messungen $p(y|x)$.

Die Bayes-Schätzung setzt voraus, dass die Parameter einen Markov-Prozess erster Ordnung bilden, d.h. es ist $p(x_n|x_{0:n-1}) = p(x_n|x_{n-1})$ für alle $n \geq 1$. Mit

$$p(A, B) = p(A|B)p(B),$$

der Umformung

$$\begin{aligned} p(A, B|C) &= \frac{p(A \cap B \cap C)}{p(C)} \\ &= \frac{p(A \cap B \cap C)}{p(B \cap C)} \frac{p(B \cap C)}{p(C)} \\ &= p(A|B, C)p(B|C) \end{aligned}$$

und dem Satz von Bayes

$$p(B|A) = \frac{p(A|B)p(B)}{p(A)}$$

folgt

$$\begin{aligned} p(x_n|y_{0:n}) &= \frac{p(y_{0:n}|x_n)p(x_n)}{p(y_{0:n})} \\ &= \frac{p(y_n, y_{0:n-1}|x_n)p(x_n)}{p(y_n, y_{0:n-1})} \\ &= \frac{p(y_n|y_{0:n-1}, x_n)p(y_{0:n-1}|x_n)p(x_n)}{p(y_n|y_{0:n-1})p(y_{0:n-1})} \\ &= \frac{p(y_n|y_{0:n-1}, x_n)p(x_n|y_{0:n-1})p(y_{0:n-1})p(x_n)}{p(y_n|y_{0:n-1})p(y_{0:n-1})p(x_n)} \\ &= \frac{p(y_n|x_n)p(x_n|y_{0:n-1})}{p(y_n|y_{0:n-1})}. \end{aligned}$$

Dabei beschreibt $p(x_n|y_{0:n-1})$ die A-Priori-Wahrscheinlichkeit für das Modell, die Likelihood-Funktion $p(y_n|x_n)$ die Modellauswertung mit der Berücksichtigung der Messfehler und $p(y_n|y_{0:n-1})$ die Fortentwicklung der Messungen. Es kann also aus den Wahrscheinlichkeitsdichten der Messungen und der Wahrscheinlichkeit der Parameter x_n bezüglich der Messungen bis zur Iteration $n-1$

eine Aussage über die Wahrscheinlichkeit der Parameter x_n getroffen werden. Im vorliegenden Fall der Parameterschätzung, bei dem nur für den Gleichgewichtswert Beobachtungen vorhanden sind, ist

$$p(x_1|y_1) = \frac{p(y_1|x_1)p(x_1|y_0)}{p(y_1|y_0)}.$$

Die A-Priori-Wahrscheinlichkeit wird auf $p(x_1|y_0) = p(x_1)$ gesetzt, da zur Initialisierung keine Beobachtungen vorhanden sind. Sie beschreibt das Vorwissen über das Modell bezüglich des Parameterraums. Weiterhin ist

$$\begin{aligned} p(y_1|y_0) &= \int_X p(y_1|x_1)p(x_1|y_0)dx_1 \\ &= \int_X p(y_1|x_1)p(x_1)dx_1, \end{aligned}$$

so dass man

$$p(x_1|y_1) = \frac{p(y_1|x_1)p(x_1)}{\int_X p(y_1|x_1)p(x_1)dx_1}$$

als Bayes-Schätzung der Wahrscheinlichkeitsdichte der Parameter x_1 unter Beobachtungen y_1 erhält. Damit ergibt sich folgender Algorithmus:

Algorithmus 3.1 (Bayesschätzung). *Gegeben seien Beobachtungen $y \in Y$, ein Parameterraum X , eine Likelihood-Funktion $p : Y \times X \rightarrow [0, 1]$ sowie eine Anfangsverteilung $p_0 : X \rightarrow [0, 1]$.*

1. *Erzeuge eine gleichverteilte Stichproben $(x^{(i)})_{i=1, \dots, N}$ mit $x^{(i)} \in X$*
2. *Werte die Likelihood-Funktion $p(y|x^{(i)})$ und die Anfangsverteilung $p_0(x^{(i)})$ für $x^{(i)}$ mit $i = 1, \dots, N$ aus*
3. *Bestimme $c = \sum_{i=1}^N p(y|x^{(i)})p_0(x^{(i)})$*
4. *Für hinreichend großes N approximiert*

$$\hat{p}(x^{(i)}|y) = \frac{1}{c} p(y|x^{(i)})p_0(x^{(i)})$$

die wahre Wahrscheinlichkeitsdichte $p(x^{(i)}|y)$ an den Stellen $x^{(i)}$ in X .

In den hier betrachteten Anwendungen wird der Partikelfilter als Bayesschätzer für die Modellparameter mit geeigneten Samplingmethoden untersucht. Die Likelihood-Funktion $p(y|x^{(i)})$ entspricht den Gewichten der Partikel und die Anfangsverteilung $p_0(x^{(i)})$ dem Vorwissen über mögliche Parameterwerte.

3.4.3. Partikelauswahl und Sampling

Im allgemeinen Fall der Beschreibung eines Filterproblems, das mit einem Partikelfilter angegangen werden soll, wird aus einer Folge von Beobachtungen $(y_t)_{t \in \mathbb{N}^*}$ eine Folge von Signalen $(x_t)_{t \in \mathbb{N}}$ ermittelt. Das ist eine typische Situation in der Signalverarbeitung, Objektverfolgung oder Positionsbestimmung. In den geowissenschaftlichen bzw. klimatologischen Problemen, die in dieser Arbeit untersucht werden sollen, geht es um die Bestimmung zeitlich konstanter Parameter. Der Unterschied zu den typischen mit Partikelfiltern bearbeiteten Fragestellungen liegt also darin, dass Parameter gefunden werden müssen, die für die untersuchte Laufzeit eines physikalischen Modells konstant sind. Dieses stochastische Modell wird dann beschrieben durch:

- die Anfangsverteilung $p_0(x)$, d.h. durch eine Verteilung, aus der man anfänglich Parameterstichproben erhält und durch
- die Verteilung $p(y|x)$, die einer Gewichtung der Partikel entspricht.

Ein grundlegendes Merkmal der Partikelfilter ist die Weise in der Partikel ausgewählt, ersetzt und ggf. neu generiert werden. Wichtige Aspekte dabei sind eine gute Überdeckung des Parameterraums und eine schnelle Konvergenz gegen die wahre Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion.

Definition 3.8 (Sampling). *Die Auswahl einer höchstens abzählbaren Partikelmengens \hat{X} aus dem Parameterraum X wird als Sampling bezeichnet.*

In der Regel ist X überabzählbar und die Menge der Stichproben bzw. Partikel \hat{X} endlich.

Zum grundlegenden Verständnis der Partikelfilter folgt der Algorithmus des generischen Bootstrap-Filters aus Doucet, de Freitas und Gordon (2001, [4]).

Algorithmus 3.2 (Bootstrap-Filter).

1. Initialisierung
 $(t = 0)$
 For $i = 1, \dots, N$
 Erzeuge Partikel $x_i(0)$ entsprechend der Anfangsverteilung $p_0(X)$
 End
 $t = 1$
2. Importance sampling
 For $i = 1, \dots, N$
 Erzeuge Partikel $\tilde{x}_i(t)$ entsprechend der Übergangswahrscheinlichkeit $p(x_i(t)|x_i(t-i))$
 Setze $\tilde{x}_i(0:t) = x_i(0:t-1) \cup \{\tilde{x}_i(t)\}$
 End
 For $i = 1, \dots, N$
 Gewichte die Partikel $w_i(t) = p(\tilde{y}|\tilde{x}_i(t))$
 End
 Normalisiere die Gewichte

3. *Auswahlschritt*

Ersetze die Partikel $\{\tilde{x}_i(0:t) : i = 1, \dots, N\}$ durch N Partikel, die entsprechend des Gewichts aus der Menge $\{\tilde{x}_i(0:t) : i = 1, \dots, N\}$ gezogen werden

$t = t + 1$

Gehe zu 2

Bemerkungen:

- Im Auswahlschritt werden Partikel mit zu kleinem Gewicht eliminiert, Partikel mit großem Gewicht vervielfachen sich hingegen. Dieser Vorgang des Erzeugens einer neuen aus einer bekannten Stichprobe wird als Bootstrapping bezeichnet.
- Die Partikelgewichte entsprechen der approximierten Wahrscheinlichkeitsdichte der Partikel.
- Nach dem Resampling (Auswahlschritt) wird allen Partikeln wieder das gleiche Gewicht (o.B.d.A. $w_i(t) = 1$ für alle i) zugeschrieben. Im Importance-Sampling-Schritt werden neue Partikelgewichte ermittelt.

Der Bootstrap-Filter dient dazu, die Verteilung einer Größe zu schätzen. Hier soll er nun zur Parameterschätzung verwendet werden. Dafür sei ein Modell $y = \mathcal{M}(x)$ gegeben, wobei $x \in \mathbb{R}^n$ das zu schätzende Parametertupel des Modells ist. Weiterhin seien Messwerte $\tilde{y} \in \mathbb{R}^m$ gegeben. Es sei $p_0(x)$ die bekannte A-priori-Wahrscheinlichkeit der Parameter und μ ein Maß auf X , dann ist z.B.

$$p_0(x) = \begin{cases} \frac{1}{\mu(\hat{X})}, & x \in \hat{X} \subset X \\ 0, & x \in X \setminus \hat{X} \end{cases}$$

Die Übergangswahrscheinlichkeit $p(x_i(t)|x_i(t-1))$ sei z.B. mit

$$p(x_i(t)|x_i(t-1)) = \mathcal{N}(\sigma_i, x_i(t-1))$$

gegeben und die Gewichte mit

$$w_i(t) = \exp\left(-\frac{1}{2R}\|y_i(t) - \tilde{y}\|_2^2\right).$$

Sind diese Werte definiert, lässt sich der Bootstrap-Filter zur Schätzung der Parameter x nutzen. Nach T_{max} Iterationen kann durch Bildung eines Histogramms eine Schätzung der Wahrscheinlichkeitsdichte der Parameter x zu den Daten \tilde{y} gemacht werden.

Bemerkung:

- Die Partikel sind hier die erzeugten Parameter.
- Die Modellgleichungen müssen $N \cdot T_{max}$ mal ausgewertet werden. D.h. gegenüber einem normalen Modelllauf ist mit einer N -fachen Laufzeit zu rechnen, wenn man davon ausgeht, dass die Auswertung der Modellgleichungen den Rechenaufwand im Wesentlichen bestimmt.

- Unter der Annahme, dass die Partikelverteilung mit N Partikeln die wahre Verteilung approximiert, geschieht die Schätzung im einfachsten Fall durch die Bildung eines Histogramms.

3.4.4. Monte-Carlo-Sampling

Um eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion zu beschreiben sind Stichproben aus dem Parameterraum nötig, für die das untersuchte Modell ausgewertet werden soll. Ausgangspunkt der folgenden Samplingmethoden ist das Monte-Carlo-Sampling, welches durch zufällig gewählte Stichproben ein Integral annähert.

Es soll das Lebesgue-Stieltjes-Integral über eine Dichtefunktion f bzgl. des Maßes P

$$\int_X f(x)dP(x) \quad (11)$$

approximiert werden. Dazu erzeugt man unabhängige Stichproben x_1, \dots, x_N und approximiert (11) durch

$$\hat{f}_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i).$$

Dabei gilt für die Erwartungswerte $\mathbb{E}(\hat{f}_N) = \mathbb{E}(f) = \mu$ und für die Varianz der Approximation

$$\begin{aligned} \text{var}(\hat{f}_n) &= \mathbb{E}((\hat{f}_N) - \mu)^2 \\ &= \mathbb{E}((\hat{f}_N)^2) - \mu^2 \\ &= \mathbb{E}\left(\left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i)\right)\left(\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(x_j)\right)\right) - \mu^2 \\ &= \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \mathbb{E}(f^2) - \mu^2 \\ &= \frac{(N + N^2 - N)\mathbb{E}(f^2)}{N^2} - \mu^2 \\ &= \frac{N\mathbb{E}(f^2) + (N^2 - N)\mu^2}{N^2} - \mu^2 \\ &= \frac{\mathbb{E}(f^2) - \mu^2}{N} \\ &= \frac{1}{N} \text{var}(f). \end{aligned} \quad (12)$$

Die Schätzung \hat{f}_n konvergiert also fast sicher gegen den Erwartungswert $\mathbb{E}(f)$ mit der Rate $\frac{1}{N}$ für die Varianz der Approximation bzw. mit $\frac{1}{\sqrt{N}}$ für die Standardabweichung.

3.4.5. Rejection Sampling (Verwerfungsmethode)

Durch Rejection Sampling erzeugte Stichproben haben die Eigenschaft, dass sie entsprechend der zugrundeliegenden Wahrscheinlichkeitsdichte verteilt sind. Im Gegensatz zum einfachen Monte-Carlo-Sampling werden Stichproben an Stellen erzeugt, die für die Beschreibung des Integrals über die Dichtefunktion wichtig sind. Solche Stellen sind die, an denen die Dichte hoch ist.

Die Samples x_i werden entsprechend einer Wahrscheinlichkeit p_0 gezogen und mit der Wahrscheinlichkeit $\pi(x_i)$ akzeptiert.

$$\pi(x_i) = \frac{p(y|x_i)}{p(y|x_{max})}$$

$$x_{max} = \arg \max_{x_i} p(y|x_i)$$

Hat die A-posteriori-Wahrscheinlichkeit $p(y|x)$ einen Peak oder unterscheidet sie sich stark von der A-priori-Wahrscheinlichkeit p_0 , so muss mit einer hohen Ablehnungsrate gerechnet werden. Die A-posteriori-Wahrscheinlichkeit muss dann entsprechend deutlich öfter als N -mal ermittelt werden um N Stichproben zu erhalten.

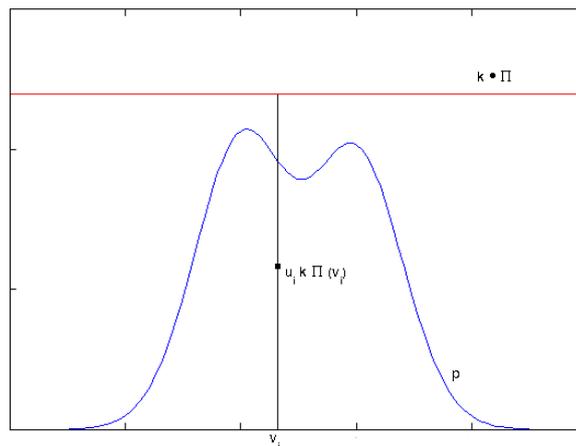


Abbildung 4: Rejection Sampling

Algorithmus 3.3 (Rejection Sampling). *Es sollen Samples erzeugt werden, die eine Verteilung P mit der Dichtefunktion p möglichst gut beschreiben.*

1. Wähle eine Verteilung Π mit der Wahrscheinlichkeitsdichte π und ein $k \in \mathbb{N}$, so dass $p(x) \leq k \cdot \pi(x)$ für alle $x \in X$
 $i = 1$
2. Erzeuge ein Sample x_i entsprechende der Verteilung Π mit Werten im Parameterraum und eine Zufallszahl $u_i \in [0, 1]$

3. Wenn $u_i \cdot k \cdot \pi(x_i) \leq p(x_i)$, akzeptiere x_i als Sample, sonst verwerfe x_i .

4. Gehe zu 2., falls noch nicht genügend Samples erzeugt sind

Der Algorithmus verwirft möglichst wenige Zufallszahlen, und ist damit effektiv, wenn die Dichtefunktion p von π gut approximiert wird. Ein Sample x_i wird mit der Wahrscheinlichkeit $\frac{p(x_i)}{k \cdot \pi(x_i)}$ akzeptiert. Ist diese Wahrscheinlichkeit nah bei Null, werden sehr viele Samples verworfen. Das Rejection Sampling ist dann ineffektiv.

Eine durch Rejection Sampling gewonnene Stichprobe ist entsprechend der wahren Dichtefunktion p verteilt.

3.4.6. Importance Sampling

Das Importance Sampling ist eine Variante des Monte-Carlo-Samplings, bei der Samples nicht verworfen werden. Stattdessen werden die Samples entsprechend der zu beschreibenden Wahrscheinlichkeitsdichte mit Wichtungen versehen.

Es sei p eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion, aus der schwer Stichproben gezogen werden können. Die Idee des Importance Sampling ist, die Stichproben x_i aus einer Verteilung mit der Dichtefunktion q und $\text{supp}(p) \subset \text{supp}(q)$ zu ziehen und diese mit $w(x_i) := c \cdot \frac{p(x_i)}{q(x_i)}$ zu gewichten.

Es soll das Integral

$$\int_X f(x)p(x)dx = \int_X f(x)\frac{p(x)}{q(x)}q(x)dx \quad (13)$$

durch

$$\hat{f}_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w(x_i)f(x_i)$$

approximiert werden. Da der Normalisierungsfaktor c nicht bekannt ist, wird $c = \left(\sum_{j=1}^N \frac{p(x_j)}{q(x_j)} \right)^{-1}$ gesetzt, so dass $\sum_{i=1}^N w(x_i) = 1$ ist.

Nach Gleichung (12) ergibt sich die Varianz der Schätzung mit

$$\begin{aligned}
 \text{var}(\hat{f}) &= \frac{1}{N} \text{var} \left(c \frac{p(x)}{q(x)} f(x) \right) \\
 &= \frac{1}{N} \int_X \left(\frac{cp(x)}{q(x)} f(x) - \underbrace{\mathbb{E} \left(\frac{cp}{q} f \right)}_{\mathbb{E}(f)} \right)^2 q(x) dx \\
 &= \frac{1}{N} \int_X \left(\frac{cp(x)}{\sqrt{q(x)}} f(x) - \sqrt{q(x)} \mathbb{E}(f) \right)^2 dx \\
 &= \frac{1}{N} \left(\int_X \frac{(cp(x)f(x))^2}{q(x)} dx + \int_X q(x) \mathbb{E}(f)^2 dx - \int_X 2cp(x)f(x)\mathbb{E}(f) dx \right) \\
 &= \frac{1}{N} \left(\int_X \frac{(cp(x)f(x))^2}{q(x)} dx + \mathbb{E}(f)^2 - 2c\mathbb{E}(f)^2 \right) \\
 &= \frac{1}{N} \left(\int_X \frac{(cp(x)f(x))^2}{q(x)} dx + (1 - 2c)\mathbb{E}(f)^2 \right)
 \end{aligned}$$

Die Varianz der Schätzung \hat{f} hat weiterhin die Größenordnung $\mathcal{O}(\frac{1}{N})$ und

$$\hat{f} \rightarrow \mathbb{E}(f) \quad \text{für } N \rightarrow \infty.$$

Ist es schwer entsprechend der wahren Wahrscheinlichkeitsdichte p aus X Stichproben zu ziehen, so bietet Importance Sampling eine Möglichkeit diese durch Stichproben entsprechend der Wahrscheinlichkeitsdichte q zu ersetzen. Unterscheiden sich die Wahrscheinlichkeitsdichten q und p sehr stark, können viele Samples, die entsprechend q gezogen wurden, wenig zur Beschreibung des Integrals (13) beitragen, da sie nur gering gewichtet werden.

3.4.7. Sampling Importance Resampling (SIR)

Das SIR ist eine Erweiterung des Importance Sampling, bei der zwischen zwei Importance-Sampling-Schritten die Stichprobe neu gezogen wird. Einen Anhaltspunkt für die Wahl der neuen Samples liefern die Wichtungen der Stichprobe. Der Sampling-Importance-Resampling-Algorithmus wurde von Rubin (1987, [14]) eingeführt. Eine A-priori-Wahrscheinlichkeit p_0 und eine Wahrscheinlichkeitsfunktion $p(y|x)$ müssen gegeben sein.

Die Partikel $x_i(0)$ werden anfänglich p_0 entsprechend gezogen und mit $w_i(0)$

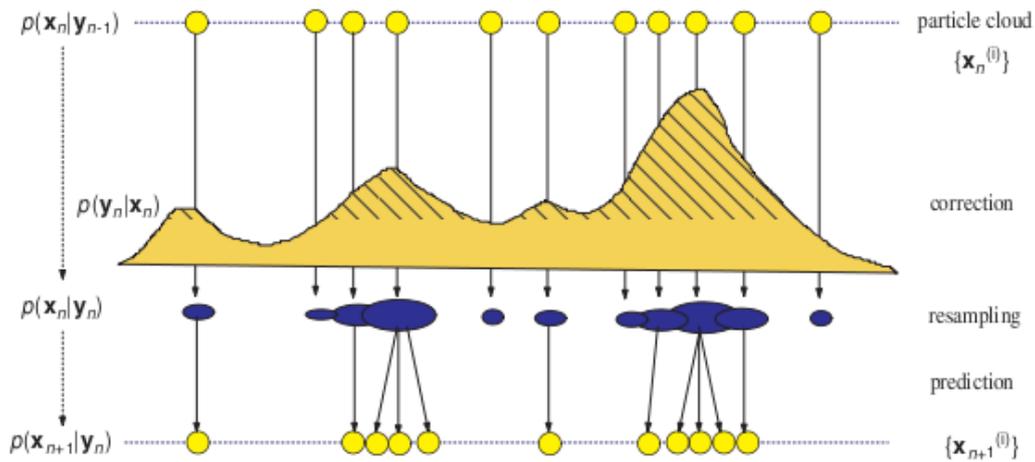


Abbildung 5: Illustration des Sampling Importance Samplings (SIR) aus Chen (2003, [1]).

gewichtet, wobei

$$\begin{aligned}\tilde{w}_i(t) &= p(y|x_i(t)) \\ w_i(t) &= \frac{\tilde{w}_i(t)}{\sum_{j=1}^N \tilde{w}_j(t)}\end{aligned}$$

gilt. D.h. die Partikel werden entsprechend der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $p(y|x)$ mit normierten Gewichten versehen. Für $N \rightarrow \infty$ konvergiert $p(y|x)$ gegen die wahre Verteilung. Da zur Normalisierung statt des Integrals $\int_X p(y|x)dx$ die Summe $\sum_{j=1}^N \tilde{w}_j(t)$ benutzt wird, ist die Güte der Approximation von der Wahl der Stichprobe abhängig. Um die Approximation zu verbessern Stichproben in der Iterationen $t+1$ entsprechend der durch $w_i(t)$ ($i = 1, \dots, N$) approximierten Verteilung zuzogen.

Algorithmus 3.4 (SIR). Gegeben sei eine Wahrscheinlichkeitsdichte q , der entsprechend leicht Stichproben gezogen werden können. Die Wahrscheinlichkeitsdichte p soll approximiert werden.

1. Erzeuge Stichproben x_i , $i = 1, \dots, N$ entsprechend einer Wahrscheinlichkeitsdichte q
2. Bestimme Gewichte $w(x_i) = \frac{p(x_i)}{q(x_i)}$ und normalisiere diese
3. Erzeuge N neue Samples aus der Menge $\{x_i : i = 1, \dots, N\}$, so dass x_i mit der Wahrscheinlichkeit $w(x_i)$ gezogen wird

Der SIR-Algorithmus verfolgt nur Partikel mit hoher Gewichtung weiter. Partikel mit kleinem Gewicht werden verworfen. Das kann dazu führen, dass sich an den Stellen der hohen Partikelgewichte die Partikel konzentrieren und ein

weiteres, bis dahin unentdecktes, Minimum des Kostenfunktional verborgen bleibt. Im Extremfall werden beim SIR nur Partikel in einem Minimum des Kostenfunktional betrachtet, auch wenn dieses mehrere Minima besitzt.

Für das SIR sind Verfahren nötig, mit denen das Resampling effektiv durchgeführt werden kann. Das Rejection Sampling ist prinzipiell dazu geeignet. Aufgrund des Verwerfens von Samples ist es nicht so effektiv wie folgende Verfahren.

Algorithmus 3.5 (Multinomial Resampling).

- Erzeuge normierte Gewichte $w(x_i)$, so dass $\sum_{i=1}^N w(x_i) = 1$
- Berechne $v_i = \sum_{j=1}^i w(x_j)$ für alle i
- Erzeuge gleichverteilte Zufallszahlen $u_i \in [0, 1]$ für $i \in \{1, \dots, N\}$
- Bestimme $k_i = |\{u_j : j \in \{1, \dots, N\} \text{ und } v_{i-1} < u_j \leq v_i\}|$
- Repliziere das Sample x_i k_i -mal

Algorithmus 3.6 (Residual Resampling).

- Erzeuge normierte Gewichte $w(x_i)$, so dass $\sum_{i=1}^N w(x_i) = 1$
- Erzeuge $k_i = \lfloor N \cdot w(x_i) \rfloor$ Kopien von x_i
- $N_r = N - k_1 - \dots - k_N$
- Ziehe eine Stichprobe vom Umfang N_r aus $\{x_i : i \in \{1, \dots, N\}\}$, jeweils mit der Wahrscheinlichkeit $p(x_i) = N \cdot w(x_i) - k_i$

3.4.8. Dichteschätzung

Nach Anwendung eines Partikelfilters erhält man zunächst Partikel $\{(x_i, w_i) : i = 1, \dots, N\}$, die entsprechend der Gewichte w_i verteilt sind und dadurch eine Punktmassenschätzung für die A-Priori-Dichte

$$\hat{p}(x|y) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(x - x_i).$$

Allgemein sucht man aber eine stetige Schätzung der A-Priori-Dichte. Diese erhält man durch den Kerndichteschätzer

$$\hat{p}(x|y) = \sum_{i=1}^N K_h(x - x_i).$$

Dabei ist der Kern K_h zur Bandbreite $h > 0$ eine symmetrische, unimodale und stetige Funktion mit

$$K_h(x) = \frac{1}{h^{-N}} K\left(\frac{x}{h}\right).$$

Die Bandbreite wird zumeist heuristisch gewählt. Solche Kerne sind z.B.

$$\begin{aligned} \text{Gauß-Kern: } K(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \\ \text{Epanechnikov-Kern: } K(x) &= \begin{cases} \frac{3}{4}(1-x^2) & , \text{ falls } -1 < x < 1 \\ 0 & , \text{ sonst} \end{cases} \end{aligned}$$

3.4.9. Konvergenz

In diesem Abschnitt wird die fast sichere Konvergenz der Partikelfilter untersucht. Die Untersuchung orientiert sich an Crisan und Doucet (2002, [3]). Ähnliche Betrachtungen finden sich in Doucet, de Freitas und Gordon (2001, [4]).

Definition 3.9 (Fast sichere Konvergenz). *Eine Folge von Zufallsvariablen X_n konvergiert fast sicher gegen eine Zufallsvariable X , wenn für einen Wahrscheinlichkeitsraum $\{\Omega, \mathcal{F}, P\}$*

$$P(\{\omega \in \Omega : \lim_{n \rightarrow \infty} X_n(\omega) = X(\omega)\}) = 1$$

gilt. Man schreibt $X_n \xrightarrow{f.s.} X$.

Eine Folge von Zufallsvariablen X_n konvergiert also fast sicher, wenn sie im Ereignisraum Ω fast überall punktweise konvergiert.

Es wird, wie beim allgemeinen Partikelfilter, eine zeitliche Entwicklung des Modells angenommen, jedoch mit einem konstanten Beobachtungsvector $y_t = y$ für alle $t > 0$. Die in dieser Arbeit untersuchten Probleme, für die nur im Gleichgewichtszustand des Modells ein Beobachtungsvector vorliegt, sind ein Spezialfall davon.

Um die Konvergenz des Partikelfilters zeigen zu können, wird das folgende Lemma benötigt. Hierfür seien (E, d) ein metrischer Raum und $(a_t)_{t>0}$ und $(b_t)_{t>0}$ Folgen stetiger Abbildungen von E in sich selbst. Weiterhin lassen sich die Kompositionen

$$k_t := a_t \circ b_t \quad \text{und} \quad k_{1:t} := k_t \circ \dots \circ k_1$$

definieren, welche beide wieder stetig sind. Eine nicht notwendigerweise stetige Abbildung $c^N : E \rightarrow E$ störe die Abbildungen k_t und $k_{1:t}$ so, dass

$$k_t^N := c^N \circ a_t \circ c^N \circ b_t \quad \text{und} \quad k_{1:t}^N := k_t^N \circ \dots \circ k_1^N.$$

Mit zunehmendem $N \in \mathbb{N}$ soll die Störung c^N gegen die Identische Abbildung $id : E \rightarrow E$ konvergieren, so dass für alle Folgen $(e_N)_{N \in \mathbb{N}} \subset E$ mit Grenzwert $e \in E$ gilt

$$\lim_{N \rightarrow \infty} e_N = e \quad \Rightarrow \quad \lim_{N \rightarrow \infty} c^N(e_N) = e. \quad (14)$$

Lemma 3.1. *Es seien $a_t, b_t, k_t, k_{1:t}$ und c^N wie oben definiert. Für c^N gelte Gleichung (14). Dann folgt*

$$\lim_{N \rightarrow \infty} k_t^N = k_t, \quad \lim_{N \rightarrow \infty} k_{1:t}^N = k_{1:t} \quad (15)$$

und

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} e_N = e &\Rightarrow \lim_{N \rightarrow \infty} k_t^N(e_N) = k_t(e) \\ &\lim_{N \rightarrow \infty} k_{1:t}^N(e_N) = k_{1:t}(e). \end{aligned} \quad (16)$$

Beweis nach Crisan und Doucet (2002, [3]).

Mit $e_N = e$ für alle $N \in \mathbb{N}$ folgt (15) aus (16). Es muss also die Folgerung (16) bewiesen werden.

Da b_t stetig ist, gilt

$$\lim_{N \rightarrow \infty} e_N = e \Rightarrow \lim_{N \rightarrow \infty} b_t(e_N) = b_t(e).$$

Mit (14) ergibt sich

$$\lim_{N \rightarrow \infty} b_t(e_N) = b_t(e) \Rightarrow \lim_{N \rightarrow \infty} c^N(b_t(e_N)) = b_t(e).$$

Mit der Stetigkeit von a_t folgt weiter

$$\lim_{N \rightarrow \infty} c^N(b_t(e_N)) = b_t(e) \Rightarrow \lim_{N \rightarrow \infty} a_t(c^N(b_t(e_N))) = a_t(b_t(e)).$$

Noch einmal (14) angewendet ergibt

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} a_t(c^N(b_t(e_N))) = a_t(b_t(e)) &\Rightarrow \lim_{N \rightarrow \infty} c^N(a_t(c^N(b_t(e_N)))) = a_t(b_t(e)), \\ &\Leftrightarrow \lim_{N \rightarrow \infty} k_t^N(e_N) = k_t(e). \end{aligned}$$

Mit dem Induktionsanfang $\lim_{N \rightarrow \infty} k_1^N(e_N) = k_1(e)$ und Induktion über t folgt $\lim_{N \rightarrow \infty} k_{1:t}^N(e_N) = k_{1:t}(e)$. \square

Dieses Lemma wird nun auf den Partikelfilter angewendet um schließlich zu zeigen, dass der Partikelfilter die wahre Wahrscheinlichkeitsdichte des Parameterraums approximiert.

Als Menge E wird die Menge aller Wahrscheinlichkeitsmaße auf \mathbb{R}^n gewählt: $E = \mathcal{P}(\mathbb{R}^n)$. Ist $\langle \cdot, \cdot \rangle$ ein Skalarprodukt auf diesem Raum, dann wird die schwache Konvergenz wie folgt definiert.

Definition 3.10 (Schwache Konvergenz). *($E, \langle \cdot, \cdot \rangle$) sei ein Hilbertraum. Eine Folge $(\mu_N)_{N>0} \subset E$ konvergiert schwach gegen $\mu \in E$ ($\lim_{N \rightarrow \infty} \mu_N = \mu$), wenn für jedes $\varphi \in C_b(\mathbb{R}^n)$ gilt*

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \langle \mu_N, \varphi \rangle = \langle \mu, \varphi \rangle.$$

Man kann eine abzählbare Teilmenge $\{\varphi_i\}_{i>0} \subset C_b(\mathbb{R}^n)$ wählen, so dass durch

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \mu_N = \mu \quad \Leftrightarrow \quad \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \mu_N, \varphi_i \rangle = \langle \mu, \varphi_i \rangle$$

für alle $\varphi_i \in \{\varphi_i\}_{i>0}$ die schwache Konvergenz beschrieben wird. Damit wird der Raum $\mathcal{P}(\mathbb{R}^n)$ mit der Metrik

$$d(\mu, \nu) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{|(\mu, \varphi_i) - (\nu, \varphi_i)|}{2^i \|\varphi_i\|}$$

ausgestattet. Es ist $\|\varphi\| := \sup_{x \in \mathbb{R}^n} |\varphi(x)|$ und es gilt

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \mu_N = \mu \quad \Leftrightarrow \quad \lim_{N \rightarrow \infty} d(\mu_N, \mu) = 0.$$

Ist $X = \{X_t : t \in \mathbb{N}\}$ der stochastische Prozess, der die Parameterentwicklung beschreibt und $Y = \{Y_t : t \in \mathbb{N}\}$ der Prozess, der die Entwicklung der Beobachtungen beschreibt, dann lässt sich die Wahrscheinlichkeitsverteilung $\pi_{k:l|m} := P(X_{k:l} | Y_{1:m} = y_{1:m})$ definieren.

Die Abbildung $b_t : \mathcal{P}(\mathbb{R}^n) \rightarrow \mathcal{P}(\mathbb{R}^n)$ lässt sich als Vorhersage $\pi_{t|t-1} = b_t(\pi_{t-1|t-1})$ betrachten. Für ein $\nu \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^n)$ gelte

$$b_t(\nu) := \nu K$$

mit der Übergangsfunktion K und damit

$$\langle b_t(\nu), \varphi \rangle = \langle \nu, K\varphi \rangle.$$

Die Abbildung b_t soll stetig sein, d.h. die Parameter sollen sich stetig entwickeln. Da in den Anwendungen hier lediglich zeitlich konstante Parameter betrachtet werden, ist diese Bedingung erfüllt. Im allgemeinen Fall ist sie erfüllt, wenn die Übergangsfunktion K einen Feller-Prozess bildet. Im wesentlichen heißt das, dass für alle $\varphi \in C_b(\mathbb{R}^n) \Rightarrow K\varphi \in C_b(\mathbb{R}^n)$.

Die Abbildung $a_t : \mathcal{P}(\mathbb{R}^n) \rightarrow \mathcal{P}(\mathbb{R}^n)$ sei für ein $\nu \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^n)$ definiert durch

$$\langle a_t(\nu), \varphi \rangle = \langle \nu, g \rangle^{-1} \langle \nu, \varphi g \rangle$$

für alle $\varphi \in C_b(\mathbb{R}^n)$ und die Likelihood-Funktion g . Ist $g(y_t|\cdot) \in C_b(\mathbb{R}^n)$ und $g > 0$, so ist $a_t \in C_b(\mathbb{R}^n)$. Es ist

$$\pi_{t|t} = a_t(\pi_{t|t-1}) = a_t \circ b_t(\pi_{t-1|t-1}).$$

Sind a_t und b_t stetig, so ist

$$\pi_{t|t} = k_t(\pi_{t-1|t-1}) = k_{1:t}(\mu). \quad (17)$$

Es sei $\pi_{t|t}^N$ die empirisch ermittelte Wahrscheinlichkeitsdichte nach dem Resampling-Schritt des Bootstrap-Filters. Dann ist

$$\begin{aligned} \pi_{t|t}^N &= c^N \circ a_t \circ c^N \circ b_t(\pi_{t-1|t-1}^N) \\ &= k_t^N(\pi_{t-1|t-1}^N) \\ &= k_{1:t}^N \circ c^N(\mu) \\ &= k_{1:t}^N(\mu^N) \end{aligned} \quad (18)$$

mit der Anfangsverteilung μ und der gestörten Anfangsverteilung $\mu^N = c^N(\mu)$.

Satz 3.2. *Ist die Übergangsfunktion K ein Feller-Prozess und für die Likelihood-Funktion $g \in C_b(\mathbb{R}^n)$ gilt $g > 0$, dann konvergiert die empirische Verteilung $\pi_{t|t}^N$ fast sicher gegen die wahre Verteilung $\pi_{t|t}$ für $N \rightarrow \infty$.*

Beweis nach Crisan und Doucet (2002, [3]). Nach (18) ist $\pi_{t|t}^N = k_{1:t}^N(\mu^N)$. Gilt für die empirische Anfangsverteilung μ^N , dass sie für $N \rightarrow \infty$ schwach gegen die wahre Anfangsverteilung μ konvergiert, so folgt mit Lemma 3.1 $\lim_{N \rightarrow \infty} k_{1:t}^N(\mu^N) = k_{1:t}(\mu)$ und mit (17) $k_{1:t}(\mu) = \pi_{t|t}$. Zusammen erhält man

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \pi_{t|t}^N = \lim_{N \rightarrow \infty} k_{1:t}^N(\mu^N) = k_{1:t}(\mu) = \pi_{t|t}.$$

□

Wie man es von einem sinnvollen Verfahren erwartet, konvergiert der Partikelfilter also mit wachsender Partikelanzahl $N \rightarrow \infty$ gegen die wahre Verteilung der zu schätzenden Parameter.

Ein weiteres wichtiges Ergebnis der Konvergenzbetrachtungen von Crisan und Doucet (2002, [3]) ist, dass die Konvergenzrate des Bootstrap Filters unabhängig von der Dimension des Parameterraums ist. Es gilt

Satz 3.3. *Ist für die Likelihood-Funktion $\|g\| < \infty$, $x_t \in \mathbb{R}^n$, dann gibt es für alle $t \geq 0$ ein von der Partikelanzahl N unabhängiges $c_{t|t} > 0$, so dass für alle $\varphi \in B(\mathbb{R}^n)$ gilt*

$$\mathbb{E} \left[\left(\langle \pi_{t|t}^N, \varphi \rangle - \langle \pi_{t|t}, \varphi \rangle \right)^2 \right] \leq c_{t|t} \frac{\|\varphi\|^2}{N}.$$

Auf den sehr technischen Beweis dieses Satzes wird hier verzichtet. Er ist in der genannten Veröffentlichung nachzulesen. Es wird gezeigt, dass unter der Annahme, dass der mittlere quadratische Fehler der Schätzung $\pi_{t-1|t-1}^N$ für den Iterationsschritt $t - 1$ beschränkt ist, auch der mittlere quadratische Fehler von $\pi_{t|t}^N$ beschränkt ist. Hierfür werden die Schritte des Bootstrap Filters nacheinander ausgeführt.

3.5. Partikel-Schwarm-Optimierung

Dieser Abschnitt stützt sich auf die Beschreibung der Partikel-Schwarm-Optimierung (PSO) in Wilken (2009, [18]) und Clerc (2006, [2]). Unter einem Schwarm wird in der Regel eine Ansammlung von Tieren einer Art verstanden, deren Mitglieder dicht beieinander bleiben. Die Schwarmintelligenz als Forschungsfeld versucht das Verhalten von Schwärmen zu modellieren und auf diese Art mathematische Probleme, vor allem Optimierungsprobleme, zu lösen. Der Schwarm dieht dabei lediglich als Metapher. Statt des exakten Verhaltens der Organismen steht die Interaktion und Kommunikation zwischen ihnen als Anregung für einen Algorithmus im Vordergrund.

Da die Mitglieder eines Schwarms weitgehend autonom sind, eignen sich die Varianten der PSO ebenso wie der Partikelfilter für die parallele Verarbeitung

durch moderne Rechner. Lediglich in gewissen Zeitabständen ist eine Kommunikation unter den Schwarmmitgliedern notwendig.

Es soll das Problem der Minimierung eines Kostenfunktionals $J : X \rightarrow \mathbb{R}_+$ bezüglich der Parameter $x \in X$

$$\min_{x \in X} J(x)$$

betrachtet werden. Im Folgenden sei $x_i(t) \in X \subset \mathbb{R}^n$ der Parameterwert des Partikels i zur Iteration t . Die Idee der PSO basiert darauf, dass sich der „Weg“ eines Partikels durch den Parameterraum mit folgender Bewegungsgleichung komponentenweise beschreiben lässt:

$$x_{i,d}(t+1) = x_{i,d}(t) + v_{i,d}(t+1) \quad (19)$$

Dabei ist $x_{i,d}(t)$ die Ortskomponente d des Partikels i zur Iteration t im Parameterraum und $v_{i,d}(t)$ die entsprechende Geschwindigkeitskomponente des Partikels. Die Geschwindigkeit soll Informationen über die bisher beste Position des Partikels im Parameterraum (kognitive Komponente) sowie Informationen über die bisher beste Position aller Partikel in der Nachbarschaft (soziale Komponente) berücksichtigen.

Die einfachste Form der PSO ist die *Global Best PSO*. Dabei wird jeweils der gesamte Partikelschwarm als Nachbarschaft betrachtet. Es gilt

$$v_{i,d}(t+1) = c_0 v_{i,d}(t) + c_1 r_{1,d} (k_{id}(t) - x_{i,d}(t)) + c_2 r_{2,d} (g_d(t) - x_{i,d}(t)). \quad (20)$$

Der Index i bezeichnet den Partikel und der Index d die Komponente des Parameterraums. Weiterhin sind $c_0, c_1, c_2 \in \mathbb{R}_+$ Konstanten, die die einzelnen Summanden gewichten und $r_{1,d}, r_{2,d} \sim U([0, 1])$ gleichverteilte Zufallszahlen. Die Werte $k_{i,d}(t)$ und $g_d(t)$ sind die bis zur Iteration t im Sinn der Kostenfunktion besten erreichten Positionen des Partikels bzw. des Schwarms.

In der Gleichung (20) beschreibt der erste Summand eine Art Trägheit, der zweite die kognitive und der dritte die soziale Komponente. Sind die Geschwindigkeiten für alle Komponenten des Parameterraums bestimmt und das Kostenfunktional an der neuen Position ausgewertet, so wird $k_i(t+1) = [k_{i,1}(t+1), k_{i,2}(t+1), \dots]$ bestimmt.

$$k_i(t+1) = \begin{cases} x_i(t+1) & , \text{ falls } J(x_i(t+1)) < J(k_i(t)) \\ k_i(t) & , \text{ sonst} \end{cases} \quad (21)$$

Anschließend wird die global beste Partikelposition $g(t+1) = [g_1(t+1), g_2(t+1), \dots]$ bestimmt.

$$g(t+1) = k_j(t+1) \quad \text{mit} \quad j = \underset{i}{\operatorname{argmin}} J(k_i(t+1)) \quad (22)$$

3.5.1. Informationsfluss zwischen den Partikeln

Durch die Definition einer Nachbarschaft von Partikeln wird die soziale Komponente der Geschwindigkeit und somit der Informationsfluss zwischen den einzelnen Partikeln bestimmt. Ist bei einem Partikelschwarm aus N Partikeln die Partikelmenge $\mathcal{P} = \{(x_i, J(x_i)) \mid i \in I \subset \{1, \dots, N\}\}$ mit einem Partikel $(x_j, J(x_j))$ benachbart, so erhält $(x_j, J(x_j))$ Informationen über die beste bisher gefundene Position und die entsprechenden Kosten der Partikel aus \mathcal{P} .

Im einfachsten Fall wird angenommen, dass alle Partikel miteinander benachbart sind. Es gilt dann $\mathcal{P} = \{(x_i, J(x_i)) \mid i \in \{1, \dots, N\}\}$. Diese Art der Nachbarschaft ergibt die Global Best PSO.

Algorithmus 3.7 (Global Best PSO).

1. $t = 0$.
Initialisiere Partikel $x_i(t)$ für $i = 1, \dots, N$ mit Positionen im Parameterraum X und bestimme jeweils die Kosten $J(x_i(0))$
2. *Berechne $k_i(t)$ nach Gleichung (21) und $g(t)$ nach Gleichung (22)*
3. *Bewege Partikel entsprechend der Gleichung (20) im Parameterraum*
4. *Gehe zu 2, falls die Abbruchbedingung nicht erfüllt ist*

Eine andere Möglichkeit die Nachbarschaft festzulegen ist, aus der Menge der Partikel $\{(x_1, J(x_1)), \dots, (x_N, J(x_N))\}$ K Exemplare „mit Zurücklegen“ zufällig auszuwählen.

3.5.2. Konfiguration der PSO

Es wird ein zu untersuchender Parameterraum der Form $[x_{min}, x_{max}]^M$ angenommen. (Analog wäre auch $[x_{1min}, x_{1max}] \times \dots \times [x_{Mmin}, x_{Mmax}]$ denkbar.) Die Partikel werden so initialisiert, dass ihre Position $x_i(0)$ vor der ersten Iteration in jeder Dimension gleichverteilt ist. Die Anfangsgeschwindigkeit $v_{i,d}(0)$ wird ebenso gleichverteilt aus $[\frac{x_{min}-x_{max}}{2}, \frac{x_{max}-x_{min}}{2}]^M$ gewählt. Dadurch wird gewährleistet, dass der Parameterraum gut abgedeckt wird und nur wenige Partikel den Parameterraum nach der ersten Iteration verlassen.

Die Rechenzeit der PSO wird im Wesentlichen durch die Anzahl der Modellauswertungen bestimmt. Dies ist zu beachten, wenn man die Anzahl der Partikel festlegt. Viele Partikel bedeuten eine größere Wahrscheinlichkeit einen besseren Parametervektor zu finden aber auch mehr Rechenzeit pro Iteration. Die Schwarmgröße bzw. Partikelanzahl sollte sich laut Clerc (2006, [2]) zwischen 20 und 40 Partikel bewegen. Als guter Wert werden 20 Partikel vorgeschlagen, unabhängig von der Dimension des zu lösenden Problems.

Die besten Werte für die Gewichtungskonstanten der Geschwindigkeitskomponenten c_0, c_1, c_2 in (20) sind vom Optimierungsproblem abhängig. Richtwerte werden in Clerc (2006, [2]) mit $c_0 \approx 0.7$ bzw. $c_1 = c_2 \approx 1.5$ gegeben. Für die Anzahl der Nachbarschaften werden 3,4,5 und N als sinnvolle Werte angegeben.

Bei dieser Konfiguration der PSO kann es passieren, dass Partikel den Parameterraum verlassen. Das lässt sich leicht verhindern, indem man in diesem Fall die Position des Partikels in der betroffenen Parameterdimension auf den nächstgelegenen Wert innerhalb des Parameterraums setzt. Dazu ändert man die Bewegungsgleichung (19) der PSO in

$$x_{i,d}(t+1) = \min(\max(x_{i,d}(t) + v_{i,d}(t), x_{d \min}), x_{d \max}).$$

Da dabei der Geschwindigkeitsvektor nicht angepasst wird und dieser in der nächsten Iteration tendenziell in die gleiche Richtung zeigt, kann es passieren, dass der Partikel über mehrere Zeitschritte an einem Randpunkt des Parameterraums verbleibt. Um dies zu verhindern setzt man für den Fall $x_{i,d}(t) \notin [x_{d \min}, x_{d \max}]$ noch $v_{i,d} = 0$.

3.5.3. Erweiterungen

Um das Konvergenz- bzw. das Suchverhalten der PSO zu verbessern, gibt es verschiedene Erweiterungen. Diese beruhen auf Heuristiken. Ob sie wirklich Verbesserungen der Eigenschaften des Algorithmus mit sich bringen, muss entsprechend des Optimierungsproblems analysiert werden. Hier folgt nun eine Auswahl dieser Mechanismen.

Es kann passieren, dass ein Partikel x_i über k Iterationen keine Verbesserung der Lösung findet. Geht man davon aus, dass das Partikel dann in den nächsten Iterationen mit hoher Wahrscheinlichkeit keine bessere Lösung liefert, kann man dieses auf die global beste Position und seine Geschwindigkeit $v_i(t) \neq 0$ setzen. Ist also zum Iterationsschritt t das Kostenfunktional $J(k_i(t)) \leq J(x_i(s))$ für $s = t, t-1, \dots, t-k-1$, so wird $x_i(t) = g(t)$ gesetzt. Weiterhin wird vorgeschlagen eine maximale Schranke für die Anzahl der so verschobenen Partikel vorzugeben.

Andererseits kann es passieren, dass sich die Partikel systematisch auf einen Punkt zubewegen, der nicht das globale Minimum repräsentiert. Diesen Fall vermeidet die Additional-Chaos-Methode. Dabei wird bei jeder Iteration mit der Wahrscheinlichkeit c_v die Geschwindigkeit und mit der Wahrscheinlichkeit c_p die Position eines Partikels neu initialisiert.

Die Neustart PSO soll verhindern, dass der Partikelschwarm einem lokalen, aber nicht globalen, Minimum der Kostenfunktion zustrebt. Bei dieser Erweiterung der PSO wird nach jeder Iteration der Fortschritt der Konvergenz des Partikelschwarms gemessen. Sind die Parameter c_0 , c_1 und c_2 wie in Kapitel 3.5.4 vorgeschlagen gewählt, strebt die PSO für alle i den Zustand $x_i = k_i = g$ an. Somit kann zum Beispiel durch Bestimmung des Schwarmdurchmessers $\max_{i \neq j} \|x_i - x_j\|_\infty$ oder durch Berechnung der Abweichungen der jeweils besten Partikelpositionen $\max_{i \neq j} \|k_i - k_j\|_\infty$ ermittelt werden, wie weit die Konvergenz des Schwarms vorangeschritten ist. Unterschreiten diese Werte mehrmals einen festgelegten Schwellwert, so werden alle bis auf den global besten Partikel neu

über den Parameterraum verteilt.

Die Guaranteed Convergence PSO (GCP SO) erweitert den PSO-Algorithmus dahingehend, dass der global beste Partikel stochastisch in einer gewissen Umgebung nach Parametern mit geringeren Kosten sucht.

3.5.4. Untersuchungen der PSO

Betrachtet man die Gleichungen (19) und (20) und nimmt $v_{i,d}(t) = 0$ für alle Partikel i und Komponenten des Parameterraums d an, sowie die Erwartungswerte $\mathbb{E}(r_{1,d}) = \mathbb{E}(r_{2,d}) = \frac{1}{2}$, so ist der Schwerpunkt der Partikelbewegung

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} c_1 k_1 + c_2 g_1 \\ \vdots \\ c_1 k_N + c_2 g_N \end{pmatrix} .$$

Dieser Punkt ist lediglich Ergebnis der einfachen Formulierung der PSO. Es gibt keinen Grund, dass er ein Minimum der Kostenfunktion darstellt.

Alternativ zur komponentenweisen Formulierung in Gleichung (20), lässt sich die Geschwindigkeit des Partikels i auch vektoriell schreiben als

$$v_i(t+1) = c_0 v_i(t) + A_1(k_i(t) - x_i(t)) + A_2(g(t) - x_i(t))$$

mit

$$A_1 = c_1 \begin{bmatrix} r_{11} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & r_{1N} \end{bmatrix}$$

$$A_2 = c_2 \begin{bmatrix} r_{21} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & r_{2N} \end{bmatrix} .$$

Diese vektorielle Schreibweise ist vor allem für die Implementierung in Matlab nützlich.

Eine analytische Untersuchung der PSO liefert Trelea (2003, [17]).

In der Grundform der PSO entsprechend der Gleichungen (19) und (20) werden die Komponenten des Parameterraums unabhängig voneinander nach einem Optimum durchsucht. Erst bei der Auswertung des zu minimierenden Kostenfunctionals und der sich daraus evtl. ergebenden Anpassung der besten Positionen k_i und g werden alle Komponenten betrachtet. Für die analytische Untersuchung wird angenommen, dass sich k_i und g nicht ändern und die Bewegungsgleichung wird auf den eindimensionalen Fall reduziert.

$$x_i(t+1) = x_i(t) + v_i(t+1) \quad (23)$$

$$v_i(t+1) = c_0 v_i(t) + c_1 r_1(k_i(t) - x_i(t)) + c_2 r_2(g(t) - x_i(t)) \quad (24)$$

Weiterhin wird aus der stochastischen Version des Algorithmus zunächst eine deterministische gemacht indem die Zufallszahlen r_1 und r_2 durch ihren Erwartungswert $\mathbb{E}(r_1) = \mathbb{E}(r_2) = 0.5$ ersetzt werden. Setzt man nun

$$c = \frac{c_1 + c_2}{2}$$

$$p_i(t) = \frac{c_1}{c_1 + c_2} k_i(t) + \frac{c_2}{c_1 + c_2} g(t),$$

so ist c der Mittelwert von c_1 und c_2 und $p_i(t)$ das gewichtete Mittel von $k_i(t)$ und $g(t)$. In der Praxis wird häufig der Spezialfall $c = c_1 = c_2$ gebraucht. Damit ist $p_i = \frac{1}{2}(k_i(t) + g(t))$.

Man kann die eindimensionale Version der PSO in den Gleichungen (23) und (24) als

$$x_i(t+1) = x_i(t) + v_i(t+1) \quad (25)$$

$$v_i(t+1) = c_0 v_i(t) + c(p_i(t) - x_i(t)) \quad (26)$$

schreiben, da

$$\begin{aligned} v_i(t+1) &= c_0 v_i(t) + c(p_i(t) - x_i(t)) \\ &= c_0 v_i(t) + \frac{c_1 + c_2}{2} \left(\frac{c_1}{c_1 + c_2} k_i(t) + \frac{c_2}{c_1 + c_2} g(t) - x_i(t) \right) \\ &= c_0 v_i(t) + \frac{c_1}{2} k_i(t) + \frac{c_2}{2} g(t) - \frac{c_1}{2} x_i(t) - \frac{c_2}{2} x_i(t) \\ &= c_0 v_i(t) + c_1 \mathbb{E}(r_1)(k_i(t) - x_i(t)) + c_2 \mathbb{E}(r_2)(g(t) - x_i(t)) \end{aligned}$$

Der so beschriebene deterministische Algorithmus besitzt nur noch die beiden Parameter c_0 und c .

Die Gleichungen der eindimensionalen PSO werden als diskretes dynamisches System in Matrixform geschrieben:

$$y_i(t+1) = Ay_i(t) + Bp_i(t) \quad (27)$$

mit dem Zustandsvektor $y_i(t) = \begin{bmatrix} x_i(t) \\ v_i(t) \end{bmatrix}$, der dynamischen Matrix $A = \begin{bmatrix} 1 - c & c_0 \\ -c & c_0 \end{bmatrix}$ und dem externen Antrieb $B = \begin{bmatrix} c \\ c \end{bmatrix}$.

Die Äquivalenz zu den Gleichungen (25) und (26) ergibt sich, da

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} x_i(t+1) \\ v_i(t+1) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 1 - c & c_0 \\ -c & c_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_i(t) \\ v_i(t) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} c \\ c \end{bmatrix} p_i \\ &= \begin{bmatrix} (1 - \frac{c_1 + c_2}{2})x_i(t) + c_0 v_i(t) + \frac{c_1}{2} k_i(t) + \frac{c_2}{2} g(t) \\ -\frac{c_1 + c_2}{2} x_i(t) + c_0 v_i(t) + \frac{c_1}{2} k_i(t) + \frac{c_2}{2} g(t) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} x_i(t) + v_i(t+1) \\ c_0 v_i(t) + \frac{c_1}{2}(k_i(t) - x_i(t)) + \frac{c_2}{2}(g(t) - x_i(t)) \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Zunächst wird überprüft, ob Fixpunkte in dem dynamischen System existieren. Für einen Fixpunkt y^{eq} muss $y(t) = y(t+1) = y^{eq}$ für alle $t \in \mathbb{N}$ gelten. Setzt man nun $y_i(t+1) = y_i(t) = y^{eq}$ in Gleichung (27) ein, so erhält man

$$\begin{aligned}
 y^{eq} &= \begin{bmatrix} 1-c & c_0 \\ -c & c_0 \end{bmatrix} y^{eq} + \begin{bmatrix} c \\ c \end{bmatrix} p_i \\
 \Leftrightarrow \left(\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1-c & c_0 \\ -c & c_0 \end{bmatrix} \right) y^{eq} &= \begin{bmatrix} c \\ c \end{bmatrix} p_i \\
 \Leftrightarrow y^{eq} &= \begin{bmatrix} \frac{1-c_0}{c} & \frac{c_0}{c} \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c \\ c \end{bmatrix} p_i \\
 &= \begin{bmatrix} p_i \\ 0 \end{bmatrix},
 \end{aligned}$$

falls $c \neq 0$. Im Fixpunkt ist also die Geschwindigkeit Null und der Ort ist durch den Punkt p_i , dem gewichteten Mittel von $k_i(t)$ und $g(t)$, gegeben. Das entspricht der Anschauung von einem Fixpunkt. In der Regel werden die Partikel nicht mit dem Fixpunkt initialisiert. Es sollte also noch untersucht werden, unter welchen Bedingungen sie zum Fixpunkt konvergieren und wie sie das tun.

Das Verhalten der Partikel hängt von den Eigenwerten der Matrix A ab. Diese sind die Lösungen λ_1 und λ_2 von

$$\begin{aligned}
 \det(A - \lambda E) &= 0 \\
 \Leftrightarrow \lambda^2 + (c - c_0 - 1)\lambda + c_0 &= 0.
 \end{aligned}$$

Ein Fixpunkt heißt stabil, wenn es ein $\delta > 0$ gibt, so dass für alle $y(t)$ mit $\|y(t) - y^{eq}\| < \delta$ gilt $\lim_{t \rightarrow \infty} y(t) = y^{eq}$. Das gilt genau dann, wenn für die Eigenwerte der Matrix A gilt $|\lambda_1| < 1$ und $|\lambda_2| < 1$. Ist das der Fall, kann die PSO gegen den Fixpunkt konvergieren.

Für diesen Fall erhält man die Bedingungen

$$c_0 < 1 \tag{28}$$

$$c > 0 \tag{29}$$

$$2c_0 - c + 2 > 0. \tag{30}$$

Die Bedingung (28) ergibt sich aus

$$\begin{aligned}
 \det A = \lambda_1 \lambda_2 &\Rightarrow (1-c)c_0 + cc_0 < 1 \\
 &\Leftrightarrow c_0 < 1,
 \end{aligned}$$

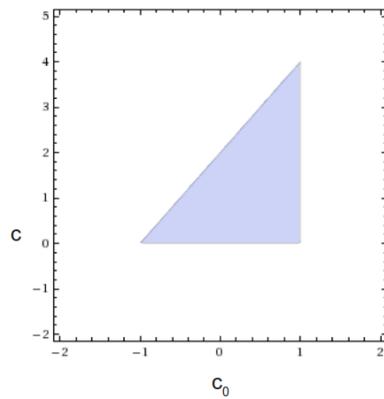
(29) aus

$$\begin{aligned}
 \text{Spur } A = \lambda_1 + \lambda_2 &\Rightarrow 1 - c + c_0 < 2 \\
 &\Leftrightarrow c > c_0 - 1 \\
 &\stackrel{c_0 \leq 1}{\Rightarrow} c > 0
 \end{aligned}$$

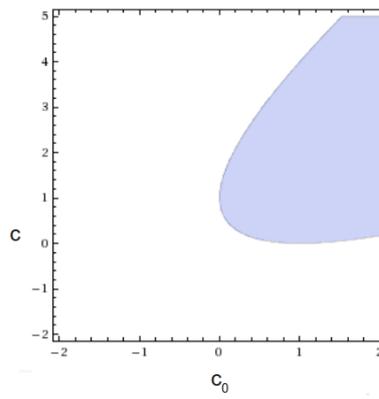
und die Bedingung (30) aus

$$\begin{aligned} & \lambda^2 + (c - c_0 - 1)\lambda + c_0 = 0 \\ \Rightarrow & |\lambda^2| + |-\lambda|(c_0 - c + 1) + |c_0| > 0 \\ \Rightarrow & 2c_0 - c + 2 > 0. \end{aligned}$$

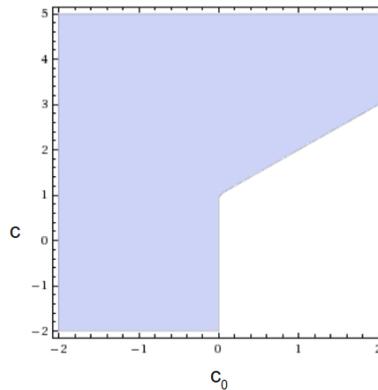
Der Konvergenzbereich im c_0 - c -Raum ist der in Abbildung 6(a) gezeigte. Sind die Parameter c_0 und c so gewählt, dass sie im Konvergenzbereich liegen, konvergiert die PSO gegen den Fixpunkt.



(a) Konvergenzbereich im c_0 - c -Raum



(b) Bereich der harmonischen Oszillation im c_0 - c -Raum



(c) Bereich der überspringenden Bewegung im c_0 - c -Raum

Abbildung 6: Verhalten der PSO in Abhängigkeit von der Wahl der Parameter c_0 und c .

Gilt für die Eigenwerte λ_1 und λ_2 der Matrix A , dass $\mathcal{I}m(\lambda_1), \mathcal{I}m(\lambda_2) \neq 0$ sind, so schwingt die Partikelposition harmonisch um den Fixpunkt. Die Eigenwerte von A sind $\lambda_{1/2} = -\frac{c-c_0-1}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{c-c_0-1}{2}\right)^2 - c_0}$ und somit komplexe Zahlen,

wenn

$$\begin{aligned} & \left(\frac{c - c_0 - 1}{2} \right)^2 - c_0 < 0 \\ \Leftrightarrow & \frac{1}{4}(c_0^2 + c^2 - 2c_0c - 2c_0 - 2c + 1) < 0 \\ \Leftrightarrow & c_0^2 + c^2 - 2c_0c - 2c_0 - 2c + 1 < 0 \end{aligned}$$

gilt. Der Bereich der Harmonischen Oszillation ist in Abbildung 6(b) dargestellt.

Die Entwicklung eines Partikels weist Zickzackbewegungen über den Fixpunkt auf, wenn $\mathcal{R}e(\lambda_1) < 0$ oder $\mathcal{R}e(\lambda_2) < 0$. Das ist der Fall, wenn

$$\begin{aligned} c_0 - c + 1 & < 0 \quad \text{oder} \\ c_0 & < 0. \end{aligned}$$

Ist $c_0 - c + 1 < 0$, so ist $\pm \sqrt{\left(\frac{c-c_0-1}{2}\right)^2 - c_0}$ der Imaginärteil der Eigenwerte und $-\frac{c-c_0-1}{2}$ der negative Realteil.

Ist $c_0 < 0$, so gilt für einen der beiden Eigenwerte, o.B.d.A. λ_2 ,

$$\begin{aligned} \lambda_2 &= \frac{c_0 - c + 1}{2} - \sqrt{\left(\frac{c_0 - c + 1}{2}\right)^2 - c_0} \\ &= \underbrace{\frac{-|c_0| - c + 1}{2}}_I - \underbrace{\sqrt{\left(\frac{-|c_0| - c + 1}{2}\right)^2 + |c_0|}}_{II} \end{aligned}$$

und $I < II$ und somit $\mathcal{R}e(\lambda_2) < 0$. Das entsprechende Gebiet ist in Abb. 6(c) gezeigt.

3.5.5. Einfluss der Zufallszahlen

Die Betrachtung der nicht deterministischen Version der PSO führt dazu, dass sich der Punkt $p_i(t)$ dem ein Partikel zum Zeitpunkt t zustrebt als

$$p_i(t) = \frac{c_1 r_1}{c_1 r_1 + c_2 r_2} k_i(t) + \frac{c_2 r_2}{c_1 r_1 + c_2 r_2} g(t)$$

ergibt. Dieser Punkt ändert sich durch die Wahl zufälliger Zahlen r_1 und r_2 für jeden Partikel zu jeder Iteration. Damit ist eine höhere Exploration des Parameterraums in der Nähe der besten gefundenen Punkte zu erwarten.

4. Anwendung der Partikelmethode auf Ozeanmodelle

4.1. Vier-Box-Modell der thermohalinen Zirkulation im Atlantik

Das in Zickfeld et al. (2004, [19]) eingeführte Modell beschreibt die thermohaline, d.h. die durch Unterschiede in Temperatur und Salzgehalt angetriebene, Zirkulation im Atlantik. Dieses ist für den Wärmetransport aus äquatorialen Regionen in den nordatlantischen Raum verantwortlich (bis zu 10^{15} W). Im Grunde ist diese Zirkulation ein Teil einer globalen Zirkulation. Sie wird im vorgestellten Modell aber isoliert betrachtet.

Angetrieben wird die thermohaline Zirkulation durch das Oberflächenwasser, das nach Norden strömt, verdunstet, Wärme an die Umgebung abgibt und dabei abkühlt. Der Salzgehalt und somit die Dichte des Oberflächenwassers steigt, bis es im Nordatlantik absinkt und Tiefenwasser bildet.

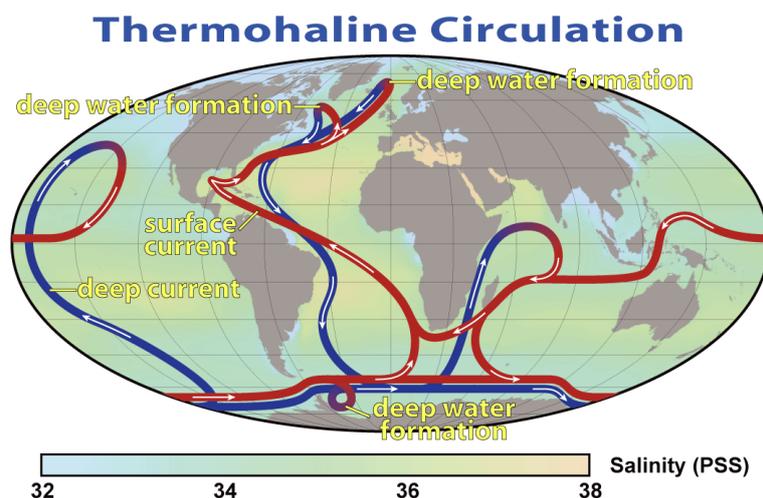


Abbildung 7: Thermohaline Zirkulation (Bildautor: Robert Simmon, NASA. Änderungen durch Robert A. Rohde. Public Domain)

4.1.1. Modellbeschreibung

Das hier betrachtete Modell beschreibt die thermohaline Zirkulation im Atlantik durch vier Gitterboxen, einer südlichen, einer tropischen und einer nördlichen Box, sowie einer Tiefseebox (siehe Abbildung 8). Zwischen benachbarten Boxen gibt es einen Volumenfluss, der die thermohaline Zirkulation repräsentiert. Das Wasser sinkt im Norden ab und strömt im Süden wieder nach oben. Die Boxen an der Oberfläche tauschen zusätzlich Wasser und Wärme mit der Atmosphäre aus.

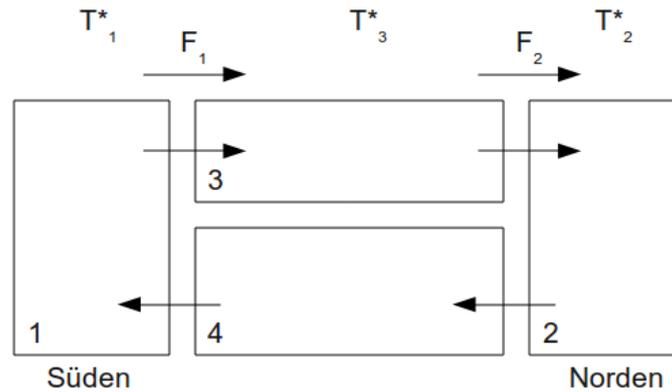


Abbildung 8: Vier-Box-Modell der thermohalinen Zirkulation im Atlantik

Die tropische Box reicht dabei von 30°S bis 45°N und beschreibt den Fluss in etwa 1000m Tiefe. Die nördliche Box reicht von 45°N bis 70°N , welches die Gegend ist, in der das nordatlantische Tiefenwasser gebildet wird. In etwa 3000m Tiefe fließt das Wasser wieder südwärts, was durch die Tiefseebox repräsentiert wird. Die südliche Box reicht schließlich von 60°S bis 30°S , wo im realen Ozean eine Vermischung mit dem Zirkumpolarstrom stattfindet. Dieses Modell beschreibt den Atlantik im Gegensatz dazu als geschlossenes System ohne Austausch mit anderen Ozeanen.

In dem Modell wird der Volumentransport $m(t)$, auch Overturning genannt, entlang der Längengrade zum Zeitpunkt t proportional zur Differenz der Dichten $\rho_1(t)$ und $\rho_2(t)$ in den Boxen 1 und 2 angenommen.

$$m(t) = \frac{k(\rho_2(t) - \rho_1(t))}{\rho_0} = k(\beta(S_2(t) - S_1(t)) - \alpha(T_2(t) - T_1(t))) \quad (31)$$

Hierbei sind $S_i(t)$ der Salzgehalt und $T_i(t)$ die Temperatur in der Box i , k eine hydraulische Konstante, ρ_0 eine Referenzdichte und α sowie β Ausdehnungskoeffizienten. Die Temperaturen und Salzgehalte der Oberflächenboxen werden von der Atmosphäre beeinflusst. Der Wärmefluss zwischen einer Box und der Atmosphäre wird dabei durch $Q(t) = \Gamma(T_i^* - T_i(t))$ beschrieben. T_i^* ist hierbei die Temperatur der Ozeanbox, die sich einstellt, wenn keine Umwälzbewegung (Overturning) stattfindet, und $T_i(t)$ die Wassertemperatur. Der Oberflächenfluss $F_1(t)$ bzw. $F_2(t)$ beinhaltet den Transport von Wasserdampf durch die Atmosphäre und den windgetriebenen Transport im Ozean.

Man erhält die folgenden Differentialgleichungen:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} T_1(t) &= \frac{m(t)}{V_1} (T_4(t) - T_1(t)) + \lambda_1 (T_1^* - T_1(t)) \\
 \frac{\partial}{\partial t} T_2(t) &= \frac{m(t)}{V_2} (T_3(t) - T_2(t)) + \lambda_2 (T_2^* - T_2(t)) \\
 \frac{\partial}{\partial t} T_3(t) &= \frac{m(t)}{V_3} (T_1(t) - T_3(t)) + \lambda_3 (T_3^* - T_3(t)) \\
 \frac{\partial}{\partial t} T_4(t) &= \frac{m(t)}{V_4} (T_2(t) - T_4(t)) \\
 \frac{\partial}{\partial t} S_1(t) &= \frac{m(t)}{V_1} (S_4(t) - S_1(t)) + \frac{S_0 F_1(t)}{V_1} \\
 \frac{\partial}{\partial t} S_2(t) &= \frac{m(t)}{V_2} (S_3(t) - S_2(t)) + \frac{S_0 F_2(t)}{V_2} \\
 \frac{\partial}{\partial t} S_3(t) &= \frac{m(t)}{V_3} (S_1(t) - S_3(t)) + \frac{S_0 (F_1(t) - F_2(t))}{V_3} \\
 \frac{\partial}{\partial t} S_4(t) &= \frac{m(t)}{V_4} (S_2(t) - S_4(t))
 \end{aligned}$$

Dabei sind V_i die Volumina der Boxen, λ_i ist eine thermische Konstante, T_i^* die Relaxationstemperaturen und $F_i(t)$ die Oberflächenflüsse. Der Volumentransport $m(t)$ ist, wie in Gleichung (31) angegeben, wiederum eine Funktion des Salzgehaltes und der Temperatur.

Die Konstante λ_i ergibt sich jeweils aus

$$\lambda_i = \frac{\Gamma}{c \rho_0 z_i}$$

mit der thermischen Konstante Γ , der spezifischen Wärmekapazität des Meerwassers c , der Dichte des Meerwassers ρ_0 und der Boxdicke z_i .

4.1.2. Konstanten und Parameter

In diesem Modell der thermohalinen Zirkulation gibt es Konstanten und Parameter. Für diese wurden von Zickfeld et al. (2004, [19]) die Werten bereits so festgelegt, dass das Modell die physikalischen Gegebenheiten im Atlantik gut beschreibt. Aufgabe der Parameterschätzung soll es sein, einige der Parameter aus Modellzuständen zu rekonstruieren.

Konstanten:

spezifische Wärmekapazität des Meerwassers	c	$4000 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$
Dichte des Meerwassers	ρ_0	1025 kg m^{-3}
thermischer Ausdehnungskoeffizient	α	$1,7 \cdot 10^{-4} \text{ K}^{-1}$
Ausdehnungskoeffizient bzgl. des Salzgehaltes	β	$8 \cdot 10^{-4} \text{ psu}^{-1}$
Referenzsalzgehalt	S_0	35 psu

Parameter:

Volumen der südlichen Box	V_1	$1,1 \cdot 10^{17} \text{m}^3$
Volumen der nördlichen Box	V_2	$0,4 \cdot 10^{17} \text{m}^3$
Volumen der tropischen Box	V_3	$0,68 \cdot 10^{17} \text{m}^3$
Volumen der Tiefseebox	V_4	$0,05 \cdot 10^{17} \text{m}^3$
Tiefe der südlichen Box	z_1	3000m
Tiefe der nördlichen Box	z_2	3000m
Tiefe der tropischen Box	z_3	1000m
Oberflächentransport von der südlichen in die tropische Box	F_1	0,014Sv
Oberflächentransport von der tropischen in die nördliche Box	F_2	0,065Sv
Ruhetemperatur der südlichen Box	T_1^*	6,6°C
Ruhetemperatur der nördlichen Box	T_2^*	2,7°C
Ruhetemperatur der tropischen Box	T_3^*	11,7°C
thermische Konstante	Γ	$7,3 \cdot 10^8 \text{ J a}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ K}^{-1}$
Flusskonstante	k	$25,4 \cdot 10^{17} \text{ m}^3 \text{ a}^{-1}$

Die Parameter T_1^* , T_2^* , T_3^* , F_1 und F_2 sollen mithilfe der Partikelmethode geschätzt werden. In das Kostenfunktional der Schätzung gehen dabei die Gleichgewichtswerte aus Zickfeld et al. (2004, [19]) ein:

T_1^{eq}	6,5 °C
T_2^{eq}	4,7 °C
T_3^{eq}	11,4 °C
$S_1^{eq} - S_2^{eq}$	-0,02 psu
$S_3^{eq} - S_2^{eq}$	-0,1 psu
$S_3^{eq} - S_1^{eq}$	-0,08 psu
m_{eq}	22,6 Sv

Diese Werte werden erreicht, wenn das Modell mit den obigen Konstanten und Parametern bis in einen Gleichgewichtszustand iteriert wird.

4.1.3. Experimente

An dem Vier-Box-Modell soll untersucht werden, wie gut die Partikelmethode für die Parameterschätzung in Ozeanmodellen geeignet sind. Dafür werden anhand eines Modelllaufes mit festgelegten Parameter T_1^* , T_2^* , T_3^* , F_1 und F_2 die Temperaturen und Salzgehalte in den Boxen sowie das Overturning im Gleichgewicht ermittelt. Anhand des aus diesen Werten erstellten Kostenfunktionals sollen die Parameter anschließend rekonstruiert werden. Folgende Experimente werden durchgeführt:

1. Partikel-Schwarm-Optimierung

- a) Untersuche den Einfluss der Partikelanzahl
- b) Untersuche den Einfluss der Anzahl der in das Kostenfunktional eingehenden Messwerte

2. Partikelfilter

- a) Untersuche den Einfluss der Partikelanzahl
- b) Untersuche den Einfluss der Anzahl der in das Kostenfunktional eingehenden Messwerte

Nachdem diese Konfigurationen untersucht wurden, wird ein zweiter Gleichgewichtszustand des Modells mit einem geringeren Overturning erzeugt und für diesen Zustand ebenfalls die Parameter rekonstruiert.

Als Kostenfunktionale finden das quadratische Kostenfunktional

$$J_{sum}(x) = \sum_{i=1}^K \frac{(y_i^{eq} - (\mathcal{M}(x))_i)^2}{\sigma_i^2}$$

und das logarithmische Kostenfunktional

$$J_{log}(x) = \sum_{i=1}^K \max \left\{ 0, \ln \left(\frac{|y_i^{eq} - (\mathcal{M}(x))_i|}{\sigma_i} \right) \right\}$$

Verwendung. Ihre Abwandlungen sind in Kapitel 4.1.5 aufgezeigt. Es sind $(\mathcal{M}(x))_i$ die aus einem Modelllauf gewonnenen Gleichgewichtswerte und y^{eq} die angestrebten Gleichgewichtswerte wie sie in der Tabelle auf Seite 54 gegeben sind. Die σ_i^2 sind die Fehlervarianzen und gewichten die Summanden entsprechend. Die Gewichtung durch die Varianzen ist hier von Bedeutung, da es sich um verschiedene Einheiten mit verschieden großen Fehlern handelt. Anhand der Gewichte können dabei die Fehler des Gleichgewichtszustandes aber auch Präferenzen innerhalb der Kostenfunktionale berücksichtigt werden.

4.1.4. Erzeugung eines geringeren Overturnings

Die Umwälzströmung im Ozean wird als Overturning bezeichnet. Hier sollen nun Parameter T_1^* , T_2^* , T_3^* , F_1 und F_2 gefunden werden, die im Modell ein geringeres Overturning als in der bisherigen Konfiguration erzeugen. Diese Parameter sollen anhand der Abschnitte 4 und 5 von Zickfeld et al. (2004, [19]) bestimmt werden. Anschließend sollen die Parameter mit der Partikel-Schwarm-Optimierung und dem Partikelfilter rekonstruiert werden. Ein Vergleich der Schätzungen aus den Experimenten mit hohem und geringem Overturning gibt dann Aufschluss darüber, ob die erhaltenen Overturningraten und deren Fehlerintervalle hinreichend weit voneinander entfernt sind.

Durch Änderungen der mittleren globalen Temperatur (GMT - global mean temperature) werden sowohl die Relaxationstemperaturen der Oberflächenboxen T_i^* , $i \in \{1, 2, 3\}$, als auch die Süßwassertransporte F_1 und F_2 beeinflusst. Als Konsequenz ändert sich wiederum die Overturningrate.

Die Änderung der Relaxationstemperaturen ΔT_i^* wird proportional zur Änderung der GMT ΔT^{GL} angenommen, so dass

$$\Delta T_i^*(t) = p_i \Delta T^{GL}(t) \quad (i = 1, 2, 3)$$

mit einer Proportionalitätskonstante p_i ist. Die Änderungen der Süßwassertransporte sind etwa proportional zu den mittleren Temperaturänderungen in der jeweiligen Sphären ΔT^{NH} und ΔT^{SH} :

$$\begin{aligned} \Delta F_1(t) &= h_1 \Delta T^{SH}(t) = h_1 p_{SH} \Delta T^{GL} \\ \Delta F_2(t) &= h_2 \Delta T^{NH}(t) = h_2 p_{NH} \Delta T^{GL} \end{aligned}$$

mit folgenden Werten für die Konstanten:

Temperaturkonstanten	
p_1	0.86
p_2	1.07
p_3	0.73
p_{SH}	0.93
p_{NH}	1.07
Hydrologische Konstanten	
h_1	-0.005 Sv °C ⁻¹
h_2	0.013 Sv °C ⁻¹

Indem die Parameter T_i^* und F_i als zeitlich veränderliche Funktionen aufgefasst werden, sollen Daten zu zwei unterschiedlichen Gleichgewichtszuständen des Modells erzeugt werden. Im ersten Durchlauf wird die GMT nicht geändert. Im zweiten Durchlauf soll sie über 150 Jahre hinweg linear um 6.0 K ansteigen und dann konstant bleiben. Damit sich ein Gleichgewichtszustand einstellt, beträgt die Modelllaufzeit jeweils mindestens 2000 Jahre.

Folgende Werte wurden so ermittelt:

Modellwerte bei konstanter GMT

T_1^*	6.6°C	T_1	6.4°C	S_1	34.98 psu
T_2^*	2.7°C	T_2	4.7°C	S_2	34.96 psu
T_3^*	11.7°C	T_3	11.4°C	S_3	35.06 psu
F_1	0.014 Sv	T_4	4.7°C	S_4	34.96 psu
F_2	0.065 Sv				
m	22.24 Sv				

Modellwerte bei Anstieg der GMT um 6.0 K

T_1^*	11.8°C	T_1	11.7°C	S_1	34.90 psu
T_2^*	9.1°C	T_2	10.5°C	S_2	34.92 psu
T_3^*	16.4°C	T_3	16.2°C	S_3	35.22 psu
F_1	-0.014 Sv	T_4	10.5°C	S_4	34.92 psu
F_2	0.148 Sv				
m	17.86 Sv				

In der ersten Spalte sind die zu schätzenden Parameter zu finden, in den anderen beiden Spalten die Werte, die in das Kostenfunktional eingehen sollen.

4.1.5. Kostenfunktionale

Um die Güte des Partikelfilters in Verbindung mit dem THC-4-Box-Modell zu untersuchen, werden folgende Kostenfunktionale benutzt.

$$\begin{aligned}
 J_1(x) &= \sum_{i=1}^3 \frac{1}{\sigma_{T_i}^2} (T_i - \hat{T}_i)^2 \\
 &\quad + \frac{1}{\sigma_{S_{12}}^2} (S_1 - S_2 - \hat{S}_1 - \hat{S}_2)^2 + \frac{1}{\sigma_{S_{32}}^2} (S_3 - S_2 - \hat{S}_3 - \hat{S}_2)^2 \\
 &\quad + \frac{1}{\sigma_{S_{31}}^2} (S_3 - S_1 - \hat{S}_3 - \hat{S}_1)^2 + \frac{1}{\sigma_m^2} (m - \hat{m}) \\
 J_{3log}(x) &= \sum_{i=1}^4 \max \left\{ 0, \ln \frac{|T_i - \hat{T}_i|}{\sigma_{T_i}} \right\} + \sum_{i=1}^4 \max \left\{ 0, \ln \frac{|S_i - \hat{S}_i|}{\sigma_{S_i}} \right\} \\
 &\quad + \max \left\{ 0, \ln \frac{|m - \hat{m}|}{\sigma_m} \right\} \\
 J_5(x) &= \frac{1}{\sigma_m^2} (m - \hat{m}) \\
 J_6(x) &= \sum_{i=1,2} \frac{1}{\sigma_{T_i}^2} (T_i - \hat{T}_i)^2 + \frac{1}{\sigma_{S_3}^2} (S_3 - \hat{S}_3)^2 \\
 J_{6log}(x) &= \sum_{i=1}^3 \max \left\{ 0, \ln \frac{|T_i - \hat{T}_i|}{\sigma_{T_i}} \right\} \\
 J_{7log}(x) &= \sum_{i=1}^3 \max \left\{ 0, \ln \frac{|T_i - \hat{T}_i|}{\sigma_{T_i}} \right\} + \max \left\{ 0, \ln \frac{|S_2 - \hat{S}_2|}{\sigma_{S_2}} \right\}
 \end{aligned}$$

Hier sind \hat{T}_i und \hat{S}_i jeweils die Temperaturen und Salzgehalte in der Box i , die im Modellgleichgewicht erreicht werden sollen. Das entsprechende Overturning ist \hat{m} . Diese Werte repräsentieren die Messwerte, auf die sich die Kostenfunktionale beziehen.

4.1.6. Experimente mit der PSO

Anhand der Experimente soll das Verhalten der Partikelmethode bei Anwendung auf das Modell THC-4-Box untersucht werden. Die Sollwerte der Schätzung finden sich in Abschnitt 4.1.4.

Als Kennwerte der Parameterschätzung sind die Folgenden festgesetzt:

- Intervalle in denen Parameter geschätzt werden:

$$T_1^* \in [1.0, 15.0]$$

$$T_2^* \in [1.0, 15.0]$$

$$T_3^* \in [5.0, 20.0]$$

$$F_1 \in [-0.2, 0.2]$$

$$F_2 \in [-0.2, 0.2]$$

- Varianzen der Beobachtungen:

$$\sigma_{T_i} = 0.2$$

$$\sigma_{S_i} = 0.05$$

$$\sigma_m = 0.2$$

Als Kostenfunktional wird zunächst J_{3log} gewählt. Dieses wertet die Absolutwerte von Temperatur und Salzgehalt in allen Boxen sowie das Overturning aus. Die Parametersuche wird abgebrochen, wenn ein Partikel gefunden ist, dessen Kosten Null betragen oder sich die Partikelkosten über 15 Iterationen nicht ändern. Es werden jeweils 30 Experimente gemacht um die Parameter T_1^* , T_2^* und T_3^* zu schätzen. Initialisiert werden die Partikel gleichverteilt über den gesamten Parameterraum. Die Gewichtungskonstanten in der Bewegungsgleichung der PSO sind $c_1 = 0.7$ und $c_1 = c_2 = 1.5$. Die Ergebnisse des Experiments finden sich in Tabelle 1.

Die Sollwerte der Schätzung sind $T_1^* = 6.6$, $T_2^* = 2.7$ und $T_3^* = 11.7$. Die angegebenen Werte sind jeweils für die besten Lösungen der 30 Durchläufe mit folgenden Abkürzungen bezeichnet:

mean	Mittelwert,
med	Median,
prob	Maximumstelle des Histogramms bzw. der Kerndichteschätzung,
min	Minimum,
max	Maximum,
std	Schätzung für die Standardabweichung.

Des Weiteren ist „hits“ die Anzahl der Durchläufe mit $J_{3log} = 0$ und „Samplings“ die Anzahl der Auswertungen des THC-4-Box-Modells bis zum Gleichgewichtszustand.

Es zeigt sich, dass ab 20 Partikel die Trefferrate ($J_{2log}(x) = 0$) etwa 1.0 beträgt. Mit weniger Partikeln kann es passieren, dass der Partikelschwarm keine Lösung mit optimalen Kosten findet. Als Partikelanzahl scheinen 20 bis 40 sinnvoll. Da es auch für Versuche mit hoher Partikelanzahl zu Abweichungen von den häufigsten Werten kommt (siehe min und max), sollten bei der PSO stets

mehrere Neustarts durchgeführt und die Ergebnisse statistisch ausgewertet werden. Zum Erhalt der Lösung zeigen sich der Median und die Maximumstelle des Histogramms bzw. der Dichteschätzung auch bei geringer Trefferquote als gute Schätzer.

Im folgenden Experiment werden die Parameter T_1^* , T_2^* , T_3^* , F_1 und F_2 simultan geschätzt. Als Kostenfunktionale kommen J_{3log} , J_{6log} und J_{7log} zum Einsatz. Die Ergebnisse finden sich in Tabelle 3. Es zeigt sich, dass ab 30 Partikeln mit einer Trefferrate ≥ 0.90 gerechnet werden kann und bei mehreren Versuchen der Median ein guter Schätzer ist. Zu den geschätzten Parametern und dem Overturning m ist im Einzelnen folgendes zu sagen:

T_1^* wird mit allen verwendeten Kostenfunktionalen gut geschätzt.

T_2^* wird mit den Kostenfunktionalen J_{3log} gut geschätzt. J_{6log} und J_{7log} liefert eine größere Standardabweichung in der Schätzung.

T_3^* wird mit etwas kleinerer Standardabweichung der Ergebnisse gut geschätzt.

$F_{1/2}$ sind starken Schwankungen unterworfen, sobald nur ein Teil der Beobachtungen in das Kostenfunktional eingeht (J_{6log}, J_{7log}). Diese Werte sind somit besonders empfindlich gegenüber dem gewählten Kostenfunktionalen.

m wird in der richtigen Größenordnung geschätzt. Mit J_{6log} ist der Wert etwas zu groß, mit J_{7log} deutlich zu groß. Bemerkenswert ist dabei, dass J_{7log} neben den Oberflächentemperaturen, die auch in J_{6log} berücksichtigt werden, zusätzlich einen Salzgehalt einbezieht.

Allgemein zeigt sich, dass Schwankungen in den Schätzungen zunehmen, wenn weniger Daten in das Kostenfunktional einfließen.

Tabelle 5 zeigt Experimente zur Rekonstruktion der Parameter T_1^* , T_2^* , T_3^* , F_1 und F_2 unter Verwendung von Kostenfunktionalen, die mit einer um 6 K erhöhten globalen Mitteltemperatur konstruiert wurden. Die Relaxationstemperaturen werden gut rekonstruiert, die Süßwasserflüsse sind starken Schwankungen unterworfen. Für F_1 beträgt die Standardabweichung der geschätzten Werte etwa 20, für F_2 etwa 30. Das sind die gleichen Werte wie bei den Experimenten bzgl. der niedrigeren globalen Mitteltemperatur. Aus Abbildung 9 wird deutlich, dass es für das ausgewählte Kostenfunktional J_{6log} , in das nur die Temperaturen der Oberflächenboxen eingehen, keine eindeutige Lösung gibt. Die Histogramme weisen für die zu schätzenden Parameter und das daraus resultierende Overturning jeweils zwei Maxima auf. Die Trefferrate beträgt bei allen Kostenfunktionalen für 40 Partikel mindestens 0.9. Im Einzelnen beobachtet man für die logarithmischen Kostenfunktionale das gleiche Verhalten wie für die in Tabelle 3 aufgeführten Experimente. Die Experimente mit J_{6sum} zeigen, dass speziell für das Overturning m das Maximum der Wahrscheinlichkeitsdichte ein besserer Schätzer ist als der Median der ermittelten Werte.

Insgesamt lässt sich sagen, dass die Schätzungen der Süßwasserflüsse auch bei geringen Kosten starken Schwankungen unterworfen sind, sobald nur noch

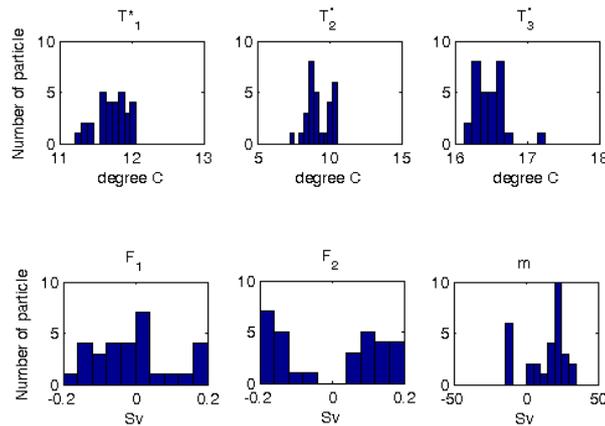


Abbildung 9: Histogramme der Ergebnisse von 30 PSO-Experimenten mit je 40 Partikeln und der Kostenfunktion J_{6log}

wenige Beobachtungen in das Kostenfunktional eingehen. Benutzt man ein σ -unempfindliches logarithmisches Kostenfunktional und den Median der Ergebnisse mehrerer Partikel-Schwarm-Optimierungen zur Ermittlung des Overturnings, so erhält man gute Schätzungen. Wird weiterhin die Varianz σ der Schätzwerte als Maß für die Genauigkeit der Schätzung benutzt, so erhält man gerade noch einen leeren Schnitt der σ -Intervalle um die Schätzungen des Overturnings der beiden Experimente.

Eine wichtige Beobachtung ist, dass es in Bezug auf die PSO „gut“ und „schlecht“ zu schätzende Parameter gibt. Bei letzteren ist davon auszugehen, dass sie für den angenommenen Fehler einen großen Lösungsraum besitzen.

4.1.7. Experimente mit dem Partikelfilter

Die Experimente zum Partikelfilter werden analog zu denen des vorherigen Abschnitts durchgeführt. Als Verfahren zur Bestimmung der Wahrscheinlichkeitsdichten im Parameterraum wird eine Kerndichteschätzung mit Gaußkernen verwendet.

In Tabelle 7 sind die Ergebnisse verschiedener Experimente mit jeweils 30 Neuinitialisierungen der Partikelfilter dargestellt. Geschätzt werden die Parameter T_1^* , T_2^* , T_3^* , F_1 und F_2 nach heutigen Daten. Dabei sind zu Gunsten der besseren Übersicht nur die Ergebnisse für die Parameter T_2^* und F_2 dargestellt. Tabelle 9 zeigt die Ergebnisse für eine um 6 K erhöhte globale Mitteltemperatur. In Tabelle 11 sind beispielhaft Ergebnisse einiger Einzelexperimente dargestellt. Es wurden zwei Arten des Importance Samplings getestet. Einerseits wurden die neuen Partikel nach dem Resamplingschritt entsprechend einer Gauß-Verteilung um ihre Werte neu initialisiert (I1), andererseits wurden nur Partikelwerte übernommen, die bei der Neuverteilung geringere Kosten aufwiesen als zuvor (I2).

Betrachtet man zunächst die Experimente in Tabelle 7, erkennt man, analog zur Partikel-Schwarm-Optimierung, dass T_2^* in der richtigen Größenordnung

geschätzt wird. Der Fluss F_2 jedoch nicht zufriedenstellend reproduziert werden kann. In Abbildung 10 wird deutlich, dass durch die fast gleichmäßige Verteilung der Partikel bzgl. der Flüsse F_1 und F_2 , der Erwartungswert dieser um Null liegt und die zugehörige Varianz der Partikel vergleichsweise groß ist. Das äußert sich auch in den großen zugehörigen Konfidenzintervallen. Die Wahrscheinlichkeitsdichten der Relaxationstemperaturen T_i^* weisen dagegen ein schärfer abgegrenztes Maximum auf.

Folgendes ist zu beobachten:

- Die Varianz der T_2^* -Schätzungen nimmt mit zunehmender Partikelzahl asymptotisch ab. Die Konfidenzintervalle verkleinern sich entsprechend.
- Es ist effektiver wenige Partikel (im Beispiel 40) wiederholt mit dem Importance Sampling I2 neu zu generieren als viele Partikel (im Beispiel 200) einmalig mit dem Importance Sampling I1. Effektiver heißt hier, dass man mit weniger Modellauswertungen eine mindestens genau so gute Schätzung erhält.
- Bei ausreichend großer Partikelzahl werden die Parameter stabiler geschätzt als mit der Partikel-Schwarm-Optimierung. Es treten kleinere Schwankungen in aus den Parameterwerten reproduzierten Overturning m auf.
- Je weniger Daten in das Kostenfunktional einfließen, um so stärkeren Schwankungen sind die Schätzungen unterworfen.

Die Schätzungen für eine erhöhte globale Mitteltemperatur in Tabelle 9 zeigen die zu erwartenden geringeren Overturningraten m mit einer geringen Standardabweichung. Eine deutliche Erhöhung der Partikelzahl von 40 auf 200 führt bei einer Verfünfachung des Rechenaufwandes nur zu geringen Verbesserungen in der Schätzung. Die Ergebnisse einzelner Experimente in Tabelle 11 verdeutlichen jedoch, dass trotz einer guten Schätzung der Relaxationstemperaturen das Overturning nicht gut zu reproduzieren ist. Es werden keine signifikant unterschiedlichen Overturningraten ermittelt. Die Ursache liegt in den schlechten Schätzungen der Süßwassertransporte.

4.1.8. Beurteilung der Experimente

Bei der Anwendung der Partikelmethode auf Ozeanmodelle spielt, in Bezug auf die Rechenzeit, die Anzahl der Modellauswertungen eine wesentliche Rolle. Die Rechenzeiten der verwendeten Algorithmen sind im Vergleich zu den Rechenzeiten der Modellauswertungen vernachlässigbar. Eine Partikelmethode kann als effektiv bezeichnet werden, wenn sie zur Parameterschätzung weniger Modellauswertungen benötigt als ein naives Ausprobieren. Im Folgenden wird davon ausgegangen, dass die Wahl des Kostenfunktionals keine Rolle spielt. Sollen k Parameter x_i mit $i = 1, \dots, k$ aus dem Parameterraum $[x_1^-, x_1^+] \times \dots \times$

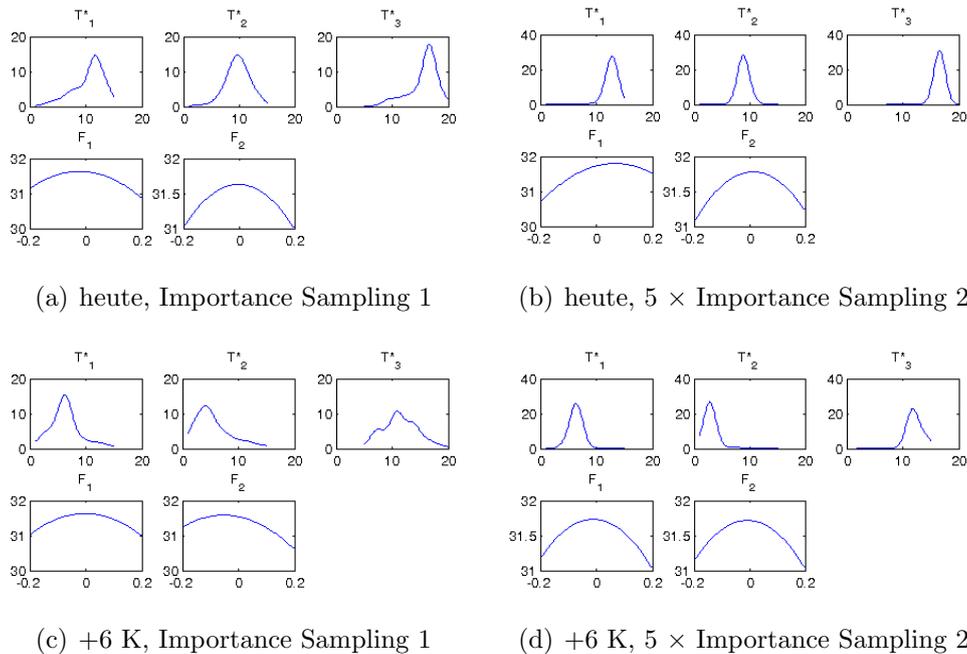


Abbildung 10: Wahrscheinlichkeitsdichten (nicht normiert) der geschätzten Parameter bei 200 Partikeln und den Kostenfunktional $7log$. Vgl. Tabelle 11. Auf der Abszisse sind jeweils die Temperaturen in $^{\circ}C$ bzw. die Süßwasserflüsse in Sv aufgetragen.

$[x_k^-, x_k^+]$ mit den Genauigkeiten $\sigma_1, \dots, \sigma_k$ geschätzt werden, so sind unter Verwendung eines Gitters mit der Seitenlänge 2σ

$$N = \prod_{i=1}^k \left\lceil \frac{\Delta x_i}{2\sigma_i} \right\rceil$$

Auswertungen nötig. Dabei ist $\Delta x = x^+ - x^-$. Das Ozeanmodell muss bei der Schätzung der Parameter T_1^*, T_2^*, T_3^*, F_1 und F_2 sowie $\sigma(T^*) = 0.5$ und $\sigma(F) = 0.005$

$$N = 4390400$$

mal ausgewertet werden. Danach sind allerdings auch die Kosten aller Parameterkombinationen im Gitter und das Kostenminimum sicher bekannt.

Geht man das Problem stochastisch an und zieht aus einem Intervall $[x^-, x^+]$ N gleichverteilte Stichproben, so liegt keine der Stichproben mit der Wahrscheinlichkeit $p_{miss} = \left(1 - \frac{2\sigma}{\Delta x}\right)^N$ in einem 2σ -Teilintervall um den Parameter, der das Kostenfunktional minimiert. Mindestens eine der Stichproben liegt mit der Wahrscheinlichkeit $p_{hit} = 1 - \left(1 - \frac{2\sigma}{\Delta x}\right)^N$ in dem Intervall. Daraus folgt, dass $N = \frac{\ln(1-p_{hit})}{\ln(1-\frac{2\sigma}{\Delta x})}$ Stichproben nötig sind um mit einer Wahrscheinlichkeit von p_{hit} das 2σ -Intervall zu treffen. Sollen mehrere Parameter aus einem Parameterraum $[x_1^-, x_1^+] \times \dots \times [x_k^-, x_k^+]$ mit zugehörigen $\sigma_1, \dots, \sigma_k$ geschätzt werden,

ergeben sich analog

$$p_{miss} = \left(1 - \prod_{i=1}^k \frac{2\sigma_i}{\Delta x_i} \right)^N$$

und

$$p_{hit} = 1 - \left(1 - \prod_{i=1}^k \frac{2\sigma_i}{\Delta x_i} \right)^N$$

sowie

$$N = \left\lceil \frac{\ln(1 - p_{hit})}{\ln \left(1 - \prod_{i=1}^k \frac{2\sigma_i}{\Delta x_i} \right)} \right\rceil.$$

Die Entwicklung der Trefferwahrscheinlichkeit mit steigender Anzahl der Stichproben zeigt Abbildung 11. Eine Trefferwahrscheinlichkeit $p_{hit} = 0.9$ wird mit etwa 10^7 Partikel, $p_{hit} = 0.99$ mit etwa $2 \cdot 10^7$ Partikel erreicht. Das sind deutlich mehr, als die etwa $4.4 \cdot 10^6$ benötigten Partikel beim Erheben der Stichprobe an den Gitterpunkten. Eine einfache stochastische Suche liefert also kein gutes Verfahren zur Parameterschätzung. Beide Vorgehensweisen sind nicht praktikabel für Ozeanmodellen, deren Auswertung einen hohen Rechenaufwand erfordert. Selbst bei nur einer Sekunde Rechenzeit für die Auswertung des Modells würde sich eine Gesamtrechenzeit von mehreren Tagen ergeben.

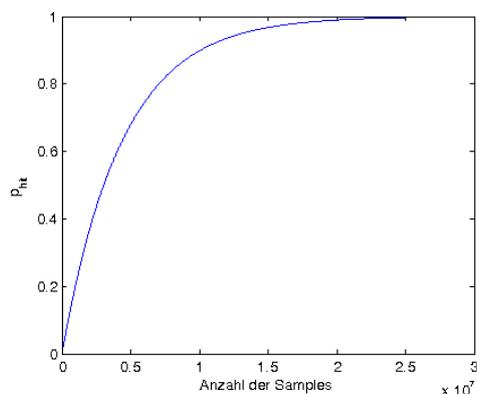


Abbildung 11: Trefferwahrscheinlichkeit p_{hit} in Abhängigkeit von der Partikelzahl bei stochastischer Suche im Parameterraum.

Die Ergebnisse bei der Schätzung der Süßwasserflüsse, habe gezeigt, dass diese schwer zu schätzen sind. Abbildung 12 zeigt den mit lückenhafter werdender Kostenfunktion größer werdenden Lösungsraum für die Schätzung der Süßwasserflüsse. Die Süßwasserflüsse lassen sich mit Kostenfunktionalen, in die nur wenige Parameter eingehen, nur grob schätzen. Der Lösungsraum der Parameterschätzung verkleinert sich mit der Hinzunahme weiterer Parameter oder der Erhöhung der Genauigkeit der in das Kostenfunktional eingehenden Werte.

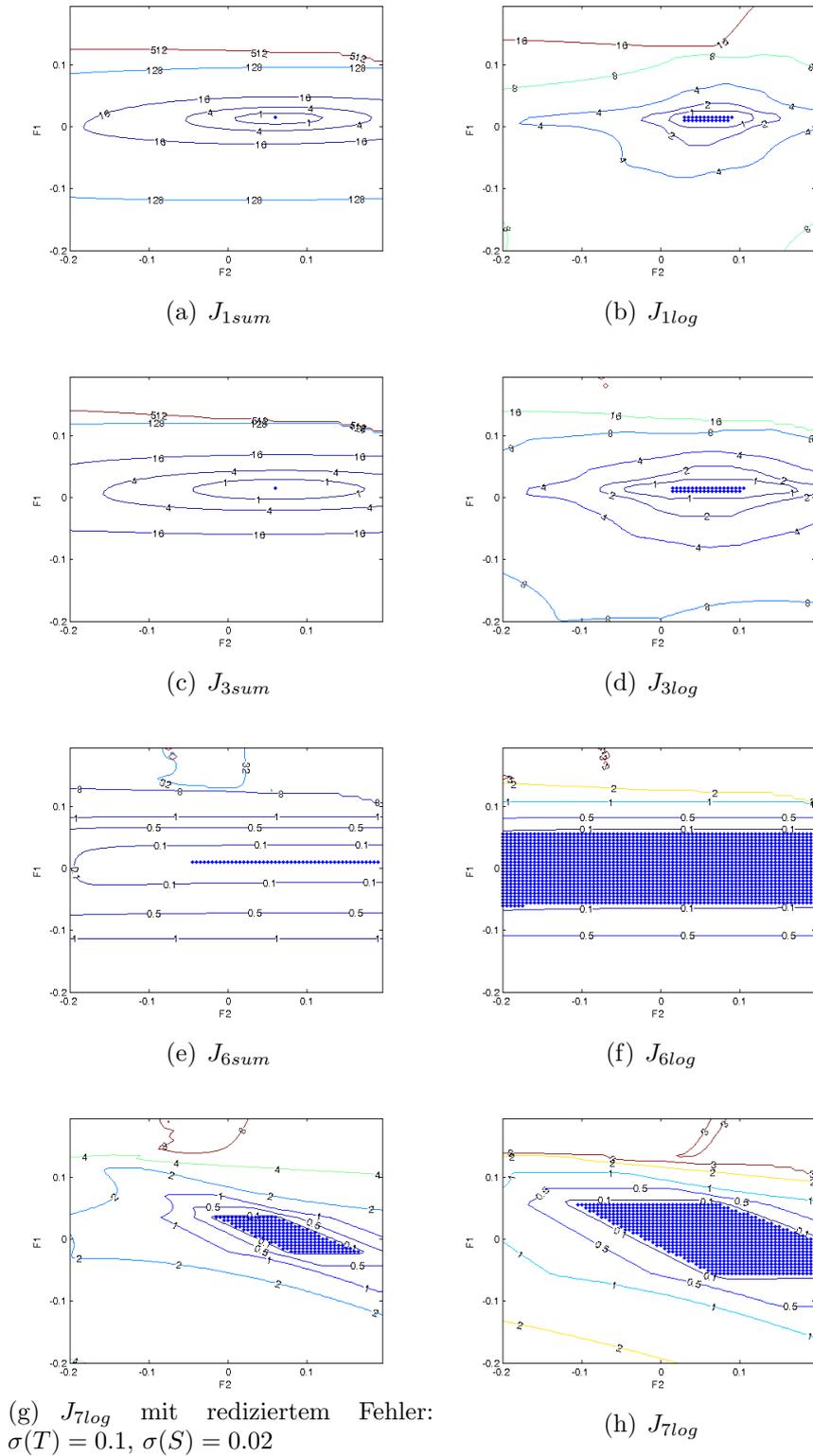


Abbildung 12: Kosten verschiedener Süßwasserflüsse F_1 und F_2 (in Sv) bei konstanten Relaxationstemperaturen $T_1^* = 6.6^\circ C$, $T_2^* = 2.7^\circ C$ und $T_3^* = 11.7^\circ C$. Gepunktet sind die Gebiete der Kostenminima (Lösungen der Parameterschätzung) dargestellt.

Die Partikelmethode benötigen deutlich weniger Modellauswertungen als eine systematische Parametersuche. Ebenso hat sich gezeigt, dass sich verschiedene Parameter, abhängig vom Kostenfunktional, verschieden gut schätzen lassen. Die Süßwasserflüsse F_1 und F_2 des Vier-Box-Modells lassen sich nur mit großem Fehler schätzen. Weder die Partikel-Schwarm-Optimierung (PSO) noch der Partikelfilter liefern hierfür sinnvolle Werte. Entsprechend groß sind die Varianzen der rekonstruierten Overturnings m . Der Partikelfilter erzeugt eine Wahrscheinlichkeitsdichte. Diese liefert zugleich Informationen über die Genauigkeit der Schätzung. So werden hier durch den Partikelfilter bei ähnlich vielen Modellauswertungen mehr Informationen gewonnen.

Eine Schwierigkeit der Parameterschätzung birgt das Kostenfunktional. In der Praxis wird es durch die verfügbaren Informationen gegeben sein, was bei zu wenigen Daten dazu führen kann, dass Parameter nicht hinreichend gut schätzbar sind.

4.2. HANSE-Modell des Atlantik

Das in diesem Kapitel verwendete Modell des Atlantik lehnt sich an das von Paul und Schulz (2002, [13]) sowie Marchal et al. (2007, [10]) beschriebene HANSE-Modell an.

4.2.1. Modellbeschreibung

Das Modell ist in die Teile Atmosphäre und Ozean gegliedert. Die wichtigsten Aspekte sollen hier erwähnt werden. Details sind in den entsprechenden Veröffentlichungen nachzulesen.

Atmosphäre: Die Windspannung ist als eine Funktion der geographischen Breite vorgegeben. Die Feuchtekapazität der Atmosphäre sowie die Wärmekapazitäten der Atmosphäre und des Landes werden mit Null angenommen. Der Wärmetransport geschieht unendlich schnell.

Es sei φ ein Breitengrad auf dem Modellgitter, $f_l(\varphi)$ dessen relativer Landanteil,

$$F(\varphi) = K(T_a(\varphi) - T_s(\varphi)) \quad (32)$$

der Wärmefluss zwischen Atmosphäre und Ozean mit der Atmosphärentemperatur $T_a(\varphi)$, der Oberflächentemperatur des Ozeans $T_s(\varphi)$ und dem Koeffizienten $K = 40 \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-1}$, $\text{div } H_a(\varphi)$ die Divergenz des Wärmetransports in der Atmosphäre, R_a^{SW} die kurzwellige Abstrahlung, A_0 der temperaturunabhängige Anteil der Langwellenstrahlungsbilanz und $B = 2,23 \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-1}$ der temperaturabhängige Teil der Langwellenstrahlungsbilanz. Dann ist die Wärmebilanz an einer geographischen Breite φ gegeben als

$$0 = -(1 - f_l(\varphi))K(T_a(\varphi) - T_s(\varphi)) - (A(\varphi) + BT_a(\varphi)) \quad (33)$$

mit $A(\varphi) = \text{div } H_a(\varphi) - R_a^{SW} + A_0$.

Es gelten $A_0 = R_{am}^{SW} - BT_{am}$ und $\text{div } H_a(\varphi) = A_1 P_2(\varphi) + R_a^{SW} - R_{am}^{SW}$

mit der mittleren globalen Kurzwellenstrahlungsbilanz $R_{am}^{SW} = 244,31 \text{ W m}^{-2}$, der globalen mittleren Atmosphärentemperatur im Gleichgewicht T_{am} , dem zweiten Legendre-Polynom $P_2(\varphi) = \frac{1}{2}(2\sin^2\varphi - 1)$ und der Amplitude $A_1 = 80 \text{ W m}^{-2}$.

Aus der Wärmebilanzgleichung (33) erhält man die Atmosphärentemperatur

$$T_a = \frac{(1 - f_l(\varphi))KT_s - A}{(1 - f_l(\varphi))K + B}.$$

Setzt man diese in (32) ein, erhält man für den atmosphärischen Wärmefluss

$$F = \frac{KB}{(1 - f_l(\varphi))K + B} \left(-\frac{A}{B} - T_s(\varphi) \right).$$

Für den Landanteil werden die Werte

$$f_l(\varphi) = \begin{cases} \frac{1}{2} & , \varphi \in [76^\circ\text{N}, 0^\circ] \\ \frac{1}{3} & , \varphi \in [0^\circ, 30^\circ\text{S}] \\ 0 & , \varphi \in [30^\circ\text{S}, 76^\circ\text{S}] \end{cases}$$

angenommen.

Ozean: Das Ozeanmodell lehnt sich an das bei Stocker und Wright (1996, [16]) beschriebene an, welches auf Stocker und Wright (1991, [15]) basiert. Die Zustandsgleichungen werden in Mellor (1991, [11]) beschrieben.

Es wird ein Ozean mit einer konstanten Tiefe H und einer Breite von $\Delta\lambda$ in Grad angenommen. Temperatur und Salzgehalt werden hier als Tracer betrachtet, welche durch Advektions-Diffusions-Gleichungen beschrieben werden. Der horizontale Diffusionskoeffizient beträgt $K_H = 10^3 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, der vertikale $K_V = 0.4 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$. Es wird der Mittelwertoperator

$$\bar{\cdot} = \frac{1}{\lambda_E - \lambda_W} \int_{\lambda_W}^{\lambda_E} \cdot d\lambda$$

mit λ_W und λ_E als Breitengrad des westlichen bzw. östlichen Ozeanrandes benutzt. Es werden folgende Gleichungen benutzt:

$$\begin{aligned} -2s\Omega\bar{v} &= -\frac{1}{\rho_*ac} \frac{\Delta p}{\Delta\lambda} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{A}{H^2} \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right) \\ 2s\Omega\bar{u} &= -\frac{c}{\rho_*a} \frac{\partial \bar{p}}{\partial s} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{A}{H^2} \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right) \\ \frac{\partial \bar{p}}{\partial z} &= -\bar{\rho}gH \\ \frac{\partial}{\partial s}(c\bar{v}) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{a}{H} \bar{w} \right) &= 0 \\ \frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{c\bar{v}}{a} \bar{T} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\bar{w}}{H} \bar{T} \right) &= \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{c^2 K_H}{a^2} \frac{\partial \bar{T}}{\partial s} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{K_V}{H^2} \frac{\partial \bar{T}}{\partial z} \right) \\ \frac{\partial \bar{S}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{c\bar{v}}{a} \bar{S} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\bar{w}}{H} \bar{S} \right) &= \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{c^2 K_H}{a^2} \frac{\partial \bar{S}}{\partial s} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{K_V}{H^2} \frac{\partial \bar{S}}{\partial z} \right) \end{aligned}$$

Dabei sind $s = \sin \phi$ und $c = \cos \phi$ der geographischen Breite ϕ und z die dimensionslose Tiefe aus $[-1, 0]$. Die Geschwindigkeitskomponenten der drei Raumrichtungen sind u , v und w . Die Temperatur ist T , die Salinität S , die Dichte ρ und der Druck p . Konstanten sind $p_* = 1027.79 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$, die Winkelgeschwindigkeit Ω und der Radius a der Erde, die Schwerebeschleunigung g und die vertikale scheinbare Viskosität $A = 10^{-4} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$.

Die Funktion ψ , die die Umwalzstromung beschreibt wird durch

$$v = -\frac{1}{Hc} \frac{\partial \psi}{\partial z} \quad \text{und} \quad w = \frac{1}{a} \frac{\partial \psi}{\partial s}$$

definiert.

Das Verhaltnis von Dichte ρ in $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$, potentieller Temperatur Θ in $^\circ\text{C}$, Salinitat S in ppt und Druck p in dbar wird durch die Zustandsgleichung

$$\rho(S, \Theta, p) = \rho(S, \Theta, 0) + 10^4 \frac{p}{c^2} \left(1 - 0.20 \frac{p}{c^2} \right)$$

mit der Schallgeschwindigkeit

$$c = 1449.2 + 1.34(S - 35) + 4.55\Theta - 0.045\Theta^2 + 0.00821p + 15.0 \cdot 10^{-9}p^2$$

in $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ beschrieben.

Modellgitter: Es handelt sich, in der geowissenschaftlichen Sprechweise, um ein zweidimensionales Modell, d.h. das Modellgitter besitzt zwei Dimensionen (siehe Abb. 13). Es umfasst den Bereich $76^\circ\text{S} - 76^\circ\text{N}$, eine Ost-West-Ausdehnung von 70° und eine Tiefe von 4000 m. Die Auflosung betragt 25 Gitterpunkte in Nord-Sud-Richtung, was 8° entspricht, und 27 Gitterpunkte in die Tiefe, bei 50 m Gitterbreite an der Oberflache und bis zu 250 m in der Tiefsee. Die aueren horizontalen Gitterpunkte legen hierbei die Randbedingungen fest.

Die Zeitdiskretisierung hat eine Schrittweite von 9,125 Tagen.

4.2.2. Implementierung

Wie aus Abbildung 14 deutlich wird, sind bis zum Erreichen des Gleichgewichtszustandes mindestens 3000 Modelljahre notig, was 120000 Auswertungen der Modellgleichungen bedeutet. Um Rechenzeit zu sparen wurde deshalb ganzlich auf eine objektorientierte Implementierung, welche in Matlab zusatzlich sehr viel Rechenzeit benotigt, verzichtet.

4.2.3. Kostenfunktionale

Anhand der im Folgenden genannten Kostenfunktionale sollen die Partikelmethoden untersucht werden. Alle Kostenfunktionale bewerten Modellkonfigurationen bezuglich des heutigen Atlantiks. Dabei sind die mit dem Symbol $\hat{\cdot}$ gekennzeichneten Werte die Beobachtungen.

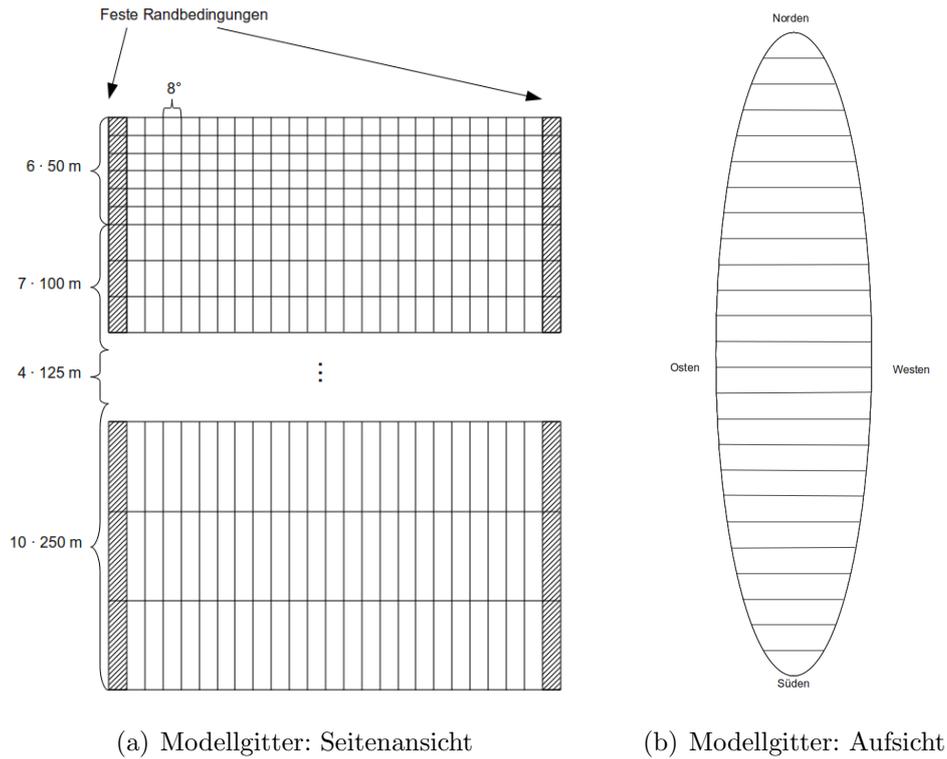


Abbildung 13: Modellgitter des HANSE-Modells

cost1: Dieses Kostenfunktional bewertet einen Modellauf anhand des Maximums der Streamfunktion, d.h. der Funktion, die die Umwälzbewegung im Modellgitter misst. Der Vergleichswert wurde durch einen Modellauf mit dem Parameter $alw = 208.0 \frac{\text{W}}{\text{m}^2}$ bestimmt und beträgt 10,34 Sv.

$$J_1(y) = \frac{1}{\sigma_m^2} (\max\{\text{streamfunction}(x)\} - \hat{m})^2$$

Dabei ist streamfunction eine Funktion, die für jede Gitterbox den Massenfluss durch diese bestimmt.

Sieht man sich den Verlauf dieser Kostenfunktion in Abhängigkeit von der langwelligen Abstrahlung der Atmosphäre (alw) in Abbildung 15(a) an, so fällt auf, dass sie nicht nur beim vorgegebenen Wert von $alw = 208,0 \text{ W m}^{-2}$ ein Minimum besitzt. Weitere Minima befinden sich im Intervall $[270, 300]$. Die Kostenfunktion weist auf einer Seite des gesuchten Minimums eine größere Steigung auf als auf der anderen Seite.

cost2sum: Die Kosten werden durch einen Vergleich der Temperaturen der ozeanischen Oberflächenboxen $T_{0,i}$ ermittelt.

$$J_2(y) = \sum_{\{i|(0,i) \in \text{Ocean}\}} \frac{(T_{0,i} - \hat{T}_{0,i})^2}{\sigma_{T_{0,i}}^2}$$

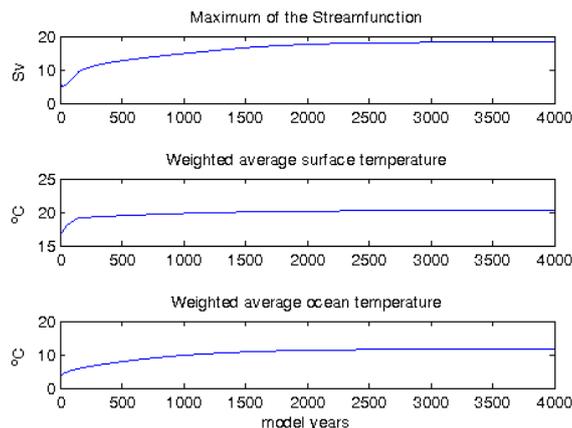


Abbildung 14: Zeitliche Entwicklung des HANSE-Modells mit dem vorgewählten Parametern

cost2log:

$$J_{2l}(y) = \sum_{\{i|(0,i) \in Ocean\}} \max \left\{ 0, \ln \frac{(T_{0,i} - \hat{T}_{0,i})^2}{\sigma_{T_{0,i}}^2} \right\}$$

cost3sum: In dieses Kostenfunktional gehen die Temperaturen aller ozeanischen Modellgitterpunkte ein.

$$J_3(y) = \sum_{\{(i,j)|(i,j) \in Ocean\}} \frac{(T_{i,j} - \hat{T}_{i,j})^2}{\sigma_{T_{i,j}}^2}$$

cost3log:

$$J_{3l}(y) = \sum_{\{(i,j)|(i,j) \in Ocean\}} \max \left\{ 0, \ln \frac{(T_{i,j} - \hat{T}_{i,j})^2}{\sigma_{T_{i,j}}^2} \right\}$$

Die Kostenfunktionale *cost2* und *cost3* wurden durch ein MATLAB-Skript aus Daten des World Ocean Atlas generiert.

Zusätzlich wurde für die Schätzung der Süßwasserflüsse auch eine regularisierte Form des Kostenfunktionals *cost2sum* verwendet. In den Regularisierungsterm gehen Anforderungen an die Glattheit der Parameter ein:

$$J_{2reg}(x, y) = J_2(y) + \lambda \sum_{\{i|(0,i), (0,i-1) \in Ocean\}} |x_i - x_{i-1}|$$

Die Abbildungen 16, 17 und 18 zeigen, wie empfindlich das Modell auf Änderungen in den Süßwasserflüssen reagiert. Abbildung 16 zeigt verschiedene Werte für die Süßwasserflüsse, Abbildung 17 die entsprechenden zeitlichen Entwicklungen des HANSE-Modells und Abbildung 18 die zugehörigen Strömungsfunktionen im Gleichgewichtszustand. Weichen die Süßwasserflüsse zu stark von den Sollwerten ab, ändert sich das Strömungsverhalten im Modell grundsätzlich. Es ist somit eine gute Schätzung der Süßwasserflüsse erforderlich.

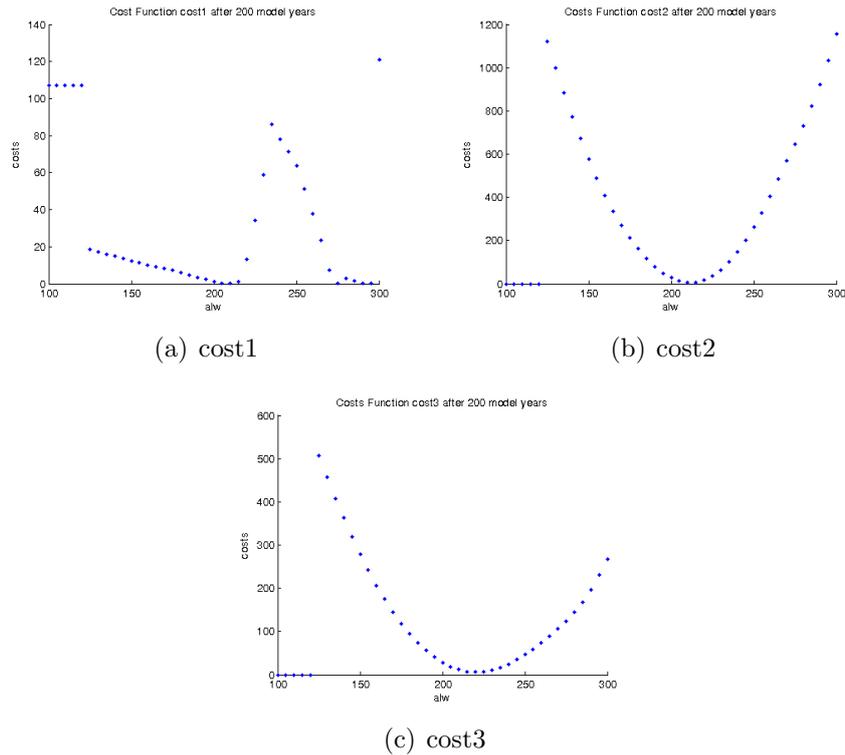


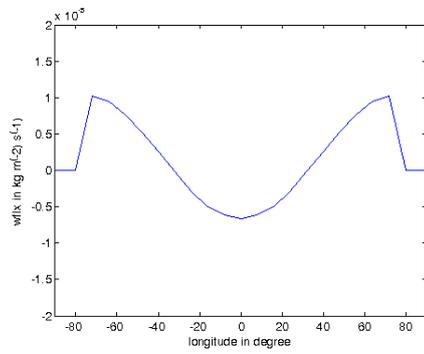
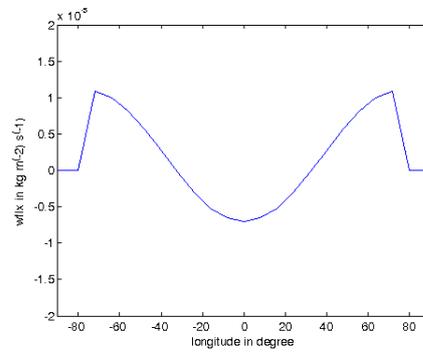
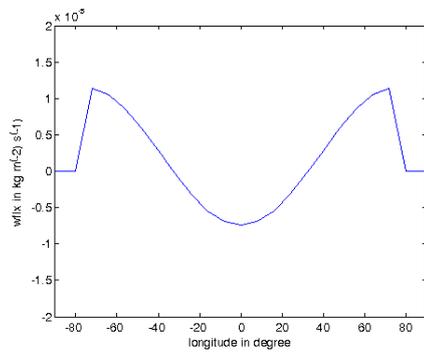
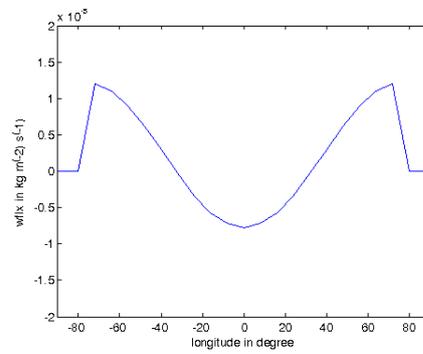
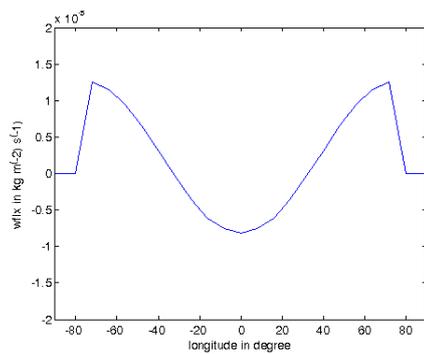
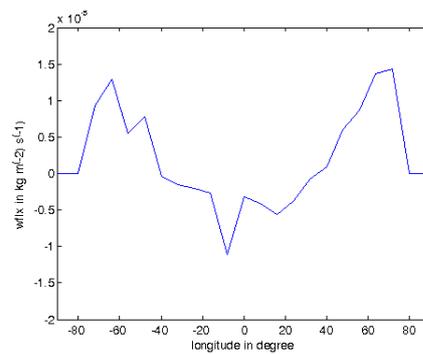
Abbildung 15: Kostenfunktionale in Abhängigkeit von alw (atmosphärische langwellige Abstrahlung in $W\ m^{-2}$)

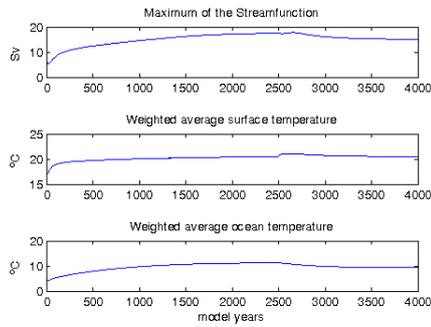
4.2.4. Experimente

In numerischen Experimenten wurden zwei Parameter des Hansemodells geschätzt:

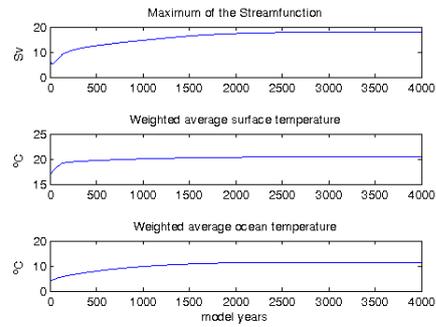
1. Atmosphärische langwellige Abstrahlung
 alw (atmosphere longwave radiation in $W\cdot m^{-2}$)
 Schätzintervall: $[150, 250]$
2. Netto-Süßwasserflüsse über dem Ozean
 $wflx$ (net surface freshwater flux distribution in $kg\cdot m\cdot s^{-1}$)
 Schätzintervall: $[-3 \cdot 10^{-5}, 3 \cdot 10^{-5}]^{25}$
 mit $wflx_i \equiv 0$ für $i \in \{1, 2, 3, 23, 24, 25\}$

Bei der Schätzung der Süßwasserflüsse handelt es sich um eine Schätzung von 19 Parametern. Von den 25 Oberflächenboxen des Modellgitters repräsentieren 19 die Ozeanoberfläche. Es soll angenommen werden, dass nichts über die Verteilung der Flüsse über die geographische Breite bekannt sei. Das entspricht einer gleichverteilten Initialisierung über das Schätzintervall. Um das Modell in einen Gleichgewichtszustand zu bringen, wurden jeweils 120000 Iterationen für eine Modellauswertung gewählt. Das entspricht 3000 Modelljahren. Eine Auswertung des Gleichgewichtszustandes der Matlab-Implementierung dauert damit auf den verwendeten Rechnern (Intel Core2 2.66 GHz) im Mittel etwa 950 Sekunden.

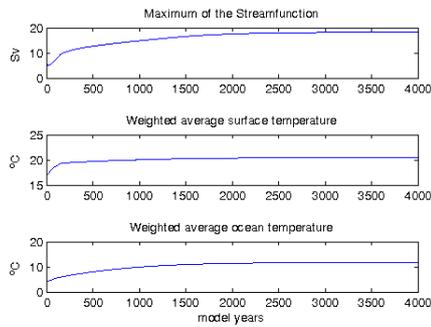
(a) 90% Vorgabe- $wflx$ (b) 95% Vorgabe- $wflx$ (c) Vorgabewerte für $wflx$ (d) 105% Vorgabe- $wflx$ (e) 110% Vorgabe- $wflx$ (f) $wflx \pm 5 \cdot 10^{-7} \cdot rand$ Abbildung 16: Skalierte Süßwasserflüsse ($wflx$)



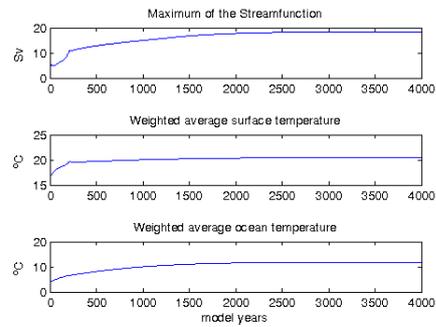
(a) 90% Vorgabe-*wflx*



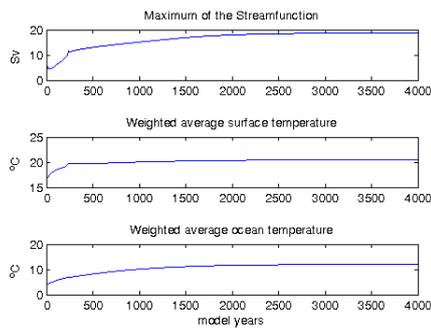
(b) 95% Vorgabe-*wflx*



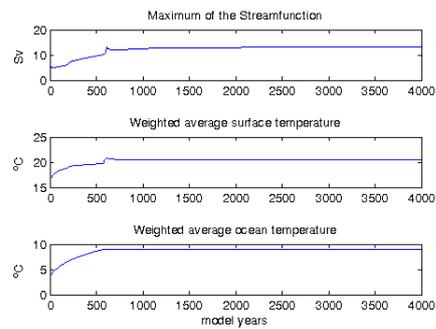
(c) Vorgabewerte für *wflx*



(d) 105% Vorgabe-*wflx*

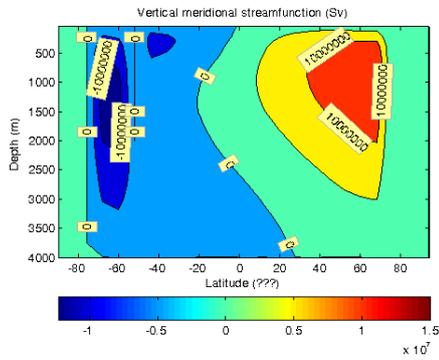


(e) 110% Vorgabe-*wflx*

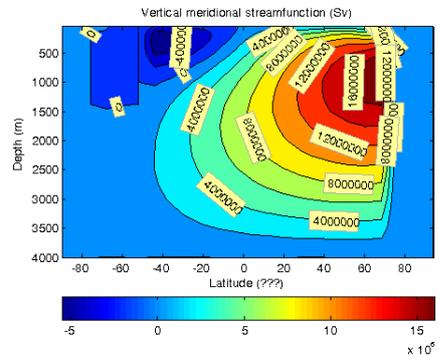


(f) $wflx \pm 5 \cdot 10^{-7} \cdot \text{rand}$

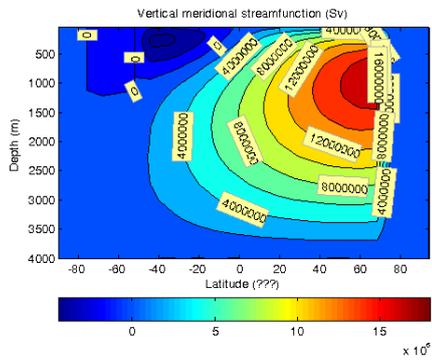
Abbildung 17: Entwicklung bei skalierten Süßwasserflüssen (*wflx*)



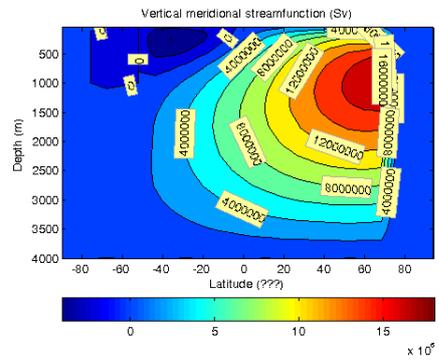
(a) 90% Vorgabe- $wflx$



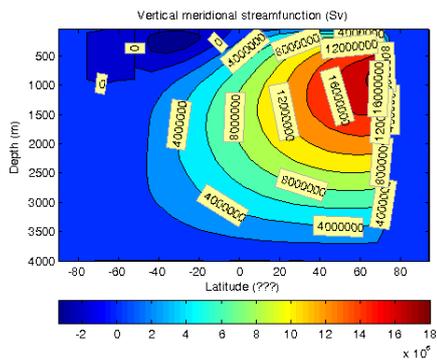
(b) 95% Vorgabe- $wflx$



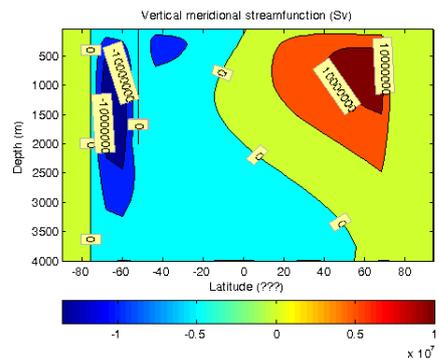
(c) Vorgabewerte für $wflx$



(d) 105% Vorgabe- $wflx$



(e) 110% Vorgabe- $wflx$



(f) $wflx \pm 5 \cdot 10^{-7} \cdot rand$

Abbildung 18: Streamfunktion mit skalierten Süßwasserflüssen ($wflx$)

4.2.5. Experimente mit der PSO

Zunächst wurde die eindimensionale atmosphärische langwellige Abstrahlung (alw) geschätzt. Die Ergebnisse finden sich in Tabelle 13.

Dieser Parameter verhält sich in der Schätzung „gutmütig“, d.h. er lässt sich selbst mit wenigen Partikeln gut rekonstruieren. Sich ergebende Unterschiede in den ermittelten Werten sind in den verwendeten Kostenfunktionalen begründet. Ein Vektor der Netto-Süßwasserflüsse, der die Abweichung der Oberflächentemperatur minimiert, muss nicht der gleiche Wert sein, der die Temperaturabweichung in allen Gitterboxen minimiert. Durch die gute Rekonstruktion der atmosphärischen Abstrahlung und die geringe Empfindlichkeit der Overturningrate gegenüber dieser, wird das Overturning gut rekonstruiert.

Die Experimente zur Schätzung des mehrdimensionalen Süßwasserflusses finden sich in der Tabelle 15 wieder.

Die nicht regularisierten Kostenfunktionale liefern sehr rauhe Ergebnisse, d.h. der Süßwasserfluss kann sich in zwei benachbarten Gitterzellen stark unterscheiden. Ebenso sind zwischen verschiedenen Experimenten starke Schwankungen in den einzelnen Werten zu finden. Die Süßwasserflüsse lassen sich analog zu den Experimenten mit dem THC-4-Box-Modell nicht ohne weiteres ermitteln. Ein Versuch, dieses Probleme zu umgehen, ist die Erweiterung des Kostenfunktionals um einen Regularisierungsterm. Je nach gewähltem Regularisierungsfaktor werden die Ergebnisse deutlich glatter, aber selbst mit dem regularisierten Kostenfunktional findet sich noch eine große Spanne in den Ergebnissen. Das lässt die Vermutung zu, dass stärkere Annahmen bzgl. der Süßwassertransporte gestellt werden müssen um diese rekonstruieren zu können. Ein ähnliches Ergebnis lieferten schon die Experimente mit dem Modell THC-4-Box.

Im Algorithmus der PSO wird das Kostenfunktional lediglich benutzt um Vergleiche bezüglich der Größe der Kosten vorzunehmen. Es macht also keinen Unterschied welches von zwei Kostenfunktionalen J oder \tilde{J} gewählt wird, so lange für alle Parameter-Messwert-Paare (x, y) und (\tilde{x}, \tilde{y}) mit $J(x, y) < J(\tilde{x}, \tilde{y})$ gilt $\tilde{J}(x, y) < \tilde{J}(\tilde{x}, \tilde{y})$. Man kann also ein lineares, ein quadratisches oder ein logarithmisches Kostenfunktional wählen.

4.2.6. Experimente mit dem Partikelfilter

Die Tabelle 17 zeigt die Ergebnisse der Experimente zur Schätzung der langwelligen Abstrahlung alw mit dem Partikelfilter. Der Wert der langwelligen Abstrahlung lässt sich gut rekonstruieren. Alle Schätzungen mit den Kostenfunktionalen $cost2log$ und $cost3log$ und nur einem Resamplingschritt weisen zwei lokale Maxima in der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion auf. In Abbildung 19 ist das beispielhaft für die Verwendung des Kostenfunktionals $cost3log$ mit 150 Partikeln (vgl. Tabell 17) dargestellt. Die beiden Maxima liegen jeweils bei ca. 170 bzw. ca. 220 in $W \cdot m^{-2}$. In den meisten Fällen liegt das globale Maximum allerdings bei $170 W \cdot m^{-2}$. Führt man weiter Importance-Sampling-

Schritte aus, so gewinnt das Maximum bei $220 \text{ W}\cdot\text{m}^{-2}$ zunehmend an Gewicht.

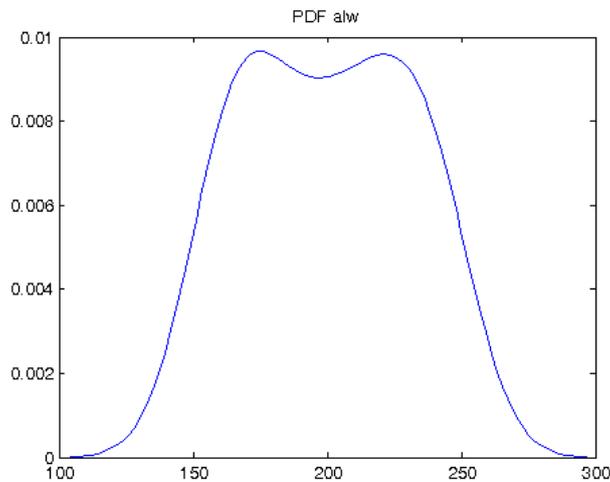
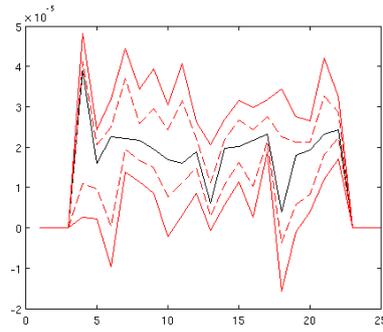
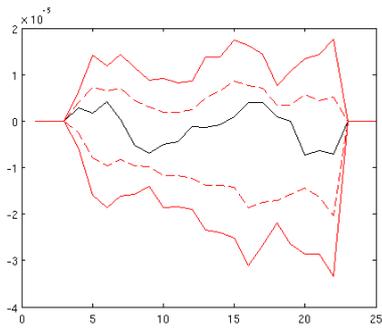


Abbildung 19: Schätzung der langwelligen Abstrahlung alw in $\text{W}\cdot\text{m}^{-2}$ mit dem Partikelfilter. 150 Partikel. Kostenfunktional $cost3log$.

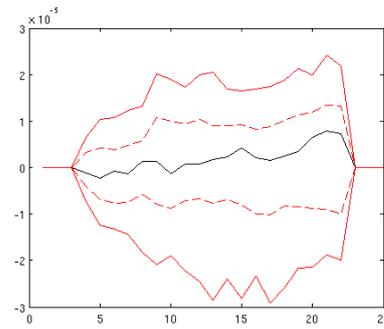
In Tabelle 19 sind die Ergebnisse der Experimente zur Schätzung der Süßwasserflüsse mit dem Partikelfilter dargestellt. Es wurden verschiedene Partikelanzahlen, Kostenfunktionale und Resamplingmethoden getestet. Die Abbildung 20 zeigt beispielhaft die Verläufe der geschätzten Süßwasserflüsse über die Gitterboxen. Dabei sind die Werte im Maximum der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion durch eine dunkle durchgezogene Kurve dargestellt. Die durchgezogenen roten bzw. rot-gestrichelten Verläufe grenzen den Bereich ein, in dem der Schätzung zufolge mit 95% bzw. 65% Wahrscheinlichkeit der wahre Wert liegt. Es ist zu erkennen, dass die Schätzungen durchweg hohe Schwankungen aufweisen und keine Tendenz zu einer eindeutigen Lösung aufweisen, selbst bei den regularisierten Kostenfunktionalen. Somit lässt sich sagen, dass der Partikelfilter in Verbindung mit den verwendeten Kostenfunktionalen zur Schätzung der Süßwasserflüsse ebenso wenig geeignet ist wie die Partikel-Schwarm-Optimierung. Eine Gemeinsamkeit beider Verfahren sind die verwendeten Kostenfunktionale, was die Vermutung nahe legt, dass deren Formulierung eine Ursache für die schlechten Lösungen sein könnten.



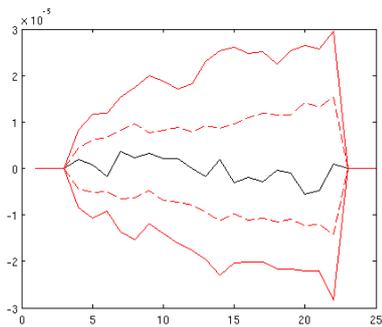
(a) 30 Partikel



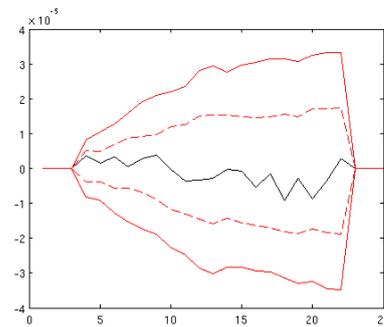
(b) 10 Partikel, Rejection Sampling



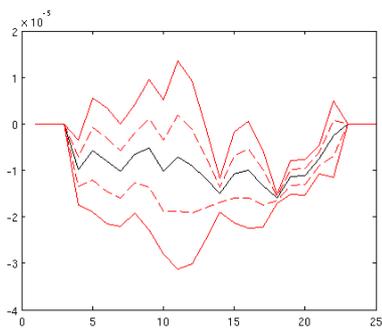
(c) 20 Partikel, Rejection Sampling



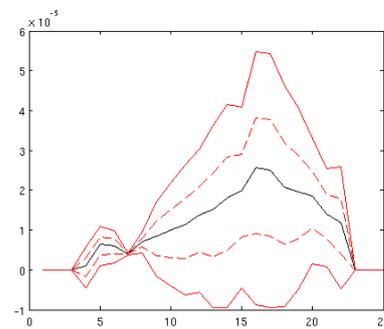
(d) 30 Partikel, Rejection Sampling



(e) 40 Partikel, Rejection Sampling



(f) 40 Partikel, 1x Importance Sampling, regularisiert



(g) 40 Partikel, 2x Importance Sampling, regularisiert

Abbildung 20: Schätzung der Süßwasserflüsse ($wflx$ in $\text{kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$) mit Partikelfiltern. Die Abszissenachse bezeichnet jeweils die Gitterzelle.

5. Zusammenfassung

5.1. Rechenaufwand

Zur Anwendung der Partikelmethode auf Probleme der Paläoozeanographie standen die zwei in Kapitel 4.1 und 4.2 vorgestellten Ozeanmodelle zur Verfügung. Sie sind in Matlab implementiert. Um den Rechenaufwand speziell bei dem HANSE-Modell gering zu halten, wurde die Modellimplementierung in häufig aufgerufenen Programmteilen vektorisiert, d.h. Schleifen wurden durch Vektor- und Matrixoperationen ersetzt. Auf die sich anbietende Parallelisierung musste verzichtet werden, da die Parallel Computing Toolbox nicht zur Verfügung stand. Allein aus Performancegründen wurde das imperative Programmierparadigma dem objektorientierten vorgezogen.

Liegt wie im Fall des HANSE-Modells ein aufwendiges Modell mit langer Rechenzeit bis zum Erreichen eines Gleichgewichtszustandes vor, sollte man vor der Anwendung der Partikelmethode prüfen, ob sich die Modellparameter mit anderen Verfahren ermitteln lassen. Die vielen nötigen Auswertungen können leicht zu Rechenzeiten über mehrere Tage führen. Durch Verwendung eines stationären Modells, das den initialen Zustand ohne Iteration über die Modellzeit, direkt auf einen Gleichgewichtszustand abbildet, kann die Rechenzeit sicher deutlich verkürzt werden.

Für diese Arbeit wurden Matlab-Implementierungen der beschriebenen Modelle benutzt und die Partikelmethode ebenfalls in Matlab implementiert. Sollen die Partikelmethode auf Modelle angewendet werden, die rechenaufwendiger sind als die verwendeten Ozeanmodelle, empfiehlt es sich eine objektorientierte, kompilierte Programmiersprache zu wählen. Mit Hilfe der Objektorientierung lassen sich die Partikelmethode elegant umsetzen. Kompilierte Sprachen gleichen den hohen Bedarf an Rechenleistung teilweise dadurch aus, dass sie in der Regel schnellere Programme erzeugen als interpretierte Sprachen, wie Matlab. Weiterhin können die Partikelmethode durch parallele Modellauswertungen auf modernen Mehrkernprozessoren beschleunigt werden.

5.2. Bewertung der Partikelmethode

Ein entscheidender Vorteil der Partikelmethode gegenüber gradientenbasierten Assimilationsverfahren ist, dass sie keine Linearisierung und keine Kenntnis der Ableitungen des untersuchten Modells benötigen. Somit entfällt bei sehr komplexen Modellen ein möglicherweise arbeitsaufwendiger und fehleranfälliger Schritt. Das Modell kann sogar als Black-Box betrachtet werden.

Mit den beiden untersuchten Partikelmethode lassen sich Parameter rekonstruieren bzw. schätzen. Die Relaxationstemperaturen im THC-4-Box-Modell und die atmosphärische langwellige Abstrahlung im HANSE-Modell sind Parameter, die sich mit beiden Methoden gut rekonstruieren lassen. Der Partikelfilter bietet dabei den Vorteil, dass er eine Wahrscheinlichkeitsdichte für die

zu ermittelnden Parameter liefert und so eine Beurteilung des Fehlers erlaubt. Eine Schwierigkeit wurde bei der Schätzung der Süßwasserflüsse in beiden Modellen deutlich. Besitzt das Kostenfunktional kein eindeutiges Minimum im Parameterraum, können auch die Partikelmethode die Parameter nicht rekonstruieren. In der Partikel-Schwarm-Optimierung äußert sich das in sehr unterschiedlichen Ergebnissen bei wiederholter Schätzung, im Partikelfilter durch eine breite Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion für die geschätzten Parameter. Das wird in den Experimenten mit dem THC-4-Modell besonders deutlich.

Eine Limitierung der Leistungsfähigkeit der Partikelmethode findet durch die Rechenzeit und die Wahl des Kostenfunktionals, speziell durch die Anzahl der in das Kostenfunktional einfließenden Beobachtungswerte, statt. Die Partikelmethode sind deshalb besonders zur Parameterschätzung in Modellen mit geringer Rechenzeit und ausreichenden Beobachtungsdaten geeignet. Die zunehmende preisgünstige Verfügbarkeit von parallelen Recheneinheiten macht die Partikelmethode aber mit der Zeit immer attraktiver.

Man kann die Ergebnisse auch aus der Sicht der Kostenfunktionale deuten. Besonders beim Partikelfilter kann die ermittelte Güte der Parameterschätzung auch als Maß für die Güte des verwendeten Kostenfunktionals interpretiert werden. Fließen genügend Beobachtungen in das Kostenfunktional ein, so erhält man eine Parameterschätzung mit einer Wahrscheinlichkeitsdichte, die einen schmalen Peak aufweist. Eine flache Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion deutet auf ein Kostenfunktional hin, in das zu wenige Beobachtungsdaten einfließen.

5.3. Ausblick

Eine Möglichkeit weiterführende Erkenntnisse über die Anwendung der Partikelmethode in der Paläoozeanographie zu gewinnen ist, das Augenmerk auf die verwendeten Kostenfunktionale zu richten. Eine Frage ist, wie sich Modellparameter aus realen Daten, welche nicht im Bildbereich des Modells liegen, besser rekonstruieren lassen. Ebenso interessant ist, welche Daten in ein Kostenfunktional einfließen müssen, um die Parameter mit kleinem Fehler rekonstruieren zu können.

Bei weiteren Modellannahmen lässt sich die Anzahl der Parameter reduzieren. So kann die Schätzung der Modellparameter $x \in \mathbb{R}^N$ zum Beispiel auf die Schätzung von Parametern $\tilde{x} \in \mathbb{R}^M$ mit $M < N$ reduziert werden, wenn vorausgesetzt wird, dass sich die Modellparameter durch eine Funktion $f : \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}^N$ beschreiben lassen, z.B. für $k = 1, \dots, N$

$$x_k = f_k(a, b, c) = a + b \cos\left(\frac{2\pi \cdot k}{N}\right) + c \sin\left(\frac{2\pi \cdot k}{N}\right).$$

Eine solche Annahme verkleinert den Lösungsraum der Parameterschätzung indem nur Lösungen zugelassen werden, die bestimmte Nebenbedingungen erfüllen.

Beide Verfahren haben eine Stärke, in der simultanen Schätzung vieler Modellparameter. Der Rechenaufwand ist im Wesentlichen durch die Modellauswertungen bestimmt und wächst nur wenig mit steigender Parameterraumdimension. Vor allem der Partikelfilter ist für die Anwendung in der Paläoozeanographie interessant, da mit seiner Hilfe festgestellt werden kann, wie vertrauenswürdig ermittelte Modellparametern sind.

A. Nomenklatur

Nomenklatur zu Partikelmethoden und Anwendungen

$\mathbb{E}(\cdot)$	Erwartungswert
$g(t)$	Bis zur t -ten Iteration beste gefundene Parameter bei der PSO
J	Kostenfunktional je nach Kontext $J : X \rightarrow \mathbb{R}_+$ oder $J : Y \rightarrow \mathbb{R}_+$
$k_i(t)$	Bis zur t -ten Iteration durch den Partikel i beste gefundene Parameter der PSO
\mathcal{M}	mathematisches Modell, $\mathcal{M}(X) \subset Y$
M	Dimension des Parameterraums
N	Anzahl der Partikel
$\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$	Normalverteilung mit Erwartungswert μ und Standardabweichung σ
\mathcal{P}	Partikelschwarm / Partikelwolke
p	Wahrscheinlichkeitsdichte
p_0	A-priori-Wahrscheinlichkeitsdichte
$\text{supp}(f)$	Träger der Funktion f
t	Iteration
T_{max}	maximale Zahl der Iterationen
$U([a, b])$	stetige Gleichverteilung auf dem Intervall $[a, b]$
w	Gewichtung eines Partikels i.d.R. $w(x_i) = \exp(\frac{1}{2R}J(x_i))$ oder $w(x_i) = \frac{\exp(\frac{1}{2R}J(x_i))}{\sum_k w_k}$
X	Parameterraum, $X \subset \mathbb{R}^n$
$x_i(t)$	Koordinaten des Partikels i zur t -ten Iteration im Parameterraum
y	Zustände
Y	Zustandsraum, $Y \subset \mathbb{R}^m$

B. Tabellen

Tabella 1: PSO zur Ermittlung der Parameter T_1^* , T_2^* , T_3^* des THC-4-Box-Modells mit dem Kostenfunktional J_{3log} und heutigen Daten.

Partikel	T_1^* [°C]		T_2^* [°C]					T_3^* [°C]					hits		Samplings					
	mean	med	prob	min	max	std	mean	med	prob	min	max	std	mean	med		prob	min	max	std	
5	6.2	6.5	6.6	3.5	8.0	1.1	3.5	3.0	2.8	1.0	8.9	1.6	10.9	11.5	11.7	3.2	15.0	2.7	6	8275
10	6.4	6.6	6.6	4.0	6.9	0.7	2.8	2.8	2.8	1.0	5.0	0.8	11.8	11.8	11.7	3.3	15.0	2.0	19	17609
20	6.6	6.5	6.5	6.4	6.8	0.1	2.7	2.7	2.6	2.4	3.4	0.2	11.7	11.7	11.8	11.5	15.0	0.6	29	20286
30	6.6	6.6	6.5	6.4	8.0	0.3	2.7	2.7	2.6	2.0	3.4	0.2	11.8	11.7	11.6	11.5	15.0	0.6	28	26916
40	6.6	6.6	6.5	6.4	6.8	0.1	2.7	2.6	2.6	2.4	3.0	0.1	11.7	11.7	11.7	11.5	11.9	0.1	30	20281

Tabella 3: PSO zur Ermittlung der Parameter T_1^* , T_2^* , T_3^* , F_1 , F_2 des THC-4-Box-Modells mit heutigen Daten

Partikel	Kostenfunktional	$T_1^* [^\circ C]$			$T_2^* [^\circ C]$			$T_3^* [^\circ C]$			$F_1 [10^{-3} Sv]$			$F_2 [10^{-3} Sv]$			m [Sv]			hits	Samplings
		med	prob	std																	
20	3log	6.6	6.7	0.3	2.7	2.8	1.2	11.7	11.8	1.6	9	10	52	50	39	60	25.58	27.39	16.76	28	21025
30	3log	6.5	6.5	0.2	2.6	2.6	0.3	11.8	11.8	0.2	-1	-4	32	53	42	32	23.14	26.24	19.03	28	47257
40	3log	6.6	6.7	0.1	2.7	2.6	0.2	11.7	11.8	0.1	13	11	0.1	55	45	31	23.86	25.76	15.79	30	67604
50	3log	6.6	6.6	0.1	2.8	2.8	0.2	11.8	11.8	0.1	15	16	23	68	83	34				30	54566
20	6log	6.5	6.5	0.5	2.4	2.2	1.2	11.7	11.6	1.1	3	25	13	80	140	130	25.58	27.39	16.76	28	21025
30	6log	6.6	6.6	0.6	2.6	2.1	2.0	11.7	11.6	1.7	35	59	110	23	90	142	23.14	26.24	19.03	28	18662
40	6log	6.6	6.6	0.2	2.6	2.3	1.2	11.8	11.6	0.9	25	25	105	51	93	140	23.86	25.76	15.79	30	22515
20	7log	6.7	6.7	1.2	2.6	2.1	3.1	11.7	11.8	2.2	14	15	82	82	86	84	24.43	27.66	32.90	17	30082
30	7log	6.7	6.7	0.7	2.4	2.3	1.6	11.7	11.6	1.4	7	3	80	72	74	93	26.43	26.57	17.42	27	19542
40	7log	6.6	6.6	0.3	2.3	2.2	2.1	11.7	11.7	1.2	-35	-46	78	84	83	86	27.00	27.26	21.61	27	19542

Tabelle 5: PSO zur Ermittlung der Parameter T_1^* , T_2^* , T_3^* , F_1 , F_2 des THC-4-Box-Modells mit Daten einer um 6K erhöhten globalen Mitteltemperatur

*1: Abbruch bei $J_{6sum}(y) < 1.0$

*2: Abbruch bei $J_{6sum}(y) < 0.3$

Partikel	T_1^* [°C]			T_2^* [°C]			T_3^* [°C]			F_1 [10 ⁻³ Sv]			F_2 [10 ⁻³ Sv]			m [Sv]			hits	Sampling	
	med	prob	std	med	prob	std	med	prob	std	med	prob	std	med	prob	std	med	prob	std			
20 3log	11.7	11.8	0.8	9.1	9.1	1.2	16.4	16.4	16.4	0.9	-27	-14	69	144	146	65	15	59394			
40 3log	11.9	12.0	0.1	9.2	9.2	0.1	16.5	16.5	16.5	0.1	1	4	20	179	195	31	30	70432			
20 6log	11.7	11.7	0.3	9.8	10.3	0.9	16.4	16.4	16.4	0.3	8	-3	125	71	122	135	9.81	20.04	16.75	30	8436
40 6log	11.7	11.8	0.2	9.4	10.2	1.1	16.5	16.4	16.4	0.8	17	88	116	70	138	146	15.09	23.98	16.49	30	13337
20 7log	11.7	11.7	0.5	9.4	9.8	1.3	16.3	16.3	16.3	1.1	29	16	92	93	91	93	12.93	19.44	18.30	26	30456
40 7log	11.8	11.7	0.5	9.2	9.0	1.1	16.4	16.3	16.3	1.0	22	25	80	84	70	82	16.52	22.64	13.35	28	40896
20 6s*1	11.7	11.8	0.3	9.0	8.7	1.3	16.4	16.3	16.3	1.1	-58	-96	135	43	101	135	21.98	26.01	20.01	29	10222
40 6s*1	11.7	11.7	0.2	9.7	10.2	1.2	16.4	16.4	16.4	1.0	-1	-14	118	6	-13	125	7.90	17.62	19.19	29	16059
20 6s*2	11.8	11.9	0.3	8.6	8.5	1.0	16.5	16.5	16.5	0.5	-79	-115	137	-44	-88	132	25.50	26.91	16.27	30	18228
40 6s*2	11.8	11.8	0.2	10.2	10.4	0.9	16.4	16.4	16.4	0.7	43	15	110	-45	-88	139	4.43	13.23	13.87	30	9983

Tabella 7: Partikelfilter zur Ermittlung der Parameter T_1^* , T_2^* , T_3^* , F_1 , F_2 des THC-4-Box-Modells mit heutigen Daten. Es sind nur die Parameter T_2^* und F_2 aufgeführt. Die Werte wurden aus je 30 Experimenten ermittelt.

Partikel	Kosten-funktional	Initiales Sampling	Importance Sampling	$T_2^* [^\circ C]$			$F_2 [10^{-3} Sv]$			$m [Sv]$			Samplings	
				mean	std	0.65-Konf.	0.95-Konf.	mean	std	0.65-Konf.	0.95-Konf.	mean		std
20	3log	umi	1 × I1	4.4	2.1	[1.3 11.0]	[1.0 13.7]	-11	64	[-134 132]	[-194 192]	16.29	16.27	2254
				4.6	2.1	[1.5 10.6]	[1.0 14.4]	-13	66	[-134 132]	[-194 192]	8.07	20.43	2242
40	3log	umi	1 × I1	3.7	1.6	[1.4 9.9]	[1.0 12.8]	-1	52	[-134 132]	[-194 192]	18.2	12.93	4638
				3.6	1.4	[1.4 10.0]	[1.0 14.2]	18	49	[-134 132]	[-194 192]	29.61	10.26	4372
60	3log	umi	1 × I1	3.5	1.0	[1.8 9.5]	[1.1 13.5]	4	51	[-134 132]	[-194 192]	23.40	4.73	6523
				3.8	1.2	[1.7 11.1]	[1.1 14.2]	14	43	[-134 132]	[-192 192]	18.4	15.25	6693
80	3log	umi	1 × I1	3.6	0.9	[1.6 8.9]	[1.0 13.4]	7	46	[-134 132]	[-194 192]	18.00	8.31	8875
				3.8	1.5	[1.6 9.8]	[1.0 13.6]	-3	32	[-134 132]	[-194 190]	20.84	11.27	9081
200	3log	umi	1 × I1	3.5	0.8	[1.8 8.2]	[1.1 11.6]	-31	21	[-134 130]	[-194 190]	20.70	5.81	22663
				3.5	0.9	[1.8 8.6]	[1.1 12.7]	7	28	[-134 132]	[-192 192]	21.70	5.70	22142
40	3log	umi	5 × I2	3.1	0.5	[1.5 5.1]	[1.0 7.9]	23	67	[-134 132]	[-194 192]	22.65	2.2	8750
				3.5	0.8	[1.4 6.6]	[1.0 8.2]	45	55	[-134 132]	[-194 192]	22.58	2.85	8816
60	5sum	umi	1 × I2	5.7	2.7	[1.3 12.5]	[1.0 14.1]	-3	88	[-134 132]	[-194 192]	13.50	15.31	5772
				5.6	3.2	[1.2 13.1]	[1.0 14.4]	-40	105	[-138 132]	[-194 192]	11.45	12.75	5602
40	6log	umi	5 × I2	3.6	1.1	[1.3 9.2]	[1.0 11.0]	-24	67	[-134 132]	[-194 192]	13.89	14.28	8039
				3.9	1.4	[1.7 11.4]	[1.1 14.4]	-13	71	[-134 132]	[-194 192]	14.64	14.59	7933
40	6sum	umi	5 × I2	3.1	0.9	[1.2 5.9]	[1.0 6.9]	-5	98	[-136 132]	[-194 192]	17.72	12.06	8155
				3.5	1.0	[1.4 6.0]	[1.0 7.1]	-38	100	[-136 132]	[-194 192]	15.04	13.59	8271
40	7log	umi	5 × I2	3.7	1.5	[1.5 10.5]	[1.0 11.6]	11	79	[-134 132]	[-194 192]	11.65	20.96	8759
				3.2	1.4	[1.4 8.5]	[1.0 10.2]	32	81	[-134 132]	[-194 192]	17.71	13.69	8522
200	7log	umi	5 × I2	3.0	0.8	[1.4 11.4]	[1.0 14.4]	27	50	[-134 132]	[-194 192]	16.98	14.10	35849
				2.8	0.7	[1.5 8.1]	[1.0 12.3]	18	51	[-134 132]	[-194 192]	22.37	4.59	36343
200	7log	umi	1 × I1	4.0	0.9	[2.2 10.0]	[1.1 13.7]	-13	18	[-132 130]	[-192 190]	15.93	5.80	22468
				4.4	0.8	[2.1 9.7]	[1.1 13.7]	-12	13	[-132 130]	[-192 190]	14.67	4.85	23181

Tabelle 9: Partikelfilter zur Ermittlung der Parameter T_1^* , T_2^* , T_3^* , F_1 , F_2 des THC-4-Box-Modells mit einer um 6K erhöhten globale Mitteltemperatur. Es sind nur die Parameter T_2^* und F_2 aufgeführt. Die Werte wurden aus je 30 Experimenten ermittelt.

Partikel	Kostenfunktional	Initiales Sampling	Importance Sampling	$T_2^* [^\circ\text{C}]$				$F_2 [Sv]$				$m[Sv]$				Samplings		
				mean	std	0.65-Konf.	0.95-Konf.	mean	std	0.65-Konf.	0.95-Konf.	mean	std	0.65-Konf.	0.95-Konf.			
40	7log	uni	$5 \times \text{I2}$	9.4	1.2	[6.7 13.0]	[5.4 14.7]	17	68	[-134 132]	[-194 192]	11.66	13.94	[-194 192]	[-194 192]	11.66	13.94	8443
				9.5	1.5	[6.3 14.2]	[4.6 14.9]	39	68	[-134 132]	[-194 192]	9.52	16.19	[-194 192]	[-194 192]	9.52	16.19	8439
200	7log	uni	$5 \times \text{I2}$	8.9	0.9	[6.3 12.2]	[4.8 14.6]	59	42	[-134 132]	[-192 192]	14.12	12.17	[-192 192]	[-192 192]	14.12	12.17	41984
				8.9	0.8	[6.6 13.7]	[5.2 14.7]	40	50	[-134 132]	[-194 192]	16.51	8.46	[-194 192]	[-194 192]	16.51	8.46	42100
200	7log	uni	$1 \times \text{I1}$	9.8	0.9	[6.3 13.0]	[2.1 14.6]	-5	20	[-134 130]	[-192 190]	12.11	7.66	[-192 190]	[-192 190]	12.11	7.66	20277
				9.7	0.6	[5.9 12.9]	[2.4 14.6]	-10	14	[-132 130]	[-192 190]	14.97	4.39	[-192 190]	[-192 190]	14.97	4.39	20251
60	5sum	uni	$1 \times \text{I2}$	7.5	4.1	[1.3 13.7]	[1.0 14.7]	-61	84	[-134 132]	[-194 192]	16.72	5.24	[-194 192]	[-194 192]	16.72	5.24	5373
				6.7	3.8	[1.3 14.6]	[1.0 15.0]	-64	102	[-136 132]	[-194 192]	19.85	6.86	[-194 192]	[-194 192]	19.85	6.86	5424

Tabelle 11: Partikelfilter zur Ermittlung der Parameter T_1^* , T_2^* , T_3^* , F_1 , F_2 des THC-4-Box-Modells. Einzelversuche.

globale Mitteltemperatur	Partikel	Kostenfunktional	Initiales Sampling	Importance Sampling	T_1^* [$^{\circ}C$]	T_2^* [$^{\circ}C$]	T_3^* [$^{\circ}C$]	F_1 [$10^{-3} Sv$]	F_2 [$10^{-3} Sv$]	m [Sv]	Samplings
n.	200	7log	umi	$1 \times I1$	6.2	4.1	10.9	-2	-55	14.53	613
					[4.0 8.5]	[2.7 8.5]	[8.2 14.6]	[-155 131]	[-155 131]		
					[1.6 13.2]	[1.1 13.3]	[5.8 18.0]	[-196 192]	[-196 192]		
n.	200	7log	umi	$1 \times I1$	6.7	2.8	11.7	-14	18	23.75	733
					[4.0 8.4]	[2.3 7.5]	[8.3 13.6]	[-155 131]	[-155 131]		
					[1.4 11.8]	[1.1 12.2]	[5.5 18.0]	[-196 192]	[-196 192]		
n.	200	7log	umi	$5 \times I2$	6.4	2.8	11.8	-10	-10	21.59	1485
					[5.0 7.5]	[1.9 4.1]	[10.6 13.4]	[-155 131]	[-155 131]		
					[3.6 8.6]	[1.0 6.5]	[9.5 14.7]	[-196 192]	[-196 192]		
n.	200	7log	umi	$5 \times I2$	6.7	2.8	11.8	67	6	18.84	1440
					[5.5 7.8]	[1.9 4.4]	[10.6 12.7]	[-155 131]	[-155 131]		
					[4.3 9.2]	[1.0 6.0]	[9.5 13.7]	[-196 192]	[-196 192]		
+6	200	7log	umi	$1 \times I1$	11.6	8.6	16.8	-14	-10	18.89	655
					[7.8 12.7]	[6.8 11.5]	[11.2 18.0]	[-135 131]	[-135 131]		
					[2.1 14.3]	[3.0 14.0]	[5.9 19.6]	[-196 192]	[-196 192]		
+6	200	7log	umi	$1 \times I1$	11.6	9.8	16.7	-22	-2	14.72	642
					[7.5 13.0]	[7.7 11.9]	[12.9 17.7]	[-135 131]	[-135 131]		
					[3.5 14.5]	[4.5 14.0]	[8.5 19.4]	[-196 192]	[-196 192]		
+6	200	7log	umi	$5 \times I2$	12.7	8.9	16.5	67	14	21.50	1416
					[11.5 13.7]	[7.8 10.1]	[15.5 17.6]	[-135 131]	[-135 131]		
					[9.8 14.7]	[6.7 11.3]	[14.4 18.6]	[-196 192]	[-196 192]		
+6	200	7log	umi	$5 \times I2$	11.9	9.3	16.5	-34	-2	18.40	1412
					[10.5 12.9]	[8.2 10.9]	[15.3 17.6]	[-135 131]	[-135 131]		
					[8.9 14.2]	[7.1 13.7]	[14.1 18.6]	[-196 192]	[-196 192]		

Tabelle 13: PSO zur Ermittlung der atmosphärischen langwelligen Abstrahlung alw

Partikel	Kosten- funktional	Initiales Sampling	alw in $W \cdot m^{-2}$	Kosten	Overturning m	Samplings
5	<i>cost1</i>	uni	201.6	108	16.87	55
5	<i>cost1</i>	uni	201.7	108	15.67	55
10	<i>cost1</i>	uni	201.1	108	16.48	110
10	<i>cost1</i>	uni	201.4	108	16.31	110
20	<i>cost1</i>	uni	226.8	66	16.44	180
20	<i>cost1</i>	uni	247.6	17	16.52	180
40	<i>cost1</i>	uni	201.3	108	16.28	280
40	<i>cost1</i>	uni	201.1	108	16.27	280
10	<i>cost2log</i>	uni	211.6	1.03	1.69	110
10	<i>cost2log</i>	uni	212.6	1.03	1.36	110
20	<i>cost2log</i>	uni	211.9	0.85	16.50	180
20	<i>cost2log</i>	uni	211.8	1.01	17.81	180
40	<i>cost2log</i>	uni	211.9	0.85	16.88	280
40	<i>cost2log</i>	uni	211.9	0.85	16.73	280
20	<i>cost3log</i>	uni	163.9	0.23	16.62	180
20	<i>cost3log</i>	uni	163.5	0.43	16.73	180
40	<i>cost3log</i>	uni	198.2	0.23	15.65	280
40	<i>cost3log</i>	uni	183.0	0.23	1.34	440

Tabella 15: PSO zur Ermittlung der Netto-Stüßwasserflüsse $wflx$ in $\text{kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$

Partikel	Kostenfunktional	Regularisierungsfaktor	Initiales Sampling	$wflx(11)$ [$\cdot 10^{-06}$]	$wflx(12)$ [$\cdot 10^{-06}$]	$wflx(13)$ [$\cdot 10^{-06}$]	Kosten	Overturning m	Samplings
40	<i>cost1</i>		uni	8.125	9.932	11.351	0.0	22.48	440
50	<i>cost1</i>		uni	8.147	1.133	-2.964	0.0	9.40	450
10	<i>cost2log</i>		uni	5.094	-9.833	-13.8	1.32	42.89	214
20	<i>cost2log</i>		uni	2.318	-14.227	-25.908	1.16	29.50	262
40	<i>cost2log</i>		uni	1.668	-8.767	-1.351	1.36	23.91	447
40	<i>cost2log</i>		uni	15.657	-2.893	4.413	1.29	1.72	446
50	<i>cost2log</i>		uni	3.433	-12.839	-22.982	1.27	40.35	556
10	<i>cost2log</i>		trig	-18.523	-15.598	-13.823	1.43	18.09	210
10	<i>cost2log</i>		trig	-19.599	-8.726	12.581	1.38	18.09	210
20	<i>cost2log</i>		trig	-4.071	5.220	21.068	1.36	18.09	260
40	<i>cost2log</i>		trig	10.229	7.433	-1.135	1.26	18.09	440
10	<i>cost2sum</i>		uni	30.0	12.107	24.206	33.86	43.22	214
20	<i>cost2sum</i>		uni	5.405	25.595	7.461	33.86	22.48	424
40	<i>cost2sum</i>		uni	10.632	13.274	10.083	32.95	15.63	446
50	<i>cost2sum</i>		uni	9.943	14.259	6.209	32.77	29.77	365
20	<i>cost2sumreg</i>	$1 \cdot 10^6$	uni	12.517	9.465	9.008	62.71	35.82	164
40	<i>cost2sumreg</i>	$1 \cdot 10^6$	uni	17.315	16.188	15.704	59.27	44.35	322
60	<i>cost2sumreg</i>	$1 \cdot 10^6$	uni	16.341	14.887	12.774	62.77	5.52	369
20	<i>cost2sumreg</i>	$2 \cdot 10^6$	uni	5.861	8.857	10.859	97.34	9.00	164
20	<i>cost2sumreg</i>	$4 \cdot 10^6$	uni	-24.932	-25.251	-26.475	146.49	39.37	164
20	<i>cost2sumreg</i>	$8 \cdot 10^6$	uni	-17.663	-15.602	-15.683	230.68	22.48	164
20	<i>cost2sumreg</i>	$1 \cdot 10^7$	uni	-25.152	-26.692	-24.966	289.51	38.02	164

Tabelle 17: Partikelfilter zur Ermittlung der atmosphärische langwellige Abstrahlung alw

Partikel	Kosten- funktional	Initiales Sampling	Importance Sampling	alw in $W \cdot m^{-2}$	0.65- Konfidenz- intervall	0.95- Konfidenz- intervall	Samplings
10	<i>cost1</i>	uni	5xI2	247.0	[246.1, 247.9]	[245.0, 248.9]	60
20	<i>cost1</i>	uni	5xI2	171.0	[169.2, 172.6]	[166.8, 174.5]	120
40	<i>cost1</i>	uni	5xI2	191.4	[190.2, 192.8]	[188.6, 195.3]	240
40	<i>cost1</i>	uni	1xI2	193.5	[174.1, 208.4]	[153.2, 227.8]	80
100	<i>cost1</i>	uni	1xI2	232.3	[211.8, 247.6]	[189.7, 268.0]	200
20	<i>cost2log</i>	uni	5xI2	229.1	[222.5, 233.0]	[201.1, 240.0]	120
20	<i>cost2log</i>	uni	1xI2	216.6	[154.6, 223.7]	[140.5, 240.6]	40
40	<i>cost2log</i>	uni	5xI2	221.7	[159.8, 256.0]	[101.4, 304.1]	240
40	<i>cost2log</i>	uni	1xI2	211.7	[199.2, 225.5]	[156.3, 243.5]	80
60	<i>cost2log</i>	uni	1xI2	170.1	[159.2, 220.8]	[137.5, 246.2]	120
100	<i>cost2log</i>	uni	1xI2	215.9	[175.3, 231.8]	[150.6, 256.5]	200
20	<i>cost3log</i>	uni	5xi2	233.3	[171.3, 244.6]	[143.1, 267.2]	120
40	<i>cost3log</i>	uni	1xi2	227.1	[161.5, 243.5]	[126.3, 273.9]	80
40	<i>cost3log</i>	uni	5xi2	224.3	[160.5, 240.9]	[125.1, 271.6]	240
80	<i>cost3log</i>	uni	1xi2	222.1	[167.7, 236.7]	[138.4, 263.9]	160
100	<i>cost3log</i>	uni	1xi2	219.2	[168.2, 234.3]	[141.8, 258.9]	200
150	<i>cost3log</i>	uni	1xi2	174.3	[164.6, 232.5]	[141.4, 257.7]	300

Table 19: Partikelfilter zur Ermittlung der Netto-Süßwasserflüsse $wflx$ in $\text{kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ im HANSE-Modell. Das regularisierte Kostenfunktional hat einen Regularisierungsfaktor von $1 \cdot 10^6$

Partikel	Kostenfunktional	Initiales Sampling	Importance Sampling	$wflx(11)$ $\cdot 10^{-6}$	0.65-Konfidenzintervall	0.95-Konfidenzintervall	$wflx(12)$ $\cdot 10^{-6}$	0.65-Konfidenzintervall	0.95-Konfidenzintervall	Samplings
20	<i>cost1</i>	umi	8x11	11.252	[4.741, 22.499]	[-3.545, 31.969]	1.684	[-0.299, 11.609]	[-4.666, 25.901]	187
30	<i>cost2log</i>	umi	8x11	16.039	[11.112, 31.439]	[3.104, 40.678]	18.915	[14.9, 22.07]	[8.591, 26.372]	275
10	<i>cost2log</i>	rej	-	-4.452	[-11.708, 1.896]	[-18.51, 8.245]	-1.174	[-12.334, 2.396]	[-19.031, 8.646]	13
20	<i>cost2log</i>	rej	-	0.810	[-7.086, 9.364]	[-22.221, 17.261]	0.846	[-6.675, 10.42]	[-24.455, 19.993]	30
30	<i>cost2log</i>	rej	-	2.171	[-7.221, 8.801]	[-16.062, 17.089]	0.007	[-7.907, 7.921]	[-17.648, 18.27]	48
40	<i>cost2log</i>	rej	-	-3.588	[-12.928, 12.543]	[-24.814, 23.58]	-3.287	[-14.46, 14.995]	[-28.68, 28.198]	55
60	<i>cost2log</i>	rej	-	-1.752	[-8.343, 10.11]	[-16.252, 19.996]	-3.364	[-8.707, 11.14]	[-18.631, 21.827]	86
20	<i>cost2sumreg</i>	umi	5x12	-10.072	[-23.81, 1.552]	[-39.661, 15.29]	-11.722	[-24.729, 1.2839]	[-39.902, 15.374]	120
40	<i>cost2sumreg</i>	umi	1x12	-7.096	[-18.778, 1.889]	[-31.358, 13.571]	-8.97	[-19.173, -1.121]	[-30.16, 9.080]	85
40	<i>cost2sumreg</i>	umi	2x12	11.31	[2.788, 17.866]	[-6.389, 26.388]	13.72	[4.3712, 20.911]	[-5.6967, 30.26]	128
40	<i>cost2sumreg</i>	umi	5x12	-4.623	[-5.549, -3.910]	[-6.547, -2.984]	0.930	[-2.220, 3.354]	[-5.613, 6.504]	245
60	<i>cost2sumreg</i>	umi	1x12	-1.029	[-5.305, 2.534]	[-9.580, 7.522]	-4.508	[-12.322, 2.003]	[-20.136, 11.120]	129
80	<i>cost2sumreg</i>	umi	1x12	-28.070	[-30.309, -25.832]	[-32.751, -23.186]	-24.246	[-24.777, -23.714]	[-25.356, -23.087]	172

Literatur

- [1] CHEN, ZHE: *Bayesian Filtering: From Kalman Filters to Particle Filters, and Beyond*. Technischer Bericht, McMaster University, Hamilton, Ontario, Canada, 2003.
- [2] CLERC, MAURICE: *Particle swarm optimization*. ISTE, London [u.a.], 2006.
- [3] CRISAN, ARNAUD DOUCET DAN: *A Survey of Convergence Results on Particle Filtering Methods for Practitioners*. IEEE Transactions on Signal Processing, Vol. 50, No. 3, 2002.
- [4] DOUCET, ARNAUD, NANDO DE FREITAS und NEIL GORDON: *Sequential Monte Carlo Methods in Practice*. Springer, New York, 2001.
- [5] DOUCET, ARNAUD und ADAM M. JOHANSEN: *A Tutorial on Particle Filtering and Smoothing: Fifteen years later*. Technischer Bericht, The Institute of Statistical Mathematics, Tokyo, Japan and University of Warwick, 2008.
- [6] ERRICO, RONALD M.: *What Is an Adjoint Model?* Technischer Bericht, National Center for Atmospheric Research, Boulder, Colorado, 1997.
- [7] GIERING, RALF und THOMAS KAMINSKI: *Recipes for Adjoint Code Construction*. Technischer Bericht, Max-Planck-Institut für Meteorologie, 1999.
- [8] HAUG, A.J.: *A Tutorial on Bayesian Estimation and Tracking Techniques Applicable to Nonlinear and Non-Gaussian Processes*. Technischer Bericht, MITRE Corporation, McLean, Virginia, 2005.
- [9] KASIBHATLA, PRASAD S. und MARTIN HEIMANN: *Inverse methods in global biogeochemical cycles: [papers of a symposium workshop titled Inverse modeling of global biogeochemical cycles", held in Crete, Greece in March 1998]*. Geophysical monograph ; 114. American Geophysical Union, Washington, DC, 2000.
- [10] MARCHAL, OLIVER, CHARLES JACKSON, JOHAN NILSSON, ANDRÉ PAUL und THOMAS STOCKER: *Buoyancy-Driven Flow and Nature of Vertical Mixing in a Zonally Averaged Model*. In: SCHMITTNER, ANDREAS, JOHN C. H. CHIANG und SIDNEY R. HEMMING (Herausgeber): *Ocean circulation: mechanisms and impacts ; past and future changes of meridional overturning*, Geophysical monograph ; 173, Seiten 33 – 52, Washington, D.C, 2007. American Geophysical Union.
- [11] MELLOR, GEORGE L.: *An Equation of State for Numerical Models of Oceans and Estuaries*. 1991.
- [12] NEUMANN, DIRK: *Kalman-Filter und Partikelfilter zur Selbstlokalisierung - Ein Vergleich*, Januar 2002.

- [13] PAUL, ANDRÉ und MICHAEL SCHULZ: *Holocene Climate Variability on Centennial-to-Millennial Time Scales: 2. Internal Forced Oscillations as Possible Causes*. In: WEFER, GEROLD (Herausgeber): *Climate development and history of the North Atlantic realm*, Hanse conference report, Seiten 55 – 73, Berlin [u.a.], 2002. Springer.
- [14] RUBIN, DONALD B.: *The Calculation of Posterior Distributions by Data Augmentation: Comment: A Noniterative Sampling/Importance Resampling Alternative to the Data Augmentation Algorithm for Creating a Few Imputations When Fractions of Missing Information Are Modest: The SIR Algorithm*. *Journal of the American Statistical Association*, 82(398):543–546, 1987.
- [15] STOCKER, THOMAS F. und DANIEL G. WRIGHT: *A Zonally Averaged Ocean Model for the Thermohaline Circulation. Part I: Model Development and Flow Dynamics*. In: *Journal of Physical Oceanography Vol. 21*, 1991.
- [16] STOCKER, THOMAS F. und DANIEL G. WRIGHT: *Rapid changes in ocean circulation and atmospheric radiocarbon*. In: *Paleoceanography Vol. 11*, Seiten 773 – 795, 1996.
- [17] TRELEA, I.C.: *The particle swarm optimization algorithm: convergence analysis and parameter selection*. *Information Processing Letters*, 85(6):317–325, 2003.
- [18] WILKEN, DENNIS: *Zur Anwendung von Schwarmintelligenz-Optimierung auf die Dispersionsanpassung von Scholtewellen*. Doktorarbeit, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Dezember 2009.
- [19] ZICKFELD, KIRSTEN, THOMAS SLAWIG und STEFAN RAHMSTORF: *A low-order model for the response of the Atlantic thermohaline circulation to climate change*. Springer-Verlag, 2004.