



VARIATIONSMETHODEN IN DER
DATENASSIMILATION ZUR WETTER- UND
PREISVORHERSAGE

DIPLOMARBEIT
zur Erlangung des akademischen Grades
DIPLOM-MATHEMATIKER

Westfälische Wilhelms-Universität Münster
Fachbereich Mathematik und Informatik
Institut für Numerische und Angewandte Mathematik

Betreuung:
Prof. Dr. Martin Burger
Prof. Dr. Peter A. Markowich

Eingereicht von:
Fabian Lenz

Münster, März 2011

ABSTRACT

This thesis was concerned with an application of the 4DVAR model to weather prediction and price formation. In both situations we have an initial value problem where the initial condition has to be estimated using appropriate observations. The 4DVAR method reduces this task to a minimisation problem. This can be solved with the help of Gauss-Newton or regularisation methods. We have compared the numerical solutions obtained with this methods.

EIDESSTATTLICHE ERKLÄRUNG

Hiermit versichere ich, *Fabian Lenz*, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet habe. Gedanklich, inhaltlich oder wörtlich übernommenes habe ich durch Angabe von Herkunft und Text oder Anmerkung belegt bzw. kenntlich gemacht. Dies gilt in gleicher Weise für Bilder, Tabellen, Zeichnungen und Skizzen, die nicht von mir selbst erstellt wurden.

Alle auf der CD beigefügten Programme sind von mir selbst programmiert worden.

Münster, 02. März 2011

Fabian Lenz

DANKSAGUNG

Ich möchte mich bei allen bedanken, die mich in irgendeiner Form bei der Diplomarbeit unterstützt haben. Besonders bedanken möchte ich mich bei

- Prof. Dr. Martin Burger für die Auswahl des spannenden Themas, die Betreuung und die immer schnelle Beantwortung meiner Fragen,
- Prof. Dr. Peter Markowich für anregende Diskussionen zum Preismodell,
- Dipl.-Math. Jan-Frederik Pietschmann für anregende Diskussionen und die schnelle Beantwortung meiner Fragen zum Preismodell,
- Dipl.-Math. Martin Benning für die Hilfe bei der Numerik der L^1 -Regularisierung,
- Dipl.-Math. Jan Michael Schulte für die Hilfe jeglicher Art bei Fragestellungen aus der Numerik, LaTeX-Programmierung oder englischen Fachbegriffen,
- meinen Eltern für die jahrelange finanzielle und moralische Unterstützung.

Mein größter Dank geht an Dipl.-Math. Olga Friesen für Ihr Verständnis, Ihr Durchstöbern der Diplomarbeit nach Fehlern jeglicher Art und für die Beantwortung aller mathematischen Fragen, die ich Ihr gestellt habe.

INHALTSVERZEICHNIS

1. <i>Einführung</i>	1
2. <i>Daten-Assimilations-Verfahren</i>	3
2.1 Einführung in die Daten-Assimilation	3
2.2 Statisch/Deterministisch	5
2.3 Statisch/Stochastisch	10
2.4 dynamisch/4DVAR	16
3. <i>Lösungsmethoden des 4DVAR-Problems</i>	19
3.1 Gauß-Newton-Verfahren	19
3.2 Tikhonov-Regularisierung	22
3.2.1 Einführung in die Tikhonov-Regularisierung	22
3.2.2 Anwendung der Tikhonov-Regularisierung	23
3.3 L1-Regularisierung	25
3.3.1 Lösung der L1-Regularisierung	25
3.3.2 Numerische Realisierung	32
3.4 TV-Regularisierung	34
3.4.1 Lösung der TV-Regularisierung	34
3.4.2 Numerische Realisierung	35
4. <i>Preismodell</i>	37
4.1 Einführung in das Preisbildungsmodell	37
4.2 Fourier-Transformation	41
4.3 Eindeutigkeitsbeweis	44
5. <i>Anwendung der Regularisierungsmethoden</i>	49
5.1 Lineare Transportgleichung	49
5.1.1 Ergebnisse der Tikhonov-Regularisierung	52
5.1.2 L1-Regularisierung	54
5.1.3 TV-Regularisierung	57
5.2 Preismodell	58
6. <i>Fazit</i>	63

<i>Anhang</i>	65
<i>A. Gradient und Hessematrix</i>	67
<i>B. Fenchels Dualitätstheorem</i>	69
<i>C. Hermitsche Polynome und Funktionen</i>	71

1. EINFÜHRUNG

Bei allen großen Wetterdiensten ist die Datenassimilation die Grundlage der Wettervorhersage. Die Kunst dabei ist es aus relativ wenigen Daten eine Vorhersage für ein ganzes Land bzw. einen ganzen Kontinenten zu bekommen. Mathematisch gesehen ist dies ein Anfangswertproblem. Um das Wetter zu prognostizieren, muss man wissen, wie das Wetter momentan ist, und zwar nicht nur an dem Ort der Vorhersage, sondern in einer viel größeren Umgebung. Für eine Vorhersage für die nächsten fünf Tage, braucht man zum Beispiel schon den Anfangszustand auf der ganzen Erde.

Nun sind viele Beobachtungen fehlerhaft und unvollständig. Dennoch kann man mit Hilfe von Zusatzinformationen sowohl statistischer als auch dynamischer Art den wahrscheinlichsten aktuellen Zustand der Atmosphäre analysieren. Diese Analyse nennt man Datenassimilation. Auf diesen Zustand aufbauend, kann man Modelle anwenden, die dann zu den Wetterprognosen führen.

Ein ähnliches Problem wie die Vorhersage des zukünftigen Wetters, ist die Vorhersage des Preises von gehandelten Gütern. Daher wollen wir die Datenassimilation auch auf ein Modell der Preisvorhersage anwenden.

Die Diplomarbeit ist wie folgt aufgebaut. In Kapitel 2 werden wir das Konzept der Datenassimilation einführen und Unterschiede zwischen deterministischen und stochastischen Verfahren erläutern. Zum Abschluss des Kapitels werden wir die vierdimensionale Datenassimilation vorstellen, welche die Grundlage der Diplomarbeit ist. Als Basis hierfür dient uns das Buch [LLD06].

In Kapitel 3 werden wir verschiedene Regularisierungstechniken diskutieren, die eine Lösung der Datenassimilationsaufgabe liefern. Wir werden sowohl die analytische Lösung, als auch deren numerische Realisierung herleiten.

Ein Modell zur Preisbildung werden wir in Kapitel 4 vorstellen. Dieses Modell ist ein sogenanntes „Mean field game“ und wurde von Lions und Lasry im Jahr 2006 eingeführt [LL07]. Wir werden in diesem Kapitel unter anderem die Eindeutigkeit einer Lösung dieses Modells zeigen, die Voraussetzung für die Anwendung der Datenassimilation ist.

Die Arbeit schließen wir mit Kapitel 5, in dem wir die zuvor hergeleiteten Methoden auf das Modell der Preisbildung und auf ein Beispiel der Wettervorhersage anwen-

den. Dieses Beispiel aus der Meteorologie entnehmen wir dabei der Arbeit [FNB10] von Melina Freitag.

2. DATEN-ASSIMILATIONS-VERFAHREN

2.1 *Einführung in die Daten-Assimilation*

Wir wollen in diesem Abschnitt eine kleine Einführung in die Datenassimilation geben. Was bedeutet Datenassimilation? Wofür wird sie bei der Wettervorhersage gebraucht? Was für Verfahren gibt es?

Um die Datenassimilation zu verstehen, versuchen wir erstmal die numerische Wettervorhersage zu erläutern. Diese ist im Grunde ein Vorwärtsproblem, denn kennt man den Anfangszustand des Wetters auf der ganzen Welt (also alle möglichen Wetterdaten zum jetzigen Zeitpunkt), so kann man darauf Vorhersagemodelle anwenden, um die Daten für die Zukunft (bis zu 5 Tage) relativ genau zu berechnen.

Nun stellt sich aber das Problem, dass man leider genau diesen Anfangszustand nicht kennt. Natürlich gibt es rund um den Globus zahlreiche Wetterstationen, die genau solche Daten sammeln sollen. Allerdings sind dies viel zu wenige. Um das zu verstehen, betrachten wir zum Beispiel die Studenten- und Fahrradstadt Münster. Wenn man hier morgens mit dem Fahrrad zur Uni fahren will, möchte man vielleicht wissen, wie warm bzw. kalt es gerade draußen ist, um zu entscheiden, was man anziehen soll. Sucht man nun im Internet nach den Wetterdaten vom deutschen Wetterdienst (DWD), bekommt man aber leider nur die Daten vom Flughafen Münster/Osnabrück (25 km entfernt) oder die aus Essen (60 km entfernt). Mit diesen Daten kann man sich als Fahrradfahrer natürlich noch zufrieden geben, da der Unterschied möglicherweise nicht allzu groß sein wird. Aber diese Daten für eine Wettervorhersage für die nächsten 5 Tage zu benutzen, könnte zu sehr ungenauen Ergebnissen führen.

Das so eben beschriebene Problem ist eigentlich noch harmlos. Betrachtet man zum Beispiel die Ozeane oder die Polargebiete, so sieht man schnell ein, dass es viel zu wenig Beobachtungsstationen gibt, um den Anfangszustand des Wetters für eine vielversprechende Wettervorhersage zu ermitteln.

Hier kommt nun die Datenassimilation ins Spiel. Die Grundaufgabe der Daten-Assimilation kann man also so formulieren: Aus den unvollständigen und fehlerhaften Beobachtungen, soll sowohl der wahrscheinlichste aktuelle Zustand der Atmosphäre berechnet werden, als auch der Fehler dieser Analyse bestimmt werden. Dazu gibt es verschiedene Verfahren.

Wir wollen nun kurz die Unterschiede dieser Verfahren vorstellen. Einen noch detaillierteren Überblick findet man in Kapitel 1 von [LLD06].

Als erstes definieren wir ein Gitter mit insgesamt n verschiedenen Gitterpunkten. Diese Punkte sollen z.B. so gewählt werden, dass man, wenn man ein Vorhersagemodell darauf anwendet, eine sehr gute Vorhersage für das ganze Gebiet bekommt. Weiter definieren wir die Zustandsvariable $x_k \in \mathbb{R}^n$, die uns die Wetterdaten zum Zeitpunkt $k = 0, \dots, N$ auf dem Gitter als n -dimensionalen Vektor angibt. Wir suchen jetzt zum Zeitpunkt $k = 0$ die Wetterdaten auf diesem Gitter, welche unter gewissen Zusatzinformationen, die wir noch genauer beschreiben wollen, am wahrscheinlichsten sind. Diesen Vektor nennen wir Analyse und bezeichnen ihn mit x_0 . Die weiteren Zustände x_k für $k = 1, \dots, N$ erhalten wir, wenn wir die Vorhersagemodelle auf die Wetterdaten des vorigen Zeitpunktes anwenden. Bezeichnen wir also mit dem Operator M die Vorhersagemodelle, so bedeutet dies

$$x_{k+1} = M(x_k) \quad \text{für } k = 0, 1, \dots, N-1. \quad (2.1)$$

Je nachdem, ob wir diese Wetterdaten zu den verschiedenen Zeitpunkten mitberücksichtigen oder nicht, nennen wir das Modell **dynamisch** bzw. **statisch**.

Außerdem können wir die Modelle in **deterministisch** und **stochastisch** unterscheiden. Denn das Vorhersagemodell M ist nicht immer exakt. Daher berechnet sich x_{k+1} durch

$$x_{k+1} = M(x_k) + w_{k+1}. \quad (2.2)$$

Dabei soll w_{k+1} die Abweichung zum exakten Wert bezeichnen. Diese Abweichung kann durch einen systematischen Modellfehler entstehen, oder auf zufällige Art und Weise. Wir wollen annehmen, dass das Modell durchschnittlich exakt ist und wir die Varianz kennen. Mathematisch bedeutet dies $E[w] = 0$ und $\text{Cov}(w) = Q$, wobei Q eine bekannte, symmetrische und positiv definite Matrix ist.

Die Wetterdaten, die an den Wetterstationen gemessen werden, nennen wir Beobachtungen und bezeichnen den m -dimensionalen Vektor, der diese Beobachtungen angibt, als $z \in \mathbb{R}^m$. Um nun diese mit den gesuchten Wetterdaten an den Gitterpunkten vergleichen zu können, benötigen wir eine Funktion $h : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^m$ die aus den Wetterdaten an den Gitterpunkten die Wetterdaten an den Beobachtungsstationen berechnet. Das heißt, es gilt

$$z_k = h(x_k). \quad (2.3)$$

Diese Funktion kann z.B. aus physikalischen Überlegungen hergeleitet werden. Da diese Funktion die zugrunde liegende Situation unter Umständen nicht exakt abbilden kann, addieren wir zu (2.3) noch einen zufälligen Term v_k hinzu, der den

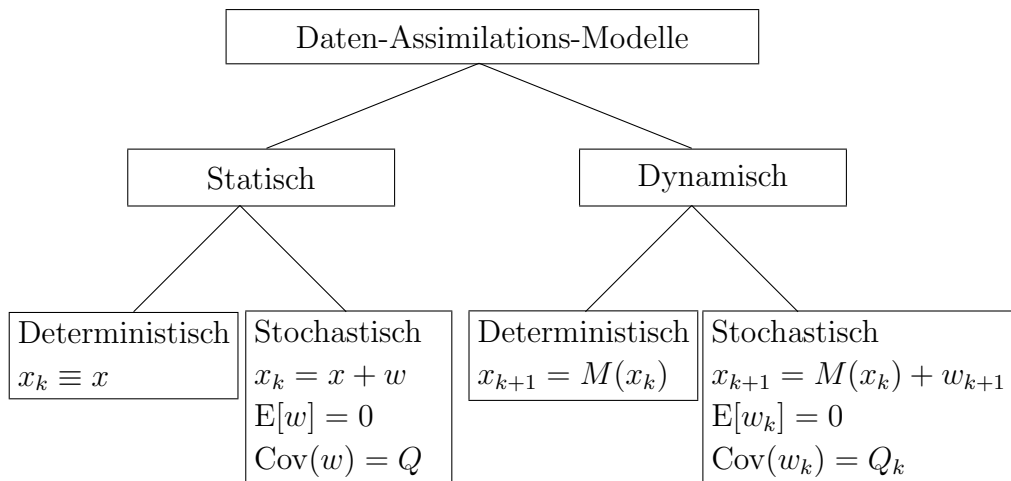


Fig. 2.1: Überblick über die unterschiedlichen Modelle aus [LLD06]

Modellfehler ausgleicht. Dazu nehmen wir an, dass dieser Vektor ein so genanntes **weißes Rauschen** ist. Dies bedeutet es gilt

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[v_k] &= 0 \\ \text{Cov}(v_k) &= R_k, \end{aligned}$$

wobei $R_k \in \mathbb{R}^{m \times m}$ eine bekannte, symmetrische und positiv definite Matrix ist. Es gelte also insgesamt

$$z_k = h(x_k) + v_k. \quad (2.4)$$

Die Funktion h kann je nach Modell sowohl linear, als auch nicht-linear auftreten. Ist sie linear, so schreiben wir statt (2.4) auch

$$z_k = Hx_k + v_k.$$

Wir haben jetzt einen groben Überblick über das Grundgerüst eines Daten-Assimilation-Problems. Wir wollen in den nächsten Abschnitten die verschiedenen Modelle, die in Abbildung 2.1 zusammenfassend skizziert sind, untersuchen.

2.2 Statisch/Deterministisch

In diesem Abschnitt betrachten wir den einfachsten Fall, und zwar den eines statischen und deterministischen Modells. Das bedeutet, wir haben den zeitlich unabhängigen Beobachtungsvektor $z \in \mathbb{R}^m$ und die Funktion h gegeben. Wir suchen nun den Zustandsvektor $x \in \mathbb{R}^n$, der $z = h(x)$ erfüllt. Zunächst wollen wir annehmen, dass h linear ist. Dann können wir die Funktion als Matrix H schreiben

und bekommen ein lineares Gleichungssystem (LGS) $Hx = z$. Weiter gelte, dass die Matrix $H \in \mathbb{R}^{m \times n}$ vollen Rang hat. Dann können wir das Problem in drei Fälle unterteilen.

- (i) $m > n$, überbestimmter Fall
- (ii) $m = n$, eindeutig bestimmter Fall
- (iii) $m < n$, unterbestimmter Fall

Im ersten Fall muss für das LGS im Allgemeinen gar keine exakte Lösung existieren. Daher suchen wir die Lösung, die am besten die Beobachtungen annähert. Es ist naheliegend, denjenigen Vektor als beste angenäherte Lösung zu bezeichnen, dessen Residuum

$$r(x) := z - Hx$$

möglichst nahe bei 0 ist. Dazu wollen wir die Funktion

$$f(x) := \|r(x)\|_2^2 = (z - Hx)^T(z - Hx) \quad (2.5)$$

minimieren.

Definition 2.1. Sei $z \in \mathbb{R}^m$, und $H \in \mathbb{R}^{m \times n}$ eine Matrix. Wir nennen ein $x_{kQ} \in \mathbb{R}^n$ **kleinste-Quadrate-Lösung**, wenn x_{kQ} die Funktion (2.5) minimiert.

Satz 2.1. Sei $z \in \mathbb{R}^m$, und $H \in \mathbb{R}^{m \times n}$ eine Matrix mit vollem Rang. Dann ist

$$x_{kQ} = (H^T H)^{-1} H^T z$$

die eindeutige kleinste-Quadrate-Lösung.

Beweis. Es gilt

$$f(x) = (z - Hx)^T(z - Hx) = z^T z - 2z^T Hx + x^T H^T Hx.$$

Gradient und Hessematrix von f sind dann

$$\begin{aligned} \nabla f(x) &= -2H^T z + 2H^T Hx, \\ \nabla^2 f(x) &= 2H^T H. \end{aligned}$$

Die Hesse-Matrix ist positiv definit, da H nach Voraussetzung vollen Rang hat. Damit müssen wir, um das eindeutige Minimum zu bekommen, den Gradienten gleich Null setzen. Dies ergibt das LGS

$$H^T Hx = H^T z. \quad (2.6)$$

Damit folgt die Behauptung des Satzes. \square

Das Gleichungssystem in (2.6) wird auch als System der Normalgleichungen bezeichnet. Man kann zeigen das die Normalgleichungen immer lösbar sind, nicht nur für den Fall, dass H vollen Rang hat. Fordert man letztere Eigenschaft nicht, so ist die Lösung nicht mehr eindeutig. In der Literatur (siehe [Nat96]) wird dann die Lösung mit der kleinsten Norm bevorzugt. Diese wird auch verallgemeinerte Moore-Penrose Inverse genannt.

Kommen wir nun zum eindeutig bestimmten Fall $m = n$. Da die Matrix H in diesem Fall regulär ist, ist die Lösung eindeutig durch $x = H^{-1}z$ gegeben.

Im Fall $m < n$ haben wir das Problem, dass nicht nur eine Lösung existiert, sondern unendlich viele. Hier betrachten wir, wie schon eben beschrieben, die verallgemeinerte Inverse. Also den Vektor, der kleinste-Quadrate-Lösung ist und kleinste Länge hat. Dieses Problem können wir als bedingtes Minimierungsproblem ansehen. Wir suchen also das $x^* \in \mathbb{R}^n$, welches

$$x^* = \arg \min \{ f(x) = \|x\|_2^2 \mid Hx = z \}$$

erfüllt.

Satz 2.2. Sei $m < n$, $z \in \mathbb{R}^m$ und $H \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mit $\text{rang}(H) = m$. Dann ist

$$x^* = H^T(HH^T)^{-1}z$$

lokales Minimum der Funktion $f(x) = \|x\|_2^2$ bzgl. der Bedingung $Hx = z$.

Beweis. Wir stellen die Lagrangefunktion dieses bedingten Minimierungsproblems auf:

$$\mathcal{L}(x, \lambda) = \|x\|_2^2 + \lambda^T(z - Hx).$$

Für die Gradienten bzgl. x und λ muss nun

$$\nabla_x \mathcal{L}(x, \lambda) = 2x - H^T \lambda = 0, \tag{2.7}$$

$$\nabla_\lambda \mathcal{L}(x, \lambda) = z - Hx = 0 \tag{2.8}$$

gelten. Aus (2.7) erhalten wir

$$x^* = \frac{1}{2} H^T \lambda. \tag{2.9}$$

Setzen wir dies in (2.8) ein, bekommen wir

$$\lambda^* = 2(HH^T)^{-1}z$$

Hierbei müssen wir bemerken, dass dies nur möglich ist, da H vollen Rang hat und damit HH^T invertierbar ist. Einsetzen in (2.9) ergibt

$$x^* = H^T(HH^T)^{-1}z.$$

x^* erfüllt nun die notwendige Bedingung für ein Extremum. Dass x^* wirklich eine lokale Minimalstelle ist, überprüfen wir mit der hinreichenden Bedingung zweiter Ordnung. Es gilt

$$\nabla^2 f(x^*) + \lambda^* \nabla^2 (Hx^* - z) = 2I + 0 > 0.$$

Damit ist die Behauptung bewiesen. \square

Betrachten wir nun den allgemeinen Fall, in dem die Funktion h nicht-linear ist. Dann ist es unser Ziel, das x zu finden, welches das Residuum

$$r(x) = z - h(x)$$

bezüglich einer Norm minimiert. Da man die Einträge des Residuums, je nach zusätzlichen Informationen, beim minimieren unterschiedlich gewichten kann, nehmen wir die Energienorm $\|x\|_W = (x^T W x)^{\frac{1}{2}}$. Hierbei muss die Gewichtsmatrix W eine reelle, symmetrische, positiv definite Matrix sein. Wir wollen also nun die Funktion

$$f(x) = \frac{1}{2} \|r(x)\|_W^2 = \frac{1}{2} (z - h(x))^T W (z - h(x)) \quad (2.10)$$

minimieren. Dabei haben wir die Funktion mit $\frac{1}{2}$ multipliziert, damit später bei den Ableitungen keine Vorfaktoren mehr auftreten. Am Ergebnis ändert dies natürlich nichts.

Wir benutzen die Taylorentwicklung erster Ordnung von h um einen Startpunkt x_c , den man z.B. schätzen kann. Dies bedeutet, dass für alle x aus einer hinreichend kleinen Umgebung von x_c

$$h(x) \approx h(x_c) + D_h(x_c)(x - x_c)$$

gilt. Hierbei ist $D_h(x)$ die Jacobi-Matrix von h . Es folgt aus (2.10)

$$\begin{aligned} f(x) &\approx \frac{1}{2} (z - h(x_c) - D_h(x_c)(x - x_c))^T W (z - h(x_c) - D_h(x_c)(x - x_c)) \\ &= \frac{1}{2} (r(x_c) - D_h(x_c)(x - x_c))^T W (r(x_c) - D_h(x_c)(x - x_c)) \\ &=: Q_1(x) \end{aligned}$$

Diese Darstellung hat den Vorteil, dass sie aufgrund der Linearität einfacher zu minimieren ist. Der Gradient von Q_1 ist

$$\nabla Q_1(x) = -D_h^T(x_c) W r(x_c) + (D_h^T(x_c) W D_h(x_c))(x - x_c).$$

Setzen wir ihn gleich Null, erhalten wir das LGS

$$(D_h^T(x_c) W D_h(x_c))(x - x_c) = D_h^T(x_c) W r(x_c).$$

Hieraus können wir nun x berechnen, und das Verfahren mit diesem neuen Entwicklungspunkt ein weiteres Mal durchführen. Diese Iterationsschritte (auch Gauß-Newton-Verfahren genannt) kann man nun so lange wiederholen (falls bestimmte Konvergenzkriterien erfüllt sind), bis $\|x - x_c\|$ unter ein vorgegebenes Minimum fällt.

Um die Approximation zu verbessern, kann man auch die Taylorentwicklung zweiter Ordnung von f berechnen. Dies führt zu den Newtongleichungen, die wir im nächsten Abschnitt vorstellen werden. Hiermit endet das Kapitel über den statisch, deterministischen Fall. Weitere und genauere Informationen findet man in Kapitel 5-8 von [LLD06].

2.3 Statisch/Stochastisch

Wir werden in diesem Abschnitt nur den speziellen, aber für unsere Arbeit wichtigen Fall der 3DVAR (3-dimensionale Variationsmethode) vorstellen. Wichtig deshalb, weil die Weiterentwicklung davon die 4DVAR ist, was den Hauptaugenmerk dieser Diplomarbeit darstellt. Wir werden hier nur einen groben Überblick über 3DVAR geben. Für mehr Details verweisen wir den Leser auf Kapitel 20 von [LLD06].

Wir nehmen für diese Methode an, dass sowohl der gesuchte Wetterzustand an den Gitterpunkten, als auch der Messfehler an den Wetterstationen normalverteilt ist, wobei die Erwartungswerte und die Kovarianzmatritzen bekannt seien.

Im Folgenden bezeichnen wir den Vektor der unbekannt genauen Wetterdaten (z.B. Temperatur) auf dem Berechnungsgitter mit $x \in \mathbb{R}^n$. Unser Ziel ist es also nun den wahrscheinlichsten Vektor zu bestimmen, der die beobachteten Daten am besten erfüllen würde. Unsere vorhandenen Informationen sind gewisse Hintergrundinformationen an den Gitterpunkten. Diese Informationen können z.B. durch Wettervorhersagen, die in den letzten Tagen gemacht wurden, entstanden sein. Wir bezeichnen diese Informationen mit $x_b \in \mathbb{R}^n$. Für den Hintergrundfehler $\tilde{x}_b = x - x_b$ nehmen wir an, dass

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[\tilde{x}_b] &= 0 \\ \text{Cov}(\tilde{x}_b) &= \mathbb{E}[\tilde{x}_b \tilde{x}_b^T] = B \end{aligned}$$

gilt, wobei B eine symmetrische, positiv definite Matrix ist.

Nehmen wir jetzt zusätzlich an, dass die Unbekannte x eine mehrdimensionale Normalverteilung besitzt mit eben dem Erwartungswert x_b und der Kovarianzmatrix B , so lässt sich die Wahrscheinlichkeit für ein bestimmtes x berechnen durch

$$p(x) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}} \det(B)^{\frac{1}{2}}} e^{-J_b(x)}, \quad (2.11)$$

mit

$$J_b(x) = \frac{1}{2}(x - x_b)^T B^{-1}(x - x_b).$$

Weiter kennen wir auch hier wieder m Beobachtungswerte, die wir in dem Vektor $z \in \mathbb{R}^m$ zusammenfassen. Wir nehmen an, dass sich diese Beobachtungswerte zerlegen lassen in eine bekannte Funktion $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, die von der Unbekannten x abhängt, und einen unbekannt Vektor $v \in \mathbb{R}^m$, der den Messfehler beschreibt:

$$z = h(x) + v \quad (2.12)$$

Für v soll wie für \tilde{x}_b gelten:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[v] &= 0, \\ \text{Cov}(v) &= \mathbb{E}[vv^T] = R, \end{aligned}$$

wobei $R \in \mathbb{R}^{m \times m}$ eine bekannte, symmetrische, positiv definite Matrix ist. Zusätzlich sollen die Vektoren v und \tilde{x}_b unkorreliert sein, denn der Messfehler soll nicht vom Hintergrundfehler abhängen. Dies bedeutet

$$\mathbb{E}[v\tilde{x}_b^T] = \mathbb{E}[\tilde{x}_b v^T] = 0.$$

Auch für v nehmen wir eine mehrdimensionale Normalverteilung mit Erwartungswert 0 und Kovarianzmatrix R an. Für ein bestimmtes x ist dann die Wahrscheinlichkeitsdichte für z wegen (2.12)

$$p(z|x) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{m}{2}} \det(R)^{\frac{1}{2}}} e^{-J_o(x)} \quad (2.13)$$

mit

$$J_o(x) = \frac{1}{2}(z - h(x))^T R^{-1}(z - h(x)).$$

Wir wollen aber die Wahrscheinlichkeit von x bei gegebenem z berechnen. Dafür können wir den Satz von Bayes anwenden([Pap65]):

Satz 2.3. (Bayes)

Sei $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ ein Wahrscheinlichkeitsraum und $A, B \in \mathcal{A}$ Ereignisse mit $\mathbb{P}(A) > 0$. Dann gilt

$$\mathbb{P}(B|A) = \frac{\mathbb{P}(A|B)\mathbb{P}(B)}{\mathbb{P}(A)}$$

Beweis. Es gilt nach der Definition bedingter Wahrscheinlichkeiten

$$\mathbb{P}(A \cap B) = \mathbb{P}(A|B)\mathbb{P}(B) = \mathbb{P}(B|A)\mathbb{P}(A)$$

Umformen ergibt die Behauptung. □

In unserem Fall bekommen wir damit also

$$p(x|z) = \frac{p(z|x)p(x)}{p(z)} \quad (2.14)$$

wobei wir $p(z)$ berechnen können mit

$$p(z) = \int_{\mathbb{R}^n} p(z|x)p(x)dx$$

Da $p(z)$ nicht von x abhängt, können wir dies für unseren Fall als Konstante sehen und setzen so $C = \frac{1}{p(z)}$. Setzen wir nun (2.11) und (2.13) in (2.14) ein, so erhalten wir

$$p(x|z) = \frac{C}{(2\pi)^{\frac{m+n}{2}} (\det(R) \det(B))^{\frac{1}{2}}} e^{-(J_o(x)+J_b(x))}. \quad (2.15)$$

Um nun das x zu finden, welches unter gegebenem z die höchste Wahrscheinlichkeit hat, müssen wir nur das Maximum von der rechten Seite von (2.15) berechnen. Da der erste Faktor unabhängig von x und positiv ist, erhalten wir auf Grund der Monotonie der Exponentialfunktion die Maximalstelle genau dann, wenn wir die Minimalstelle von

$$\begin{aligned} J(x) &:= J_o(x) + J_b(x) \\ &= \frac{1}{2}(z - h(x))^T R^{-1}(z - h(x)) + \frac{1}{2}(x - x_b)^T B^{-1}(x - x_b) \end{aligned} \quad (2.16)$$

berechnen. Um nun das Minimum zu berechnen, kann man wieder unterscheiden, ob die Funktion h linear oder nicht-linear ist. Betrachten wir zuerst den linearen Fall, so können wir $h(x) = Hx$ schreiben. Somit wird die zu minimierende Funktion $J(x)$ zu

$$J(x) = \frac{1}{2}(x - x_b)^T B^{-1}(x - x_b) + \frac{1}{2}(z - Hx)^T R^{-1}(z - Hx). \quad (2.17)$$

Gradienten und Hesse-Matrix sind

$$\begin{aligned} \nabla J(x) &= B^{-1}(x - x_b) - H^T R^{-1}(z - Hx) \\ &= (B^{-1} + H^T R^{-1} H)x - B^{-1}x_b - H^T R^{-1}z, \\ \nabla^2 J(x) &= B^{-1} + H^T R^{-1} H. \end{aligned}$$

Für den Beweis, dass die Hessematrix positiv definit ist, betrachten wir für jedes $x \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ die Gleichung

$$x^T (B^{-1} + H^T R^{-1} H)x = x^T B^{-1}x + (Hx)^T R^{-1} Hx. \quad (2.18)$$

Der erste Term auf der rechten Seite ist auf Grund der positiven Definitheit von B und damit auch von der Inversen größer Null. Der zweite Term ist größer gleich Null, da R^{-1} positiv definit ist. Insgesamt ist also (2.18) größer Null und damit ist die Hessematrix positiv definit. Um nun den Minimierer zu finden, müssen wir also folgendes LGS lösen

$$(B^{-1} + H^T R^{-1} H)x = B^{-1}x_b + H^T R^{-1}z. \quad (2.19)$$

Da die Matrix auf der linken Seite eine $n \times n$ -Matrix ist und n sehr groß sein kann, aber im Besonderen oft $n > m$ gilt (weniger Beobachtungsdaten als gesuchte Daten), wäre es für die Berechnungsgeschwindigkeit gut, wenn wir das LGS auf eine $m \times m$ -Matrix reduzieren können. Dies werden wir nun herleiten.

Dazu definieren wir $\delta x := x - x_b$, $d := z - Hx_b$ und machen zu (2.17) eine Nullergänzung mit Hx_b . Damit erhalten wir

$$J(\delta x) = \frac{1}{2}(\delta x)^T B^{-1}\delta x + \frac{1}{2}(d - H\delta x)^T R^{-1}(d - H\delta x).$$

Der Gradient ist dann

$$\nabla J(\delta x) = B^{-1}\delta x - H^T R^{-1}(d - H\delta x).$$

Setzen wir diesen gleich Null, erhalten wir das LGS

$$(B^{-1} + H^T R^{-1}H)\delta x = H^T R^{-1}(z - Hx_b).$$

Daraus folgt

$$\delta x = (B^{-1} + H^T R^{-1}H)^{-1}H^T R^{-1}(z - Hx_b). \quad (2.20)$$

Für den ersten Term auf der rechten Seite können wir die Sherman-Morrison-Woodbury Formel([LLD06]) anwenden:

$$(B^{-1} + H^T R^{-1}H)^{-1} = B - BH^T(R + HBH^T)^{-1}HB.$$

Damit ergibt sich aus (2.20)

$$\begin{aligned} \delta x &= BH^T R^{-1}(z - Hx_b) - BH^T(R + HBH^T)^{-1}HBH^T R^{-1}(z - Hx_b) \\ &= BH^T(I - (R + HBH^T)^{-1}HBH^T)R^{-1}(z - Hx_b) \\ &= BH^T((R + HBH^T)^{-1}(R + HBH^T) - HBH^T)R^{-1}(z - Hx_b) \\ &= BH^T(R + HBH^T)^{-1}(z - Hx_b). \end{aligned}$$

Wir können δx in zwei Schritten berechnen. Als erstes lösen wir das LGS

$$(R + HBH^T)w = (z - Hx_b)$$

mit einer $m \times m$ -Matrix auf der linken Seite und berechnen dann mit diesem w

$$\delta x = BH^T w.$$

Dieses LGS erfordert nun für $m < n$ weniger Rechenaufwand. Außerdem kann man zeigen, dass für diesen unterbestimmten Fall das Problem korrekt gestellt ist, falls H vollen Rang hat. Das LGS (2.19) ist unter diesen Bedingungen aber schlecht gestellt. Betrachten wir den überstimmten Fall $m > n$ so gilt genau das Umgekehrte. Das Problem, dass immer nur ein LGS korrekt gestellt ist, kann man durch Vorkonditionierung umgehen. Darauf wollen wir in dieser Arbeit aber nicht eingehen [PD92]. Kommen wir daher zu dem allgemeineren, komplizierteren und öfter auftretenden Fall, dass die Funktion h nicht-linear ist.

Um nun das Minimum zu berechnen, können wir die Newton-Methode oder das Gauß-Newton Verfahren anwenden. Zuerst stellen wir die Newton-Methode kurz vor.

Um das Newton-Verfahren herzuleiten berechnen wir als erstes die Taylor-Entwicklung zweiter Ordnung von J .

Wir können J wie in (2.16) in

$$J(x) = J_b(x) + J_o(x)$$

mit

$$J_b(x) = \frac{1}{2}(x - x_b)^T B^{-1}(x - x_b),$$

$$J_o(x) = \frac{1}{2}(z - h(x))^T R^{-1}(z - h(x)),$$

aufteilen. Wir entwickeln nun J um einen festen Punkt x_c :

$$Q(y) := J(x_c + y) \approx J(x_c) + (\nabla J(x_c))^T y + \frac{1}{2} y^T \nabla^2 J(x_c) y.$$

Der Gradient dieser Funktion ist dann

$$\nabla Q(y) = \nabla J(x_c) + \nabla^2 J(x_c) y.$$

Setzen wir diese Funktion gleich Null, so bekommen wir das LGS

$$\nabla^2 J(x_c) y = -\nabla J(x_c). \quad (2.21)$$

Das Minimum y^* , welches wir aus diesem LGS erhalten, bildet dann den neuen Punkt

$$x_{c_{neu}} = x_c + y^*.$$

Durch mehrmaliges Anwenden dieses Verfahrens konvergiert der Punkt x_c gegen die Lösung. Um für unsere Funktion J das LGS (2.21) aufstellen zu können, benötigen wir die Gradienten und die Hesse-Matrizen von J_b und J_o , denn es gilt

$$\nabla J(x) = \nabla J_b(x) + \nabla J_o(x),$$

$$\nabla^2 J(x) = \nabla^2 J_b(x) + \nabla^2 J_o(x).$$

Berechnen wir diese, erhalten wir

$$\nabla J_b(x) = B^{-1}(x - x_b),$$

$$\nabla J_o(x) = -D_h^T(x) R^{-1}(z - h(x)),$$

$$\nabla^2 J_b(x) = B^{-1},$$

$$\nabla^2 J_o(x) = \sum_{i=1}^m \nabla^2 h_i(x) (R^{-1}(h(z) - x))_i + D_h^T(x) R^{-1} D_h(x),$$

wobei $D_h(x)$ die Jacobi-Matrix von h ist.

Statt des Newton-Verfahrens können wir auch das Gauss-Newton Verfahren aus Kapitel 3.1 benutzen. Dass wir diese Methode anwenden können, liegt daran, dass wir das Minimierungsproblem auch schreiben können als $\|f(x)\|_2^2$ mit

$$f(x) = \begin{pmatrix} B^{-\frac{1}{2}}(x - x_b) \\ R^{-\frac{1}{2}}(z - h(x)) \end{pmatrix}.$$

Der Vorteil der Newton-Methode ist die Konvergenzordnung. Denn die Newton-Methode konvergiert, lokal quadratisch, während das Gauss-Newton-Verfahren nur lokal linear konvergiert [Grü05]. Der Nachteil ist, dass wir die Hessematrix brauchen. Wie wir in Abschnitt 3.1 sehen werden braucht das Gauß-Newton-Verfahren nur erste Ableitungen.

Wir haben in diesem Abschnitt jetzt das 3DVAR-Problem hergeleitet. Sowohl für den linearen als auch für den nichtlinearen Fall haben wir Lösungsmethoden vorgestellt. Wir werden im nächsten Kapitel dieses Problem um eine Zeitkomponente erweitern. Dies führt uns dann zum 4DVAR-Problem.

2.4 dynamisch/4DVAR

Wir werden in diesem Abschnitt nun nicht mehr zwischen deterministisch und statistisch unterscheiden, sondern wollen auf das Ausgangsproblem in der vier-dimensionalen Variationsmethode (4DVAR) hinarbeiten. Der Unterschied zur 3DVAR ist, dass nun die Zeitkomponente hinzukommt, was auch die Dynamik des Systems ausmacht.

Es sind nun nicht nur Beobachtungen zu einem bestimmten Zeitpunkt bekannt, sondern in einem kleinem Zeitraum zu verschiedenen Zeitpunkten $k = 1, \dots, N$. Wir bezeichnen die Beobachtungen mit $z_k \in \mathbb{R}^m$. Wir wollen den Anfangszustand $x_0 \in \mathbb{R}^n$ zum Zeitpunkt $k = 0$ berechnen, der diesen Beobachtungen am besten gerecht wird. Zur Verfügung stehen uns Vorhersage-Funktionen $\mathcal{M}_k : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ für $k = 1, \dots, N$, die aus dem aktuellen Zustand x_k den Zustand einen Zeitschritt weiter berechnet. Das heißt, es gelte

$$x_{k+1} = \mathcal{M}_k(x_k). \quad (2.22)$$

Weiterhin haben wir wie im vorigen Abschnitt Funktionen $h_k : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ zur Verfügung, die die Zustände x_k in den Raum der Beobachtungen projizieren. Es gelte also

$$z_k = h_k(x_k) + v_k,$$

wobei der Vektor $v_k \in \mathbb{R}^m$ Ungenauigkeiten in der Projektion ausgleicht. Für diesen gelte

$$\mathbb{E}[v_k] = 0, \quad \text{Cov}(v_k) = R_k \in \mathbb{R}^{m \times m},$$

mit gegebenen, symmetrischen, positiv definiten Matrizen R_k . Nun suchen wir also den Anfangszustand \hat{x}_0 , der die Funktion

$$J(x_0) = \sum_{k=1}^N J_k(x_0), \quad (2.23)$$

mit

$$J_k(x_0) = \frac{1}{2} (h_k(x_k) - z_k)^T R_k^{-1} (h_k(x_k) - z_k)$$

minimiert.

Dieses Modell können wir noch ein wenig weiterentwickeln, wenn wir eine Schätzung $x_0^b \in \mathbb{R}^n$ für den Anfangszustand x_0 kennen. Solch eine Information könnte man zum Beispiel durch frühere Wettervorhersagen für den Zeitpunkt $k = 0$ erhalten. Nehmen wir für diese sogenannte „Hintergrund“-Information

$$\mathbb{E}[x_0^b] = x_0, \quad \text{Var}(x_0^b) = B \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

an, wobei hier B als symmetrisch und positiv definit angenommen wird. Damit können wir das Grundproblem der 4DVAR aufstellen.

Problem 2.1. *Gesucht ist $\hat{x}_0 \in \mathbb{R}^n$, welches die Funktion*

$$J(x_0) = \frac{1}{2}(x_0 - x_0^b)^T B^{-1}(x_0 - x_0^b) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N (z_k - h_k(x_k))^T R_k^{-1}(z_k - h_k(x_k)) \quad (2.24)$$

unter der Bedingung

$$x_{k+1} = \mathcal{M}_k(x_k) \quad \text{für } k = 0, \dots, N-1 \quad (2.25)$$

minimiert.

Mit dieser Herleitung beenden wir diesen Abschnitt. Wir haben jetzt verschiedene Verfahren kennengelernt, wie man nötige Anfangs-/Zustandsdaten für die Wettervorhersage bekommt. Angelangt sind wir jetzt bei der 4DVAR, das Verfahren, welches heutzutage bei den großen Wetterdiensten (z.B. DWD) benutzt wird. Im nächsten Kapitel wollen wir verschiedene Methoden vorstellen, um die Lösung von Problem 1 numerisch zu berechnen.

Anmerken wollen wir noch, dass wir in (2.22) davon ausgehen, dass die Modellgleichungen exakt sind. Wir hätten auch einen systematischen Modellfehler dazu betrachten können. Dies würde uns dann zu der Gleichung

$$x_{k+1} = \mathcal{M}_k(x_k) + w_{k+1}$$

bringen. Wäre \mathcal{M}_k ein linearer Operator, könnte man mit dem sogenannten Kalman-Filter eine Lösung finden. Wir verweisen den Leser auf Kapitel 27 von [LLD06] für nähere Informationen.

3. LÖSUNGSMETHODEN DES 4DVAR-PROBLEMS

Im letzten Abschnitt haben wir das Minimierungsproblem in der 4DVAR kennengelernt. Um dieses Problem zu lösen, gibt es verschiedene numerische Techniken. Diese wollen wir nun vorstellen. Zunächst beschäftigen wir uns mit dem Gauß-Newton-Verfahren, welches in der Theorie schnell zugänglich ist und oft angewendet wird. Dieses Verfahren liefert einen guten ersten Einblick in mögliche Herangehensweisen. Anschließend wenden wir uns der Tikhonov-Regularisierung und den aus der Bildverarbeitung bekannten L_1 -Norm- bzw. TV-Regularisierung zu. In den folgenden Abschnitten werden wir sehen, dass die Methoden geeignete Ansätze für die Lösung des Problems der Wettervorhersage sind.

3.1 Gauß-Newton-Verfahren

Das Gauß-Newton-Verfahren ist eine Vereinfachung des Newton-Verfahrens, welches man zur Bestimmung von Nullstellen anwendet (siehe auch Abschnitt 2.3). Sei $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ eine zweimal stetig differenzierbare Funktion. Ist das Ziel, wie bei der 4DVAR, die Norm dieser Funktion zu minimieren, so kann man diese Methode anwenden. Gesucht ist also \hat{x} mit

$$c(\hat{x}) = \min_{x \in \mathbb{R}^n} c(x), \quad c(x) := \|f(x)\|_2^2. \quad (3.1)$$

Die notwendige Optimalitätsbedingung $\nabla c(x) = 0$ ergibt

$$h(x) := F^T(x)f(x) = 0,$$

wobei F die Jacobi-Matrix von f ist. Wenden wir darauf das Newton-Verfahren an, so hat der Iterationsschritt mit gegebenem Startwert $x_0 \in \mathbb{R}^n$ die Form

$$\begin{aligned} H(x_k)\Delta x_k &= -h(x_k) \\ x_{k+1} &= x_k + \Delta x_k \quad k = 0, 1, \dots \end{aligned}$$

Es ergibt sich mit der Kettenregel

$$H(x) = F^T(x)F(x) + \nabla^2(f(x)) \cdot f(x). \quad (3.2)$$

Nutzt man nun statt der exakten Gleichung eine Approximation, indem man den zweiten Teil von (3.2) weglässt, also alle Terme die eine zweite Ableitung von f enthalten, ergibt dies das Gauß-Newton-Verfahren:

$$\begin{aligned} F(x_k)^T F(x_k) \Delta x_k &= -F(x_k)^T f(x_k) \\ x_{k+1} &= x_k + \Delta x_k. \end{aligned}$$

Wir müssen also in jedem Iterationsschritt ein LGS lösen. Da $F(x_k)^T F(x_k)$ positiv definit ist, kann man hierfür die Cholesky-Zerlegung verwenden.

Bevor wir zur Anwendung auf unser Problem kommen, notieren wir noch eine alternative Formulierung des Gauß-Newton-Verfahrens, indem wir die Funktion c aus (3.1) verwenden:

$$\begin{aligned} \tilde{\nabla}^2 c(x_k) \Delta x_k &= -\nabla c(x_k) \\ x_{k+1} &= x_k + \Delta x_k, \end{aligned} \tag{3.3}$$

wobei $\tilde{\nabla}^2$ die Hesse-Matrix von c ist, aber die entsprechenden Terme (siehe oben) entfallen.

Wir wenden das Verfahren nun auf unser Problem 2.1 an. Um zu sehen, dass dies ein Minimierungsproblem wie in (3.1) ist, formulieren wir unser Problem um. Dazu setzen wir die Bedingung $x_{k+1} = \mathcal{M}_k(x_k)$ in die zu minimierende Funktion ein. Wir definieren für $i > j \geq 0$:

$$\mathcal{M}_{i,j}(x_j) = \mathcal{M}_i(\mathcal{M}_{i-1}(\dots \mathcal{M}_j(x_j) \dots))$$

Weiter sei

$$f(x) := \begin{pmatrix} B^{-\frac{1}{2}}(x_0 - x_0^b) \\ R_1^{-\frac{1}{2}}(h_1(\mathcal{M}_{1,0}(x_0)) - z_1) \\ \vdots \\ R_N^{-\frac{1}{2}}(h_N(\mathcal{M}_{N,0}(x_0)) - z_N) \end{pmatrix} \tag{3.4}$$

mit $B^{-1} = B^{-\frac{1}{2}} B^{-\frac{1}{2}}$ bzw. $R_i^{-1} = R_i^{-\frac{1}{2}} R_i^{-\frac{1}{2}}$. Diese Zerlegungen von B^{-1} und R_i^{-1} sind möglich, da die Matrizen symmetrisch und positiv definit sind. Nun wird Problem 2.1 zum analogen

Problem 3.1. *Gesucht ist $\hat{x}_0 \in \mathbb{R}^n$, welches die Funktion*

$$\mathcal{J}(x_0) = \frac{1}{2} \|f(x_0)\|_2^2 = \frac{1}{2} f(x_0)^T f(x_0)$$

mit f wie in (3.4), minimiert.

Wir wollen nun die alternative Formulierung (3.3) des Gauß-Newton-Verfahrens verwenden. Nach Anhang A sehen, gilt für den Gradienten der Zielfunktion \mathcal{J}

$$\begin{aligned}\nabla \mathcal{J}(x_0) = & B^{-1}(x_0 - x_0^b) \\ & - \sum_{i=1}^N M_{i,0}^T(x_0) H_i^T(\mathcal{M}_{i,0}(x_0)) R_i^{-1} (y_i - h_i(\mathcal{M}_{i,0}(x_0)))\end{aligned}$$

und für die Hessematrix

$$\nabla^2 \mathcal{J}(x_0) = B^{-1} + \sum_{i=1}^N M_{i,0}^T(x_0) H_i^T(\mathcal{M}_{i,0}(x_0)) R_i^{-1} H_i(\mathcal{M}_{i,0}(x_0)) M_{i,0}(x_0) + C(x_0)$$

mit

$$C_{k,l}(x_0) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^m \sum_{p=1}^m (R_i^{-1})_{j,p} (z_i - h_i(\mathcal{M}_{i,0}(x_0)))_p \frac{\partial^2 (z_i - h_i(\mathcal{M}_{i,0}(x_0)))_j}{\partial x_k \partial x_l},$$

wobei H_i und $M_{i,0}$ die Jacobi-Matrizen von h_i bzw. $\mathcal{M}_{i,0}$ sind. Lassen wir nun diesen letzten Term $C(x_0)$ der zweiten Ableitungen weg, bekommen wir die für die Gauß-Newton-Verfahren nötige Form

$$\tilde{\nabla}^2 \mathcal{J}(x_0) = B^{-1} + \sum_{i=1}^N M_{i,0}^T(x_0) H_i^T(\mathcal{M}_{i,0}(x_0)) R_i^{-1} H_i(\mathcal{M}_{i,0}(x_0)) M_{i,0}(x_0).$$

Jetzt können wir von einem Startwert x_0^0 ausgehend (z.B. die Vorhersage x_0^b), die Gleichungen

$$\tilde{\nabla}^2 \mathcal{J}(x_0^k) \Delta x_0^k = -\nabla \mathcal{J}(x_0^k), \quad x_0^{k+1} = x_0^k + \Delta x_0^k$$

lösen.

Damit muss pro Iterationsschritt nur ein LGS gelöst werden, was im Grunde eine einfache Berechnung darstellt. Das Problem ist hierbei aber (neben der Unsicherheit, ob das Verfahren überhaupt konvergiert), dass die Matrix $\tilde{\nabla}^2 \mathcal{J}(x_0^k)$ eine $n \times n$ -Matrix ist. Da es wünschenswert ist, von möglichst vielen Punkten den Anfangszustand zu kennen, also n groß werden kann, braucht man sehr viele Rechenoperationen (bei Cholesky-Zerlegung $\frac{1}{6}n^3$) für einen einzigen Iterationsschritt. Daher wollen wir uns nicht weiter mit diesem Verfahren beschäftigen und kommen zum nächsten Abschnitt. Mehr zum Gauß-Newton Verfahren, wie zum Beispiel die Konvergenzeigenschaften, kann man unter anderem in [FH07] nachlesen.

3.2 Tikhonov-Regularisierung

3.2.1 Einführung in die Tikhonov-Regularisierung

Die Tikhonov-Regularisierung, benannt nach Andrei Nikolajewitsch Tichonov, ist die meistangewendete Methode der Regularisierung bei schlecht gestellten Problemen. Schlecht gestellt bedeutet hierbei, dass die Lösung entweder nicht eindeutig ist oder nicht existiert. Ist die Stabilität verletzt, ist dies kein Grund, die Tikhonov-Regularisierung anzuwenden. Wir wollen in diesem Abschnitt diese Regularisierungsmethode vorstellen und im nächsten Abschnitt auf unser 4DVAR-Problem anwenden. Mehr zur Tikhonov-Regularisierung findet man in [TA77].

Wir gehen von folgendem inversen Problem aus. Gesucht ist x , so dass

$$Ax = b$$

gilt. Nehmen wir nun an, dass dieses Problem schlecht gestellt ist, dann können wir den kleinsten-Quadrate-Ansatz

$$\arg \min_x \|Ax - b\|_2^2$$

machen. Ist A aber so gewählt, dass $A^T A$ singularär ist, gibt es keine Lösung. Idee der Regularisierungsmethoden ist es jetzt, einen Regularisierungsterm hinzuzufügen, der das Problem umgeht. Bei der Tikhonov-Regularisierung addiert man folgenden Regularisierungsterm hinzu.

$$\arg \min_x \|Ax - b\|_2^2 + \|Tx\|_2^2, \quad (3.5)$$

wobei T eine geeignete, gewählte Tikhonov-Matrix ist. Oft wählt man $T = \mu I$ und man erhält so das Minimierungsproblem

$$\arg \min_x \|Ax - b\|_2^2 + \mu^2 \|x\|_2^2. \quad (3.6)$$

Um die Lösung von (3.5) zu erhalten, betrachten wir den Gradienten

$$2(A^T A + T^T T)x - 2A^T b$$

und die Hesse-Matrix

$$2(A^T A + T^T T).$$

Damit erhalten wir das Minimum bei

$$x^* = (A^T A + T^T T)^{-1} A^T b$$

und für $T = \mu I$

$$x^* = (A^T A + \mu^2 I)^{-1} A^T b.$$

Letzte Lösung kann man auch mit der Singulärwertzerlegung von A darstellen. Sei

$$A = U\Sigma V^T$$

die Singulärwertzerlegung von A , dann gilt

$$x^* = VDU^T b$$

mit

$$D = \text{diag}\left(\frac{\sigma_1}{\sigma_1^2 + \mu^2}, \dots, \frac{\sigma_n}{\sigma_n^2 + \mu^2}\right).$$

Auf einen Beweis wollen wir in dieser Diplomarbeit verzichten und verweisen auf [TA77].

Im Gegensatz zu dieser Herleitung der Tikhonov-Regularisierung, werden wir im nächsten Abschnitt direkt auf ein Problem der Form (3.6) kommen, indem wir das 4DVAR-Problem umstellen. Daher können wir das 4DVAR-Problem auch als schlecht gestelltes Problem beschreiben, dass mit Regularisierungsmethoden gelöst werden kann.

3.2.2 Anwendung der Tikhonov-Regularisierung

Für die Anwendung der Tikhonov-Regularisierung vereinfachen wir unser Ausgangsproblem (2.24)

$$\begin{aligned} J(x_0) &= \frac{1}{2}(x_0 - x_0^b)^T B^{-1}(x_0 - x_0^b) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N (z_k - h_k(x_k))^T R_k^{-1}(z_k - h_k(x_k)) \end{aligned}$$

mit der Bedingung

$$x_{k+1} = \mathcal{M}_k(x_k) \quad \text{für } k = 0, \dots, N-1$$

etwas, um dies relativ einfach zu halten. Dazu nehmen wir an, dass die Funktionen h_i linear sind und dass die Matrizen R_i und h_i in der Zeit sich nicht ändern. Daher schreiben wir nun $R_i = R$ und $h_i(x) = Hx$. Weiter ändern wir die zu minimierende Kostenfunktion. Dazu definieren wir

$$\hat{z} := \begin{pmatrix} z_1 \\ \vdots \\ z_N \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathcal{H}}(x_0) := \begin{pmatrix} H\mathcal{M}_{1,0}(x_0) \\ \vdots \\ H\mathcal{M}_{N,0}(x_0) \end{pmatrix}, \quad \hat{R} := \begin{pmatrix} R & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & R \end{pmatrix}$$

mit

$$\mathcal{M}_{i,0}(x_0) := \mathcal{M}_i(\mathcal{M}_{i-1}(\dots(\mathcal{M}_1(x_0))\dots)).$$

Damit gilt

$$\mathcal{J}(x_0) = \frac{1}{2}(x_0 - x_0^b)^T B^{-1}(x_0 - x_0^b) + \frac{1}{2}(\hat{z} - \hat{\mathcal{H}}(x_0))^T \hat{R}^{-1}(\hat{z} - \hat{\mathcal{H}}(x_0)).$$

Machen wir nun eine Variablen-Transformation $y = \sigma_B B^{-\frac{1}{2}}(x_0 - x_0^b)$ mit $\sigma_B > 0$, so ergibt sich

$$\mathcal{J}(y) = \frac{1}{2\sigma_B^2} y^T y + \frac{1}{2}(\hat{z} - \hat{\mathcal{H}}(\sigma_B^{-1} B^{\frac{1}{2}} y + x_0^b))^T \hat{R}^{-1}(\hat{z} - \hat{\mathcal{H}}(\sigma_B^{-1} B^{\frac{1}{2}} y + x_0^b)).$$

Linearisieren wir die Funktion $\hat{\mathcal{H}}$ um den Punkt x_0^b und bezeichnen wir mit \hat{H} die Jacobi-Matrix von $\hat{\mathcal{H}}$ ausgewertet am Punkt x_0^b , gilt

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(y) &\approx \frac{1}{2\sigma_B^2} y^T y + \frac{1}{2}(\hat{z} - \hat{\mathcal{H}}(x_0^b) - \hat{H}\sigma_B^{-1} B^{\frac{1}{2}} y)^T \hat{R}^{-1}(\hat{z} - \hat{\mathcal{H}}(x_0^b) - \hat{H}\sigma_B^{-1} B^{\frac{1}{2}} y) \\ &= \frac{1}{2\sigma_B^2} \|y\|_2^2 + \frac{1}{2} \|\hat{R}^{-\frac{1}{2}}(\hat{z} - \hat{\mathcal{H}}(x_0^b)) - \hat{R}^{-\frac{1}{2}} \hat{H} \sigma_B^{-1} B^{\frac{1}{2}} y\|_2^2. \end{aligned}$$

Definieren wir nun die Matrizen $C_B := \sigma_B^{-2} B$, $C_R := \sigma_R^{-2} \hat{R}$ mit $\sigma_R > 0$ und multiplizieren die rechte Seite mit $2\sigma_R^2$, erhalten wir die neue zu minimierende Funktion

$$\hat{\mathcal{J}}(y) = \frac{\sigma_R^2}{\sigma_B^2} \|y\|_2^2 + \|C_R^{-\frac{1}{2}}(\hat{y} - \hat{H}(x_0^b)) - C_R^{-\frac{1}{2}} \hat{H} C_B^{\frac{1}{2}} y\|_2^2. \quad (3.7)$$

Finden wir das Minimum \hat{y} dieser Funktion, bekommen wir durch Rücksubstitution $\hat{x}_0 = C_B^{\frac{1}{2}} \hat{y} + x_0^b$ die Minimalstelle der ursprünglichen Funktion. Setzen wir noch

$$A := C_R^{-\frac{1}{2}} \hat{H} C_B^{\frac{1}{2}}, \quad b := C_R^{-\frac{1}{2}}(\hat{z} - \hat{\mathcal{H}}(x_0^b)), \quad \mu^2 := \frac{\sigma_R^2}{\sigma_B^2},$$

so können wir die Funktion (3.7) als

$$\hat{J}(y) = \|b - Ay\|_2^2 + \mu^2 \|y\|_2^2 \quad (3.8)$$

schreiben, was genau die gleiche Gestalt hat, wie ein Minimierungsproblem mit Tikhonov-Regularisierung (3.6).

Wir haben in diesem Kapitel nun die Tikhonov-Regularisierung kennengelernt und das 4DVAR-Problem darauf transformiert. Wir werden später in einem Beispiel sehen, wie die Lösung dieser Regularisierung sich verhält. Doch zuvor wollen wir in den nächsten beiden Kapiteln noch zwei weitere Regularisierungsmethoden vorstellen.

3.3 L1-Regularisierung

3.3.1 Lösung der L1-Regularisierung

In diesem und im nächsten Abschnitt werden wir das Funktional bzw. im diskreten Fall die Funktion \hat{J} (3.8) modifizieren. Es ist aus der Bildrekonstruktionstheorie bekannt, dass man unter bestimmten Bedingungen ein besseres Ergebnis bekommt, wenn man den zweiten Term von (3.8) (auch Regularisierungsterm genannt) verändert. In diesem Abschnitt werden wir die L_2 -Norm durch die L_1 -Norm ersetzen. Der Vorteil dieser Variante liegt darin, dass ein starker Anstieg in der gesuchten Funktion besser approximiert werden kann (vgl. [FNB10],[FNNB06]).

Diese Methode wird in der Bildrekonstruktion oft angewendet. Ein scharfes Bild hat bei jedem Farbübergang genau einen solchen starken An- oder Abstieg, wenn der Kontrast sehr hoch ist. Ist dieses Bild aber verschwommen, kann man es mit dieser Methode wieder in einer schärferen Auflösung darstellen.

Bei Wetterfronten entsteht genau das gleiche Problem. Ein Anstieg der Windgeschwindigkeiten kann in sehr kurzer Zeit extrem hoch sein. Genau für diese Erscheinungen werden wir später die L_1 -Regularisierung anwenden.

Unsere zu minimierende Zielfunktion ist nun

$$\min_{y \in \mathbb{R}^n} J_1(y) = \|b - Ay\|_2^2 + \mu^2 \|y\|_1. \quad (3.9)$$

Um die Minimalstelle dieser Funktion zu finden, können wir nicht die erste und zweite Optimalitätsbedingung aufstellen, denn die L_1 -Norm ist nicht differenzierbar. Daher werden wir die Primal-Dual Formulierung benutzen und einen Algorithmus beschreiben, der gegen die Lösung konvergiert.

Analog nach [ZBO09] ändern wir (3.9) in ein Optimierungsproblem mit Nebenbedingung

$$\min_{y,x \in \mathbb{R}^n} (J(y) + H(x)) \quad s.t. \quad x = y \quad (3.10)$$

mit

$$J(y) = \|b - Ay\|_2^2, \quad H(x) = \mu^2 \|x\|_1. \quad (3.11)$$

Das zugehörige Dual-Problem ist nach Fenchels Dualitäts-Theorem (Anhang B)

$$\min_z J^*(z) + H^*(-z) \quad (3.12)$$

mit den Legendre-Fenchel-Transformierten

$$J^*(z) = \sup_y \langle z, y \rangle - J(y),$$

$$H^*(-z) = \sup_x \langle -z, x \rangle - H(x).$$

Die Lagrangefunktion dieses Minimierungsproblems ist

$$L(x, y; z) = J(y) + H(x) - \langle z, y - x \rangle. \quad (3.13)$$

Um ein Minimum des Primal-Problems (3.10) und des Dual-Problems (3.12) zu finden, müssen wir den Sattelpunkt $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$ der Lagrangefunktion bestimmen. Für diesen Punkt muss also

$$L(x, y; \bar{z}) \leq L(\bar{x}, \bar{y}; \bar{z}) \leq L(\bar{x}, \bar{y}; z) \quad \forall (x, y) \in \mathbb{R}^{2n}, z \in \mathbb{R}^n$$

gelten.

Wir wollen zu unserer Lagrangefunktion noch einen quadratischen Strafterm addieren, und bekommen so die erweiterte Lagrangefunktion ([Hes69][Pow72][Roc56]). Für ein $\alpha > 0$ definieren wir

$$L^\alpha(x, y; z) = J(y) + H(x) - \langle z, y - x \rangle + \frac{\alpha}{2} \|x - y\|^2.$$

Man kann zeigen, dass jeder Sattelpunkt von L auch Sattelpunkt von L^α ist und umgekehrt.

Für die Berechnung des Sattelpunktes wollen wir den allgemeinen Algorithmus von Uzawa [AHH58] benutzen. Dieser Algorithmus ist folgendermaßen aufgebaut:

$$\begin{aligned} (x^{k+1}, y^{k+1}) &= \arg \min_{(x,y)} L^\alpha(x, y; z^k) \\ z^{k+1} &= z^k + \gamma \partial_z L^\alpha(x^{k+1}, y^{k+1}; z^k), \end{aligned}$$

wobei γ ein positiver Parameter ist und $\partial_z L^\alpha(x^{k+1}, y^{k+1}; z^k)$ ein **Subgradient** der Lagrangefunktion bzgl. z ist. Das bedeutet, dass es ein Element der Menge

$$\{g \in \mathbb{R}^n : L^\alpha(x^{k+1}, y^{k+1}; z) - L^\alpha(x^{k+1}, y^{k+1}; z^k) \geq g^T(z - z^k) \quad \forall z \in \mathbb{R}^n\}$$

ist, welche auch **Subdifferential** genannt wird. In unserem Fall ist

$$(x^{k+1} - y^{k+1}) \in \partial_z L^\alpha(x^{k+1}, y^{k+1}; z^k),$$

denn es gilt

$$L^\alpha(x^{k+1}, y^{k+1}; z) - L^\alpha(x^{k+1}, y^{k+1}; z^k) = \langle z^k - z, y^{k+1} - x^{k+1} \rangle.$$

Setzen wir $\gamma = \alpha$, so hat unser Algorithmus nun die Form

$$\begin{aligned} (x^{k+1}, y^{k+1}) &= \arg \min_{(x,y)} (J(y) + H(x) - \langle z^k, y - x \rangle + \frac{\alpha}{2} \|x - y\|^2), \\ z^{k+1} &= z^k + \alpha(x^{k+1} - y^{k+1}). \end{aligned}$$

Die Lösung dieses Minimierungsproblems kann schwierig sein, da man gleichzeitig über x und y minimieren muss. Daher teilen wir das Problem in zwei Teile. (Nähere Details dazu in [Gab83]). Dies ergibt dann folgendes

$$x^{k+1} = \arg \min_x H(x) + \langle z^k, x \rangle + \frac{\alpha}{2} \|x - y^k\|^2, \quad (3.14)$$

$$y^{k+1} = \arg \min_y J(y) - \langle z^k, y \rangle + \frac{\alpha}{2} \|x^k + 1 - y\|^2, \quad (3.15)$$

$$z^{k+1} = z^k + \alpha(x^{k+1} - y^{k+1}). \quad (3.16)$$

Um den Algorithmus aus [ZBO09] zu erhalten, addieren wir zu (3.14) und (3.15) jeweils eine sogenannte Bregman-Distanz.

Definition 3.1. Sei $\Phi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ eine konvexe Funktion, die an mindestens einem Punkt $x \in \mathbb{R}^n$ nicht den Wert ∞ annimmt. Dann ist

$$D_{\Phi}^p(u, v) = \Phi(u) - \Phi(v) - \langle p, u - v \rangle$$

die **Bregman-Distanz** zu einem Subgradienten $p \in \partial\Phi(v)$.

Weiter definieren wir für eine positiv definite Matrix Q die Norm

$$\|x\|_Q := \sqrt{\langle Qx, x \rangle}.$$

Setzen wir $\Phi(x) = \|x\|_Q^2$, so gilt

$$D_{\Phi}^{p^k}(x, x^k) = \|x - x^k\|_Q^2.$$

Addieren wir also diesen Term zu (3.14) und (3.15), so ergibt sich der folgende Algorithmus:

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= \arg \min_x (H(x) + \langle z, x \rangle + \frac{\alpha}{2} \|x - y^k\|^2 + \frac{1}{2} \|x - x^k\|_{Q_1}^2), \\ y^{k+1} &= \arg \min_y (J(y) - \langle z^k, y \rangle + \frac{\alpha}{2} \|x^{k+1} - y\|^2 + \frac{1}{2} \|y - y^k\|_{Q_2}^2), \\ Cz^{k+1} &= Cz^k + (x^{k+1} - y^{k+1}), \end{aligned} \quad (3.17)$$

wobei Q_1, Q_2 und C positiv definite Matrizen sind.

Der nächste Satz sagt uns, dass dieser Algorithmus auch die gewünschten Resultate liefert, also gegen die exakte Lösung konvergiert.

Satz 3.1. Sei (x^k, y^k, z^k) die Folge, die durch den Algorithmus (3.17) mit beliebigen Startwerten x^0, y^0, z^0 berechnet wird. Seien C und Q_1 positiv definit und Q_2 positiv semidefinit. Weiter gelte für α und den kleinsten Eigenwert von C , den wir mit λ_m^C bezeichnen, die Beziehung $0 < \frac{1}{\lambda_m^C} \leq \alpha$. Dann gilt

- (i) $\lim_{k \rightarrow \infty} \|x^k - y^k\| = 0$.
- (ii) $\lim_{k \rightarrow \infty} J(y^k) = J(\bar{y})$.
- (iii) $\lim_{k \rightarrow \infty} H(x^k) = H(\bar{x})$.
- (iv) Die Folge (x^k, y^k, z^k) ist beschränkt und alle Grenzwerte sind Sattelpunkte der Funktion $L(x, y; z)$.

Beweis. Wir definieren zuerst die Abstände

$$x_e^k = x^k - \bar{x}, \quad y_e^k = y^k - \bar{y}, \quad z_e^k = z^k - \bar{z}.$$

Für die Sattelpunkte von (3.13) gilt:

$$\bar{t} + \bar{z} = 0 \quad (\text{Ableitung nach } x), \quad (3.18a)$$

$$\bar{s} - \bar{z} = 0 \quad (\text{Ableitung nach } y), \quad (3.18b)$$

$$\bar{y} - \bar{x} = 0 \quad (\text{Ableitung nach } z), \quad (3.18c)$$

mit $\bar{t} \in \partial H(\bar{x})$, $\bar{s} \in \partial J(\bar{y})$. Weiter sei

$$\begin{aligned} t_e^{k+1} &= -z^k - \alpha(x^{k+1} - y^k) - Q_1(x^{k+1} - x^k), \\ s_e^{k+1} &= z^k + \alpha(x^{k+1} - y^{k+1}) - Q_2(y^{k+1} - y^k). \end{aligned} \quad (3.19)$$

Dann sieht man mit (3.17), dass $t_e^{k+1} \in \partial H(x^{k+1})$ und $s_e^{k+1} \in \partial J(y^{k+1})$ ist. Betrachten wir die Fehler der Subgradienten $t_e^{k+1} = t^{k+1} - \bar{t}$, $s_e^{k+1} = s^{k+1} - \bar{s}$, nutzen die Bedingungen (3.18) aus und machen eine Nullergänzung mit $Q_1\bar{x}$ bzw. $Q_2\bar{y}$ zu den Gleichungen (3.19), so erhalten wir

$$t_e^{k+1} + Q_1 x_e^{k+1} = Q_1 x_e^k - \alpha(x_e^{k+1} - y_e^k) - z_e^k, \quad (3.20a)$$

$$s_e^{k+1} + Q_2 y_e^{k+1} = Q_2 y_e^k - \alpha(y_e^{k+1} - x_e^{k+1}) + z_e^k. \quad (3.20b)$$

Weiter gilt nach (3.17)

$$C z_e^{k+1} = C z_e^k + (B x_e^{k+1} - y_e^{k+1}). \quad (3.21)$$

Wir nehmen jetzt auf jeder Seite von (3.20a) das Skalarprodukt mit x_e^{k+1} . Dies ergibt

$$\langle t_e^{k+1}, x_e^{k+1} \rangle + \|x_e^{k+1}\|_{Q_1}^2 - \langle Q_1 x_e^k, x_e^{k+1} \rangle = \alpha \langle y_e^k - x_e^{k+1}, x_e^{k+1} \rangle - \langle z_e^k, x_e^{k+1} \rangle.$$

Weiter ist auf Grund der Symmetrie von Q_1

$$\begin{aligned} &\|x_e^{k+1}\|_{Q_1}^2 - \langle Q_1 x_e^k, x_e^{k+1} \rangle \\ &= \langle Q_1 x^{k+1}, x^{k+1} \rangle - 2 \langle Q_1 x^{k+1}, \bar{x} \rangle + \langle Q_1 \bar{x}, \bar{x} \rangle \\ &\quad - \langle Q_1 x^k, x^{k+1} \rangle + \langle Q_1 x^k, \bar{x} \rangle + \langle Q_1 \bar{x}, x^{k+1} \rangle - \langle Q_1 \bar{x}, \bar{x} \rangle. \end{aligned}$$

Durch Nullergänzung mit dem Term $\frac{1}{2} \langle Q_1 x_k, x_k \rangle$ erhalten wir

$$\begin{aligned}
& \|x_e^{k+1}\|_{Q_1}^2 - \langle Q_1 x_e^k, x_e^{k+1} \rangle \\
&= \frac{1}{2} (\langle Q_1 x^{k+1}, x^{k+1} \rangle - 2 \langle Q_1 x^{k+1}, \bar{x} \rangle + \langle Q_1 \bar{x}, \bar{x} \rangle) \\
&\quad + \frac{1}{2} (\langle Q_1 x^{k+1}, x^{k+1} \rangle - 2 \langle Q_1 x^{k+1}, x^k \rangle + \langle Q_1 x_k, x_k \rangle) \\
&\quad - \frac{1}{2} (\langle Q_1 x_k, x_k \rangle - 2 \langle Q_1 x^k, \bar{x} \rangle + \langle Q_1 \bar{x}, \bar{x} \rangle) \\
&= \frac{1}{2} (\|x_e^{k+1}\|_{Q_1}^2 + \|x^{k+1} - x^k\|_{Q_1}^2 - \|x_e^k\|_{Q_1}^2).
\end{aligned}$$

Damit gilt

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} (\|x_e^{k+1}\|_{Q_1}^2 + \|x^{k+1} - x^k\|_{Q_1}^2 - \|x_e^k\|_{Q_1}^2) + \langle t_e^{k+1}, x_e^{k+1} \rangle \\
&= \alpha \langle y_e^k - x_e^{k+1}, x_e^{k+1} \rangle - \langle z_e^k, x_e^{k+1} \rangle.
\end{aligned}$$

Und analog für Gleichung (3.20b) und (3.21) erhalten wir mit dem Skalarprodukt mit y_e^{k+1} bzw. z_e^{k+1} und unter Ausnutzung der Symmetrieeigenschaften der Matrizen Q_2 bzw. C

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} (\|y_e^{k+1}\|_{Q_2}^2 + \|y^{k+1} - y^k\|_{Q_2}^2 - \|y_e^k\|_{Q_2}^2) + \langle s_e^{k+1}, y_e^{k+1} \rangle \\
&= \alpha \langle x_e^{k+1} - y_e^{k+1}, y_e^{k+1} \rangle + \langle z_e^k, y_e^{k+1} \rangle,
\end{aligned}$$

bzw.

$$\frac{1}{2} (\|z_e^{k+1}\|_C^2 - \|z_e^k\|_C^2 - \|x_e^{k+1} - y_e^{k+1}\|_{C^{-1}}^2) = \langle x_e^{k+1} - y_e^{k+1}, z_e^k \rangle.$$

Addieren wir diese drei Gleichungen erhalten wir

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} (\|x_e^{k+1}\|_{Q_1}^2 + \|x^{k+1} - x^k\|_{Q_1}^2 - \|x_e^k\|_{Q_1}^2) + \langle t_e^{k+1}, x_e^{k+1} \rangle \\
&+ \frac{1}{2} (\|y_e^{k+1}\|_{Q_2}^2 + \|y^{k+1} - y^k\|_{Q_2}^2 - \|y_e^k\|_{Q_2}^2) + \langle s_e^{k+1}, y_e^{k+1} \rangle \\
&+ \frac{1}{2} (\|z_e^{k+1}\|_C^2 - \|z_e^k\|_C^2) \\
&= \alpha \langle y_e^k - x_e^{k+1}, x_e^{k+1} \rangle + \alpha \langle x_e^{k+1} - y_e^{k+1}, y_e^{k+1} \rangle + \frac{1}{2} \|x_e^{k+1} - y_e^{k+1}\|_{C^{-1}}^2.
\end{aligned} \tag{3.22}$$

Mit Nullergänzung des Terms $\frac{\alpha}{2} \|y_e^k\|^2$ ergibt sich durch Umstellen, dass die rechte Seite von (3.22) gleich

$$\left(\frac{1}{2} \|x_e^{k+1} - y_e^{k+1}\|_{C^{-1}}^2 - \frac{\alpha}{2} \|x_e^{k+1} - y_e^{k+1}\|^2 \right) - \frac{\alpha}{2} \|x_e^{k+1} - y_e^{k+1}\|^2 + \frac{\alpha}{2} (\|y_e^k\|^2 - \|y_e^{k+1}\|^2)$$

ist.

Wir wollen aus dieser Gleichung eine Ungleichung folgern, aus der wir Beschränktheit

der Folge ableiten können. Dazu betrachten wir zuerst die Terme $\langle t_e^{k+1}, x_e^{k+1} \rangle$ und $\langle s_e^{k+1}, y_e^{k+1} \rangle$. Es gilt auf Grund der Subgradienteigenschaft:

$$\begin{aligned} \langle t_e^{k+1}, x_e^{k+1} \rangle &= \langle t_e^{k+1}, x^{k+1} - \bar{x} \rangle - \langle \bar{t}, x^{k+1} - \bar{x} \rangle \\ &\geq H(x^{k+1}) - H(\bar{x}) + H(\bar{x}) - H(x^{k+1}) = 0. \end{aligned}$$

Analog erhält man $\langle s_e^{k+1}, y_e^{k+1} \rangle \geq 0$.

Weiter betrachten wir den Term

$$\left(\frac{1}{2} \|x_e^{k+1} - y_e^{k+1}\|_{C^{-1}}^2 - \frac{\alpha}{2} \|x_e^{k+1} - y_e^{k+1}\|^2 \right). \quad (3.23)$$

Da C symmetrisch positiv definit ist, können wir $x_e^{k+1} - y_e^{k+1}$ als Linearkombination von Eigenvektoren von C^{-1} betrachten, die eine Orthonormalbasis des \mathbb{R}^n bilden. Sei also $(\xi_j)_j$ eine Orthonormalbasis aus EV, dann gibt es Koeffizienten β_j für die gilt

$$x_e^{k+1} - y_e^{k+1} = \sum_{j=1}^n \beta_j \xi_j \quad \text{mit} \quad \xi_i^T \xi_j = \delta_{ij}.$$

Dann gilt

$$\begin{aligned} \|x_e^{k+1} - y_e^{k+1}\|_{C^{-1}}^2 &= \sum_{i=1}^n \beta_i \xi_i^T C^{-1} \sum_{j=1}^n \xi_j = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \beta_i \beta_j \frac{1}{\lambda_j^C} \xi_i^T \xi_j \\ &= \sum_{j=1}^n \frac{1}{\lambda_j^C} \beta_j^2 \leq \frac{1}{\lambda_m^C} \sum_{j=1}^n \beta_j^2 \\ &\leq \sum_{i=1}^n \beta_i \xi_i^T \sum_{j=1}^n \beta_j \xi_j = \alpha \|x_e^{k+1} - y_e^{k+1}\|^2, \end{aligned}$$

wobei λ_j^C die Eigenwerte von C sind. Damit ist also (3.23) kleiner gleich Null. Weiter gilt für die normierten Differenzen auf Grund der positiven Definitheit von Q_1 bzw. der semi-positiven Definitheit von Q_2

$$\|x^{k+1} - x^k\|_{Q_1}^2 \geq 0, \quad \|y^{k+1} - y^k\|_{Q_2}^2 \geq 0, \quad \|x_e^{k+1} - y_e^k\| \geq 0.$$

Wir können somit aus Gleichung (3.22) folgende Ungleichung herleiten:

$$\begin{aligned} \|x_e^{k+1}\|_{Q_1}^2 + \|y_e^{k+1}\|_{Q_2}^2 + \alpha \|y_e^{k+1}\|^2 + \|z_e^{k+1}\|_C^2 \\ \leq \|x_e^k\|_{Q_1}^2 + \|y_e^k\|_{Q_2}^2 + \alpha \|y_e^k\|^2 + \|z_e^k\|_C^2. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Insgesamt heißt das also, dass die Summe der normierten Fehler pro Schritt nicht größer wird und die Folge (x_k, y_k, z_k) damit beschränkt ist.

Um nun die Behauptungen des Satzes zu zeigen, summieren wir in Gleichung (3.22) über alle k und erhalten:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{\infty} (\|x^{k+1} - x^k\|_{Q_1}^2 + \|y^{k+1} - y^k\|_{Q_2}^2) + \sum_{k=0}^{\infty} \langle t_e^{k+1}, x_e^{k+1} \rangle \\
& + \sum_{k=0}^{\infty} \langle s_e^{k+1}, y_e^{k+1} \rangle + \frac{\alpha}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \|x_e^{k+1} - y_e^k\|^2 \\
& = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{2} (\|x_e^k\|_{Q_1}^2 + \|y_e^k\|_{Q_2}^2 + \alpha \|y_e^k\|^2 + \|z_e^k\|_C^2 \\
& \quad - \|x_e^{k+1}\|_{Q_1}^2 + \|y_e^{k+1}\|_{Q_2}^2) + \alpha \|y_e^{k+1}\|^2 + \|z_e^{k+1}\|_C^2 \\
& + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{2} (\|x_e^{k+1} - y_e^{k+1}\|_{C^{-1}}^2 - \alpha \|x_e^{k+1} - y_e^{k+1}\|^2) \\
& \leq \frac{1}{2} \|x_e^0\|_{Q_1}^2 + \|y_e^0\|_{Q_2}^2 + \alpha \|y_e^0\|^2 + \|z_e^0\|_C^2 < \infty.
\end{aligned}$$

Die vorletzte Ungleichung resultiert dabei aus den Ungleichungen (3.23) und (3.24). Da alle Terme auf der linken Seite positiv sind, ist jede einzelne Summe für sich gesehen endlich. Damit können wir nun die Behauptungen beweisen. Es gilt wegen der Bedingung (3.18c)

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|x_e^{k+1} - y_e^{k+1}\| = \lim_{k \rightarrow \infty} \|x^{k+1} - \bar{x} - y^{k+1} + \bar{y}\| = \lim_{k \rightarrow \infty} \|x^{k+1} - y^{k+1}\|.$$

Weiter ergibt die Dreiecksungleichung

$$\|x^{k+1} - y^{k+1}\| = \|x^{k+1} - y^k + y^k - y^{k+1}\| \leq \|x^{k+1} - y^k\| + \|y^k - y^{k+1}\|.$$

Wegen $\lim_{k \rightarrow \infty} \|x^{k+1} - y^k\| = 0$ und $\lim_{k \rightarrow \infty} \|y^k - y^{k+1}\| = 0$ gilt somit auch $\lim_{k \rightarrow \infty} \|x^{k+1} - y^{k+1}\| = 0$ und die erste Behauptung ist gezeigt.

Für die zweite und dritte Behauptung benutzen wir die Eigenschaften der Subgradienten. Es gilt

$$\langle t^k, x^k \rangle \geq H(x^k) - H(\bar{x}) \geq \langle \bar{t}, x^k \rangle.$$

Nun wissen wir aber $\langle t_e^k, x_e^k \rangle \rightarrow 0$ und damit folgt schon

$$\lim_{k \rightarrow \infty} H(x^k) = H(\bar{x}).$$

Auf analoge Weise erhalten wir die dritte Behauptung.

Die letzte Behauptung können wir mit dem Argument beweisen, dass die Folge (x^k, y^k, z^k) beschränkt ist. Dann gibt es eine konvergente Teilfolge $(x^{k_l}, y^{k_l}, z^{k_l})$ und wir können

$$s^\infty := \lim_{l \rightarrow \infty} s^{k_l}, \quad t^\infty := \lim_{l \rightarrow \infty} t^{k_l}, \quad (x^\infty, x^\infty, z^\infty) := \lim_{l \rightarrow \infty} (x^{k_l}, y^{k_l}, z^{k_l})$$

definieren und es gilt $s^\infty \in \partial J(y^\infty)$, $t^\infty \in \partial H(x^\infty)$. Betrachten wir den Limes von den Gleichungen (3.19), ergibt sich für unsere konvergente Teilfolge:

$$\begin{aligned} t^\infty + z^\infty &= 0, \\ S^\infty - z^\infty &= 0, \\ x^\infty - y^\infty &= 0. \end{aligned}$$

So ist $(x^\infty, y^\infty, z^\infty)$ ein Sattelpunkt der Lagrangefunktion $L_1(x, y; z)$ und (x^∞, y^∞) ist eine Lösung unseres Problems. \square

3.3.2 Numerische Realisierung

Nachdem wir gesehen haben, dass der Algorithmus (3.17) konvergiert, müssen wir ihn noch so umformulieren, dass wir die Lösung mit einem Computerprogramm berechnen können. Setzen wir (3.11) in unseren Algorithmus ein, erhalten wir folgende zu lösende Gleichungen:

$$x^{k+1} = \arg \min_x \left(\frac{1}{2} \|Ax - b\|^2 + \langle z^k, x \rangle + \frac{\alpha}{2} \|x - y^k\|^2 + \frac{1}{2} \|x - x^k\|_{Q_1}^2 \right), \quad (3.25a)$$

$$y^{k+1} = \arg \min_y \left(\mu^2 \|y\|_1 - \langle z^k, y \rangle + \frac{\alpha}{2} \|x^{k+1} - y\|^2 + \frac{1}{2} \|y - y^k\|_{Q_2}^2 \right), \quad (3.25b)$$

$$Cz^{k+1} = Cz^k + (x^{k+1} - y^{k+1}). \quad (3.25c)$$

Für Gleichung (3.25a) können wir einfach die notwendige und hinreichende Bedingung für eine Minimalstelle aufstellen. Der Gradient der rechten Seite von (3.25a) ist:

$$(A^T A + \alpha I + Q_1)x - A^t b + z^k - \alpha y^k - Q_1 x^k.$$

Setzen wir den den Gradienten gleich Null, erhalten wir somit das Gleichungssystem

$$(A^T A + \alpha I + Q_1)x^{k+1} = A^t b + \alpha y^k + Q_1 x^k - z^k. \quad (3.26)$$

Da Q_1 positiv definit und $\alpha > 0$ ist, ist die Hessematrix $(A^T A + \alpha I + Q_1)$ auch positiv definit und daher ist die Lösung des Gleichungssystems (3.26) auch wirklich die gesuchte Minimalstelle.

Um das Argument des Minimums von (3.25b) zu erhalten, wählen wir $Q_2 = 0$. Dies können wir machen, da Satz 3.1 für Q_2 positiv-Semidefinitheit verlangt. Somit erhalten wir die Gleichung

$$y^{k+1} = \arg \min_y \left(\mu^2 \|y\|_1 - \langle z^k, y \rangle + \frac{\alpha}{2} \|x^{k+1} - y\|^2 \right).$$

Wir können die zu minimierende Funktion auf der rechten Seite durch α teilen und den von y unabhängigen Term $\frac{1}{2\alpha^2} \langle z^k, z^k \rangle - \frac{1}{\alpha} \langle z^k, x^{k+1} \rangle$ addieren, ohne dass sich

das Argument, was die Funktion minimiert, verändert. Dies ergibt dann

$$y^{k+1} = \arg \min_y \left(\frac{\mu^2}{\alpha} \|y\|_1 + \frac{1}{2} \|z - (x^{k+1} + \frac{1}{\alpha} y^k)\|^2 \right).$$

Die Lösung dieses Problems erhält man durch einen „shrinkage“ Operator [HYZ07]. Es gilt also für alle $j = 1, \dots, n$

$$\begin{aligned} y_j^{k+1} &= \text{shrinkage}(x_j^{k+1} + \frac{1}{\alpha} y_j^k, \frac{\mu^2}{\alpha}) \\ &= \text{sign}(x_j^{k+1} + \frac{1}{\alpha} y_j^k) \max\{|x_j^{k+1} + \frac{1}{\alpha} y_j^k| - \frac{\mu^2}{\alpha}, 0\}. \end{aligned}$$

Nun bleibt uns noch die dritte Gleichung (3.25c), in der wir noch die Matrix C geschickt wählen können. Die einfachste Wahl für die Matrix C ist $C = \frac{1}{\gamma} I$ mit $\gamma > 0$. Durch diese Wahl ist die Matrix wie in Satz 3.1 gefordert symmetrisch positiv definit und es gilt

$$z^{k+1} = z^k + \gamma(x^{k+1} - y^{k+1}).$$

Als letzten freien Parameter, haben wir noch die Matrix Q_1 . Wir definieren dafür $Q_1 = \frac{1}{\delta} I - A^T A - \alpha I$, mit $0 < \delta < \frac{1}{\|A^T A - \alpha I\|}$. Nun ist die Matrix Q_1 wie gefordert positiv definit, und es gilt

$$\frac{1}{\delta} x^{k+1} = A^T b + \alpha y^k + \frac{1}{\delta} x^k - A^T A x^k - \alpha x^k - z^k.$$

Daraus folgt die explizite Gleichung für x^{k+1}

$$x^{k+1} = x^k - \delta A^T (A x^k - b) + \delta(\alpha(y^k - x^k) - z^k).$$

Somit brauchen wir kein lineares Gleichungssystem mehr zu lösen.

Wir erhalten insgesamt folgenden Algorithmus.

Algorithmus 3.1 L_1 -REGULARISIERUNG($G, f, \mu, \delta, \gamma, \text{maxiter}, \text{maxtol}$)

SETZE $x^0 = 0, y^0 = 0, z^0 = 0, k = 0, \text{tol} = \text{maxtol} + 1$

while $k \leq \text{maxiter} \wedge \|r\| \geq \text{maxtol}$ **do**

$$x^{k+1} \leftarrow x^k - \delta G^T (G x^k - b) + \delta(\alpha(y^k - x^k) - z^k)$$

$$y^{k+1} \leftarrow \text{shrinkage}(x^{k+1} + \frac{1}{\alpha} y^k, \frac{\mu^2}{\alpha})$$

$$z^{k+1} \leftarrow z^k + \gamma(x^{k+1} - y^{k+1})$$

$$r \leftarrow y^k - x^k$$

$$k \leftarrow k + 1$$

end while

Somit haben wir die L1-Regularisierung eingeführt und einen konvergenten Algorithmus für die Lösung dieser Regularisierung hergeleitet. Wir werden später an einem Beispiel aus der Wettervorhersage die Eigenschaft der Lösung analysieren. Zuvor betrachten wir noch eine weitere Regularisierungsmethode.

3.4 TV-Regularisierung

3.4.1 Lösung der TV-Regularisierung

Kommen wir nun zur letzten Regularisierungsmethode, der aus der Bildrekonstruktion stammenden TV-Regularisierung. Mit Hilfe dieser Methode kann man die Schärfe verschwommener (verrauschter) Bilder wiederherstellen.

Diese Methode kann man nun auch auf die Wettervorhersage anwenden, wenn man z.B. Wetterfronten beschreiben will. Dabei kann die Windgeschwindigkeit oder die Temperatur so rasant steigen bzw. fallen, dass bei einer zeitlichen oder örtlichen Darstellung dieser Wetterphänomene so genannte scharfe Kanten entstehen können. Diese haben eine große Ähnlichkeit mit den starken Kontrastübergängen bei scharfen Bildern.

Die Grundlage der Herleitung der Lösung und der numerischen Realisierung entnehmen wir aus [Mül08].

Im Gegensatz zu den anderen beiden Regularisierungsverfahren ist der Regularisierungsterm nicht mehr die gesuchte Funktion an sich, sondern der Gradient dieser Funktion. Explizit sieht also unser Optimierungsproblem nun folgendermaßen aus:

$$\min_z \|Gz - f\|_2^2 + \mu^2 \|\nabla z\|_1.$$

Dabei ist z ein Element aus dem Funktionenraum der beschränkten totalen Variationen:

$$z \in BV(\Omega) := \{z \in L^1(\Omega), \|\nabla z\|_1 < \infty\}.$$

Um die Lösung des Problems zu finden, benutzen wir die Primal-Dual-Formulierung (vgl. [Mül08])

$$\inf_{z \in BV(\Omega)} \sup_{\|p\|_\infty \leq 1} L(z, p) := \inf_{z \in BV(\Omega)} \sup_{\|p\|_\infty \leq 1} \|Gz - f\|_2^2 + \mu^2 \|z \nabla \cdot p\|_1.$$

Hierfür werden wir die Bedingung $\|p\|_\infty \leq 1$ durch einen Strafterm ersetzen, so dass wir ein Optimierungsproblem ohne Nebenbedingung erhalten.

Dazu nehmen wir ein $\varepsilon > 0$ und ein Funktional F , das für alle p mit $\|p\|_\infty \leq 1$ verschwindet und außerhalb des Einheitsballs stark wächst. Dann ist unsere Optimierungsfunktion

$$L_\varepsilon(z, p) := L(z, p) - \frac{1}{\varepsilon} F(p). \quad (3.27)$$

Um den Sattelpunkt dieser Funktion zu berechnen, müssen wir die Ableitungen nach z und p gleich 0 setzen:

$$\begin{aligned} \frac{\partial L_\varepsilon}{\partial z} &= 2G^T(Gz - f) + \mu^2 \nabla \cdot p = 0 \\ \frac{\partial L_\varepsilon}{\partial p} &= -\mu^2 \nabla z - \frac{1}{\varepsilon} F'(p) = 0. \end{aligned}$$

Für das Lösen dieses Systems, wenden wir ein Newton-Verfahren an [FH07]. Dazu linearisieren wir $F'(p)$ mit einer Taylor-Entwicklung erster Ordnung:

$$F'(p^{k+1}) \approx F'(p^k) + F''(p^k)(p^{k+1} - p^k).$$

Somit müssen wir folgendes lineares System lösen:

$$\begin{aligned} 2G^T G z^{k+1} + \mu^2 \nabla \cdot p^{k+1} &= 2G^T f \\ -\mu^2 \nabla z^{k+1} - \frac{1}{\varepsilon} F''(p^k) p^{k+1} &= \frac{1}{\varepsilon} (F'(p^k) - F''(p^k) p^k). \end{aligned} \quad (3.28)$$

3.4.2 Numerische Realisierung

Um das lineare Gleichungssystem (3.28) numerisch zu lösen, weisen wir darauf hin, dass in diskretisierter Form z und p keine Funktionen mehr sind, sondern Vektoren im \mathbb{R}^n . Die Straffunktion $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ (3.27) definieren wir als

$$F(p) := \sum_{i=1}^n \frac{1}{2} \max\{|p_i| - 1, 0\}^2.$$

und erhalten damit:

$$\begin{aligned} (F'(p))_i &= \operatorname{sgn}(p_i)(|p_i| - 1) \cdot \mathbb{1}_{\{|p_i| \geq 1\}} \\ (F''(p))_{i,j} &= \begin{cases} \mathbb{1}_{\{|p_i| \geq 1\}} & i = j \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \end{aligned}$$

Weiter müssen wir den Gradienten diskretisieren. Dazu nehmen wir an, dass die Ableitung der Funktion am letzten Gitterpunkt verschwindet. Für die übrigen Werte nehmen wir den Rückwärtsquotienten, heißt also explizit

$$(\nabla u)_i = \begin{cases} \frac{u_{i+1} - u_i}{h} & i < n \\ 0 & i = n. \end{cases}$$

Damit können wir den Gradienten mit Hilfe einer Matrix berechnen:

$$Du = \nabla u$$

mit

$$D = \begin{pmatrix} -1 & 1 & & 0 \\ & \ddots & \ddots & \\ 0 & & -1 & 1 \\ 0 & \dots\dots\dots & & 0 \end{pmatrix}.$$

Jetzt müssen wir den Divergenzoperator diskretisieren. Da dieser aber der negative adjungierte Gradientenoperator ist, gilt:

$$\nabla \cdot p = -D^T p.$$

Wir können nun das lineare Gleichungssystem aufstellen und definieren dafür:

$$A := \begin{pmatrix} 2G^T G & -\mu^2 D^T \\ -\mu^2 D & -\frac{1}{\varepsilon} F''(p^k) \end{pmatrix}, \quad x := \begin{pmatrix} z^{k+1} \\ p^{k+1} \end{pmatrix}, \quad b := \begin{pmatrix} 2G^T f \\ \frac{1}{\varepsilon} (F'(p^k) - F''(p^k)p^k) \end{pmatrix}.$$

Pro Iterationsschritt müssen wir also $F'(p^k)$, $F''(p^k)$ berechnen und dann das LGS $Ax = b$ lösen.

Algorithmus 3.2 TV-REGULARISIERUNG($G, f, \mu, \varepsilon, h, maxiter, maxtol$)

```

BERECHNE  $D$ 
SETZE  $z = p = 0$ ,  $x = \begin{pmatrix} z \\ p \end{pmatrix}$ ,  $k = 0$ ,  $tol = maxtol + 1$ 
while  $k \leq maxiter \wedge tol > maxtol$  do
   $ablF \leftarrow ABLEITUNG F(p^k)$ 
   $abl2F \leftarrow ABLEITUNG 2F(p^k)$ 
  BERECHNE  $A, b$ 
   $x^{k+1} \leftarrow A \setminus b$ 
   $tol \leftarrow \frac{\|z^{k+1} - z^k\|}{\|z^{k+1}\|} + \frac{\|p^{k+1} - p^k\|}{\|p^{k+1}\|}$ 
   $k \leftarrow k + 1$ 
end while

```

Wir haben jetzt drei verschiedene Regularisierungsmethoden vorgestellt. Weiter haben wir auch Lösungsverfahren dieser Methoden herausgearbeitet. Diese wollen wir nun in den nächsten Kapiteln auf ein Beispiel der Wettervorhersage und der Preisbildung anwenden.

4. PREISMODELL

4.1 Einführung in das Preisbildungsmodell

In der Preisbildungstheorie beschäftigt man sich mit der Frage, wie ein Preis eines gehandelten Gutes zustande kommt. Das wesentliche hierbei ist das vorhandene Angebot und die Nachfrage. Ist das Angebot größer als die Nachfrage, so fällt der Preis so lange, bis ein Gleichgewicht entsteht und wir den sogenannten Marktpreis erhalten.

Die Frage, die für uns hier im Mittelpunkt stehen soll, ist aber eine andere. Wenn wir den Marktpreis zu verschiedenen Zeitpunkten kennen oder beobachten, können wir daraus den Marktpreis von zukünftigen Zeitpunkten bestimmen? Um diese Frage beantworten zu können, müssen wir zuerst ein Modell aufstellen. In unserem Fall ist dies ein „Mean-Field-Modell“ von Lasry und Lions [LL07], welches die Bildung eines Preises beschreibt, wenn große Gruppen von Käufern und Verkäufern ein bestimmtes Produkt handeln.

Das Modell ist durch folgende parabolische Differentialgleichungen gegeben:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_K}{\partial t} - \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2 f_K}{\partial x^2} &= \lambda(t) \delta(x - p(t) + a) && \text{für } x < p(t) \\ f_K(x, t) &= 0 && \text{für } x \geq p(t) \\ f_K &\geq 0 \end{aligned} \quad (4.1a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_V}{\partial t} - \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2 f_V}{\partial x^2} &= \lambda(t) \delta(x - p(t) - a) && \text{für } x > p(t) \\ f_V(x, t) &= 0 && \text{für } x \leq p(t) \\ f_V &\geq 0 \end{aligned} \quad (4.1b)$$

mit der Transformationsrate:

$$\lambda(t) = -\frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial f_K}{\partial x}(p(t), t) = \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial f_V}{\partial x}(p(t), t)$$

wobei $f_K(x, t)$ bzw. $f_V(x, t)$ die Anzahl der potenziellen Käufer bzw. Verkäufer zu einem Preis x zum Zeitpunkt t angibt. Mit $p(t)$ bezeichnen wir den Preis in einem dynamischen Gleichgewicht und $2a$ bezeichnet die Geld-Brief-Spanne, die der

„Market-Maker“ einstreicht. $\lambda(t)$ stellt die Anzahl der Transaktionen zum Zeitpunkt t dar, also den Fluss der Käufer bzw. mit umgekehrtem Vorzeichen den Fluss der Verkäufer. σ misst den zufälligen Anteil des Modells und δ ist eine geglättete δ -Funktion (nicht-negative glatte Funktion mit kompakten Träger im Intervall $(-a, a)$ und es soll $\int \delta = 1$ gelten). Mit diesem System können wir schon zeigen, dass die Anzahl der Käufer bzw. Verkäufer über den gesamten Zeitraum konstant bleibt:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} f_K(x, t) dx &= \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{p(t)} f_K(x, t) dx \\ &= \underbrace{f_K(p(t), t) p'(t)}_{=0} + \int_{-\infty}^{p(t)} \frac{\partial}{\partial t} f_K(x, t) dx \\ &= \int_{-\infty}^{p(t)} \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2 f_K}{\partial x^2} dx + \lambda(t) \\ &= \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial f_K}{\partial x} \Big|_{-\infty}^{p(t)} + \lambda(t). \end{aligned}$$

Eine natürliche Annahme ist, dass sich das Verhalten der Käufer für großes p nicht verändert. Damit erhalten wir

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} f_K(x, t) dx = \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial f_K}{\partial x}(p(t), t) + \lambda(t) = 0$$

Eine analoge Rechnung ergibt:

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} f_V(x, t) dx = 0.$$

System (4.1) können wir nun auch folgendermaßen zusammenfassen:

Da $f_K(x, t) = 0$ für $x \geq p(t)$ und $f_V(x, t) = 0$ für $x \leq p(t)$ können wir die Funktion

$$f(x, t) = \begin{cases} f_K(x, t) & x < p(t) \\ -f_V(x, t) & x > p(t) \end{cases}$$

definieren, ohne dass uns irgendwelche Informationen abhandeln kommen.

Mit dieser Funktion bekommen wir folgendes freies Randwertproblem mit den Unbekannten $f = f(x, t)$ und $p = p(t)$:

$$\frac{\partial f}{\partial t} - \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \lambda(t)(\delta(x - p(t) + a) - \delta(x - p(t) - a))$$

$$\begin{aligned} f(x, t) &> 0 && \text{wenn } x < p(t) \\ f(x, t) &< 0 && \text{wenn } x > p(t) \end{aligned} \tag{4.2}$$

mit den Anfangsbedingungen:

$$f(x, 0) = f_I(x), \quad p(0) = p_0.$$

Diese Anfangswerte sollen folgende Kompatibilitätsbedingungen erfüllen:

$$\begin{aligned} f_I(p_0) &= 0, & f_I(x) &> 0 \text{ wenn } x < p_0 \\ & & f_I(x) &< 0 \text{ wenn } x > p_0. \end{aligned}$$

Es bleibt weiterhin $\lambda(t) = -\frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial f}{\partial x}(p(t), t)$ bestehen. Fordern wir zusätzlich, dass $f(p(t), t) = 0$ ist, so können wir die Differentialgleichung auch folgendermaßen umschreiben:

Wir verschieben die Gleichung um $x = p(t) + y$, setzen $g(y, t) = f(y + p(t), t)$ und erhalten dann mit der verallgemeinerten Kettenregel:

$$\frac{\partial g}{\partial t} = \frac{\partial^2 g}{\partial y^2} - \frac{\partial g}{\partial y}(0, t)(\delta(y + a) - \delta(y - a)) + p'(t) \frac{\partial g}{\partial y} \quad (4.3)$$

$$p'(t) = -\frac{g_{yy}(0, t)}{g_y(0, t)}, \quad (4.4)$$

wobei wir die Konstante $\frac{\sigma^2}{2}$ aus Vereinfachungsgründen auf 1 normiert haben. Die Bedingung für $p'(t)$ garantiert uns, dass $f(p(t), t) = 0$ ist.

Mit diesem Mean-Field-Problem haben sich schon einige Wissenschaftler beschäftigt. Gonzalez und Gualdini [GM08] untersuchten die Existenz und das asymptotische Verhalten unter bestimmten Annahmen an die Anfangsbedingungen. Insbesondere nahmen sie an, dass die Anfangsdaten bzgl. eines Punktes p_0 symmetrisch sind. Mathematisch ausgedrückt soll gelten:

$$f_K(p_0 - x, t = 0) = f_V(p_0 + x, t = 0).$$

Für diesen Fall zeigten sie Existenz und exponentielle Konvergenz der Lösung gegen ihren stationären Wert.

Gonzalez und Gualdini betrachteten in [GM09] die DGL auf einem beschränkten Intervall $[-A, B]$, $A, B > 0$ mit Neumann-Randbedingung $\frac{\partial f}{\partial x}(-A, 0) = \frac{\partial f}{\partial x}(B, 0) = 0$. Für dieses Problem zeigten sie, dass wenn die Anfangsbedingung in der Nähe des Gleichgewichts ist, auch dort eine Lösung existiert und exponentiell schnell gegen eine eindeutige Lösung konvergiert.

In [MMPW09] wird unter bestimmten Anforderungen an die Anfangsbedingungen lokale Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung gezeigt. Weiterhin untersuchten Sie

einige numerische Beispiele.

Wir werden in Abschnitt 4.3 später die Differentialgleichung (4.3) noch weiter vereinfachen und zeigen, wenn wir Randbedingungen vorgeben und die Preisentwicklung kennen, dass dann eine Lösung eindeutig ist. Um diesen Beweis durchzuführen, brauchen wir die Fourier-Transformation, die wir im nächsten Abschnitt kurz einführen werden.

4.2 Fourier-Transformation

Mit Hilfe der Fourier-Transformation kann man gewisse partielle Differentialgleichungen in gewöhnliche Differentialgleichungen transformieren und in diesem Bildbereich lösen. Durch eine etwas kompliziertere Rücktransformation erhält man dann im Originalbereich die Lösung der partiellen DGL. Wir wollen im nächsten Abschnitt die DGL allerdings nicht lösen, sondern nur die Eindeutigkeit der Lösung zeigen. Auch dabei ist die Fourier-Transformation nützlich und darum führen wir einige wichtige Details auf. Dieser Abschnitt beruht auf [Cle07] und [Ars66]

Definition 4.1. (*Fourier-Transformation*)

Für eine Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ ist die Fourier-Transformation definiert durch

$$\hat{f}(s) := \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ist} f(t) dt, \quad (4.5)$$

wenn dieses Integral für mindestens ein $s \in \mathbb{R}$ existiert.

Dieses Integral muss natürlich nicht für jedes $s \in \mathbb{R}$ existieren. Es gibt aber einen hilfreichen Satz, der diese Existenz für L^1 -Funktionen liefert.

Satz 4.1. Sei $f \in L^1(\mathbb{R})$, dann existiert (4.5) für alle $s \in \mathbb{R}$.

Beweis. Sei $s \in \mathbb{R}$ beliebig. Da $|e^{-ist}| = 1$, gilt

$$|\hat{f}(s)| = \left| \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-ist} dt \right| \leq \int_{-\infty}^{\infty} |f(t) e^{-ist}| dt = \int_{-\infty}^{\infty} |f(t)| dt.$$

Da $f \in L^1$ liegt, existiert somit die Fouriertransformierte. □

Wir werden im nächsten Abschnitt eine Fouriertransformation auf die DGL (4.3) anwenden und eine Lösung in dem Raum der Fouriertransformierten bekommen. Daher ist es wichtig auch eine Rücktransformation zu haben. Die Existenz garantiert der folgende Satz:

Satz 4.2. Sei $f \in L^1(\mathbb{R})$, und sei auch dessen Fourier-Transformation $\hat{f} \in L^1(\mathbb{R})$. Weiter sei f in t stetig. Dann gilt

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(s) e^{ist} ds.$$

Für einen Beweis verweisen wir auf [Ars66].

Wir werden auch die Fourier-Transformation der Ableitungen einer Funktion benötigen. Die Aussage des folgenden Satzes ist der Grund dafür, warum man sich in der Theorie von Differentialgleichungen mit der Fourier-Transformation beschäftigt.

Satz 4.3. Sei $n \in \mathbb{N}$ und sei $f \in C^n(\mathbb{R}) \cap L^1(\mathbb{R})$ und seien auch alle Ableitungen $f^{(k)} \in L^1(\mathbb{R})$ für $k = 1, \dots, n$, dann gilt

$$\widehat{f^{(k)}}(s) = (is)^k \hat{f}(s)$$

für alle $k=0, \dots, n$.

Beweis. Wir beweisen den Satz für $n = 1$. Der Rest ergibt sich durch Induktion. Wir erhalten mit Hilfe von partieller Integration

$$\widehat{f'}(s) = \int_{-\infty}^{\infty} f'(t)e^{-ist} dt = [f(t)e^{-ist}]_{-\infty}^{\infty} + is \int_{-\infty}^{\infty} f(t)e^{-ist} dt. \quad (4.6)$$

Da $f \in L^1$ liegt, gilt $f(t) \rightarrow 0$ für $|t| \rightarrow \infty$. Weiter ist $|e^{-ist}|$ durch Eins beschränkt. Somit fällt der erste Term auf der rechten Seite von (4.6) weg. Dies zeigt dann die Behauptung. \square

In dem Satz sieht man sehr schön, dass man die Fourier-Transformation der Ableitung einer Funktion nur durch die Fourier-Transformation der Funktion (mit einem Vorfaktor) darstellen kann. Dies ist sehr nützlich beim Lösen von Differentialgleichungen, wie wir auch im nächsten Kapitel sehen werden.

Zwei weitere wichtige Aussagen werden wir noch gebrauchen. Zuerst stellt sich die Frage, unter welchen Bedingungen L^1 -Funktionen auch in L^2 liegen. Das dies im Allgemeinen nicht richtig ist, sieht man an der Funktion

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{x}} & \text{für } x \in (0, 1] \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Die zweite Frage, die es dann zu beantworten gilt, ist ob die Fouriertransformation diese Bedingungen erfüllt. Wie wir gleich sehen werden, können wir diese Frage mit ja beantworten, wenn wir annehmen, dass die Fourier-Transformation auch in L_1 liegt.

Satz 4.4. Sei $f \in C(\mathbb{R}) \cap L^1(\mathbb{R})$, dann ist $f \in L^2(\mathbb{R})$

Beweis. Da f stetig ist und über \mathbb{R} integrierbar, gibt es ein $a > 0$, so dass $|f(x)| < 1$ für alle $|x| > a$. Es gilt somit

$$\begin{aligned} \infty &> \int_{-\infty}^{-a} |f(x)| dx \geq \int_{-\infty}^{-a} |f(x)|^2 dx, \\ \infty &> \int_a^{\infty} |f(x)| dx \geq \int_a^{\infty} |f(x)|^2 dx. \end{aligned}$$

Weiter ist f stetig, damit auch f^2 und jedes Integral über ein endliches Intervall existiert. Somit erhalten wir insgesamt

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{-a} |f(x)|^2 dx + \int_{-a}^a |f(x)|^2 dx + \int_a^{\infty} |f(x)|^2 dx < \infty.$$

□

Jetzt müssen wir noch überprüfen, dass die Fourier-Transformation stetig ist, damit wir obigen Satz auch auf die Fourier-Transformierte anwenden können.

Satz 4.5. Sei $f \in L^1(\mathbb{R})$, dann ist die zugehörige Fourier-Transformation \hat{f} auf ganz \mathbb{R} stetig.

Beweis. Sei $s, h \in \mathbb{R}$ beliebig, dann gilt

$$\begin{aligned} |\hat{f}(s+h) - \hat{f}(s)| &= \left| \int_{-\infty}^{\infty} f(t)e^{-i(s+h)t} dt - \int_{-\infty}^{\infty} f(t)e^{-ist} dt \right| \\ &= \left| \int_{-\infty}^{\infty} f(t)e^{-ist}(e^{-iht} - 1) dt \right| \\ &\leq \int_{-\infty}^{\infty} |f(t)| |e^{-iht} - 1| dt. \end{aligned}$$

Somit ist für $h \rightarrow 0$

$$|\hat{f}(s+h) - \hat{f}(s)| \rightarrow 0$$

und \hat{f} ist stetig.

□

Wir werden uns nun im Folgenden nur mit L^1 -Funktionen beschäftigen. Es gibt ähnliche Definitionen und Ergebnisse der Fourier-Transformation für L^2 -Funktionen. Daher Verweisen wir auf [Ars66], wo mehr dazu zu finden ist. Wir werden im Beweis der Eindeutigkeit davon ausgehen, dass die entsprechende Funktion in L^1 liegt. Ein analoges Ergebnis lässt sich auch für L^2 -Funktionen erreichen.

4.3 Eindeutigkeitsbeweis

In diesem Abschnitt wollen wir die Eindeutigkeit der Rekonstruktion des Anfangswertes von der DGL (4.3) beweisen. Wir nehmen dazu an, dass wir die Funktionen $p'(t)$ und $\frac{\partial g}{\partial y}(0, t) = b(t)$ kennen. Diese Voraussetzungen werden später bei unserem 4DVAR-Problem die Beobachtungen sein.

Zur Vereinfachung setzen wir $c(y) = \delta(y + a) - \delta(y - a)$. Insgesamt haben wir also die Differentialgleichung

$$g_t = g_{yy} + p'(t)g_y - b(t)c(y), \quad (4.7)$$

mit den Randbedingungen

$$g(0, t) = 0, \quad g_y(0, t) = b(t). \quad (4.8)$$

Mit Hilfe der Fourier-Transformation können wir nun die Eindeutigkeit einer Lösung dieses Problems zeigen. Für diesen Beweis brauchen wir ein Lemma über die Momente einer Funktion. Dazu definieren wir erstmal den Begriff des Moments in Anlehnung an die Wahrscheinlichkeitstheorie.

Definition 4.2. Sei $k \in \mathbb{N}$ und f eine integrierbare Funktion, dann ist

$$m_k(f) := \int_{-\infty}^{\infty} x^k f(x) dx$$

das ***k*-te Moment der Funktion f** .

Nun können wir das wesentliche Lemma des Abschnitts formulieren.

Lemma 4.1. Sei $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ eine Funktion für die gilt,

- (i) $g(x) := e^{\frac{x^2}{2}} f(x)$ ist eine L^2 -Funktion und
- (ii) $m_k(f) = 0$ für alle k .

Dann gilt $f \equiv 0$.

Beweis. Es gilt nach der zweiten Voraussetzung

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^k f(x) dx = 0.$$

Da dies für alle k gilt, gilt die Gleichung auch für jedes Polynom. Wir betrachten dazu die Hermitschen Polynome (siehe Anhang C). Sei H_j das j -te Hermitsche Polynom mit $j \in \mathbb{N}$ beliebig. Dann gilt also

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_j(x) f(x) dx = 0.$$

Weiter multiplizieren wir eine Eins um die zugehörige Hermitsche Funktion zu bekommen:

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{-\infty}^{\infty} H_j(x) (2^j j! \sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{x^2}{2}} (2^j j! \sqrt{\pi})^{\frac{1}{2}} e^{\frac{x^2}{2}} f(x) dx \\ &= (2^j j! \sqrt{\pi})^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_j(x) e^{\frac{x^2}{2}} f(x) dx, \end{aligned}$$

wobei $\Psi_j(x)$ die j -te Hermitsche Funktion ist. Nun ist $(\Psi_i(x))_i$ eine Orthonormalbasis von L^2 . Also gilt auf Grund der ersten Voraussetzung

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_j(x) \sum_{i=0}^{\infty} a_i \Psi_i(x) = 0.$$

Nutzen wir jetzt die Orthonormaleigenschaft aus, sehen wir, dass $a_j = 0$ ist. Da j beliebig gewählt wurde, muss

$$e^{\frac{x^2}{2}} f(x) = 0 \quad \forall x \in \mathbb{R}$$

gelten. Da die Exponentialfunktion keine Nullstellen hat, ist die Aussage des Lemmas bewiesen. \square

Satz 4.6. Seien g_1, g_2 Lösungen der DGL (4.7), die die Randbedingungen (4.8) erfüllen und für die

$$g_1, g_2 \in C^1([0, T], C^2(\mathbb{R}) \cap L^1(\mathbb{R}))$$

gilt. Weiter seien

$$\frac{\partial g_i}{\partial y}, \frac{\partial^2 g_i}{\partial y^2} \in C([0, T], L^1(\mathbb{R})) \quad \text{für } i = 1, 2.$$

Dann gilt $g_1 = g_2$.

Beweis. Wir definieren die Funktion $\bar{g} := g_1 - g_2$ und zeigen, dass diese konstant Null ist. Nach Definition löst \bar{g} die DGL

$$\bar{g}_t = \bar{g}_{yy} + p'(t)\bar{g}_y \tag{4.9}$$

mit den Randbedingungen

$$\bar{g}(0, t) = 0, \quad \bar{g}_y(0, t) = 0. \tag{4.10}$$

Jetzt betrachten wir die Fouriertransformation von \bar{g} bzgl. der y -Koordinaten

$$\hat{g}(s, t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-isy} \bar{g}(y, t) dy. \tag{4.11}$$

Leiten wir nun (4.11) nach t ab, erhalten wir

$$\hat{g}_t(s, t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-isy} \bar{g}_t(y, t) dy.$$

Auf Grund der Differentialgleichung (4.9) gilt somit

$$\hat{g}_t(s, t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-isy} (\bar{g}_{yy}(y, t) + p'(t) \bar{g}_y(y, t)) dy.$$

Wenden wir jetzt Satz 4.3 an, erhalten wir

$$\hat{g}_t(s, t) = (-s^2 + isp'(t)) \hat{g}(s, t).$$

Die Lösung dieser Differentialgleichung ist

$$\hat{g}(s, t) = e^{-s^2 + isp(t)} \hat{g}(s, 0).$$

Mittels der Fourier-Rücktransformation gilt

$$\bar{g}(y, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{isy} e^{-s^2 t + isp(t)} \hat{g}(s, 0) ds. \quad (4.12)$$

Aus den Randbedingungen (4.10) erhalten wir damit für alle t

$$\bar{g}(0, t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-s^2 t + isp(t)} \hat{g}(s, 0) ds = 0, \quad (4.13)$$

$$\bar{g}_y(0, t) = \int_{-\infty}^{\infty} s e^{-s^2 t + isp(t)} \hat{g}(s, 0) ds = 0. \quad (4.14)$$

Ableiten der ersten Gleichung nach t bringt uns

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{-\infty}^{\infty} (-s^2 + isp'(t)) e^{-s^2 t + isp(t)} \hat{g}(s, 0) ds \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} s^2 e^{-s^2 t + isp(t)} \hat{g}(s, 0) ds + ip'(t) \int_{-\infty}^{\infty} s e^{-s^2 t + isp(t)} \hat{g}(s, 0) ds \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} s^2 e^{-s^2 t + isp(t)} \hat{g}(s, 0) ds. \end{aligned}$$

Die letzte Gleichheit folgt durch die Bedingung (4.14). Analog erhalten wir, wenn wir (4.14) nach t ableiten

$$0 = \bar{g}_{yt}(0, t) = - \int_{-\infty}^{\infty} s^3 e^{-s^2 t + isp(t)} \hat{g}(s, 0) ds.$$

Induktiv berechnen wir so für alle $j \in \mathbb{N}$ und alle t

$$\begin{aligned}\frac{\partial^j g}{\partial t^j} &= (-1)^j \int_{-\infty}^{\infty} s^{2j} e^{-s^2 t + i s p(t)} \hat{g}(s, 0) ds = 0, \\ \frac{\partial^{j+1} g}{\partial t^j \partial y} &= (-1)^j \int_{-\infty}^{\infty} s^{2j+1} e^{-s^2 t + i s p(t)} \hat{g}(s, 0) ds = 0.\end{aligned}$$

Damit sind alle Momente gleich Null. Um Lemma 4.1 anzuwenden, benötigen wir aber eine Funktion f für die gilt, dass $e^{\frac{s^2}{2}} f(s)$ in L^2 liegt. Um dies zu erreichen betrachten wir den Fall $t = \frac{1}{2}$. Wir setzen $\tilde{p} := p(\frac{1}{2})$ und definieren

$$f(s) := e^{-\frac{s^2}{2} + i s \tilde{p}} \hat{g}(s, 0).$$

Da $0 \leq e^{(ix)^2} \leq 1$ für alle x gilt, erhalten wir folgendes Resultat.

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} (e^{\frac{s^2}{2}} f(s))^2 ds &= \int_{-\infty}^{\infty} (e^{i s \tilde{p}} \hat{g}(s, 0))^2 ds \\ &\leq \int_{-\infty}^{\infty} \hat{g}^2(s, 0) < \infty.\end{aligned}$$

Die letzte Ungleichung erhalten wir nach Satz 4.4, da mit den hier gemachten Annahmen die Fouriertransformierte in L^2 liegt. Wir können jetzt Lemma 4.1 anwenden. Das heißt also $e^{i s \tilde{p}} \hat{g}(s, 0)$ ist konstant Null für alle s und da die Exponentialfunktion keine Nullstelle besitzt, ist somit $\hat{g}(s, 0)$ konstant Null. Einsetzen in (4.12) ergibt die Eindeutigkeit. \square

Wir haben also die Eindeutigkeit der Rekonstruktion des Anfangswerts gezeigt und können somit davon ausgehen, dass wenn wir den Preis und die Funktion b kennen, eine Lösung der DGL eindeutig ist. Wenn wir also p und b beobachten können und mit Hilfe der 4DVAR eine Lösung für den Anfangszustand finden, dann wird diese eindeutig sein. Wie wir eine Lösung mittels 4DVAR herleiten können, werden wir im abschließenden Kapitel sehen.

5. ANWENDUNG DER REGULARISIERUNGSMETHODEN

In diesem Kapitel werden wir nun die Tikhonov- (Kapitel 3.2.2), L_1 - (Kapitel 3.3.2) und die TV-Regularisierung (Kapitel 3.4.2) anwenden. Zuerst betrachten wir dabei ein sehr vereinfachtes Problem aus der Wetterbeobachtung. Danach geben wir einen kurzen Überblick darüber, wie wir die Methoden auf unser Preisbildungsmodell aus Kapitel 4.1 anwenden können.

5.1 Lineare Transportgleichung

Wir modellieren in diesem Abschnitt ein Szenario, das bestimmt jeder schon einmal selbst miterlebt hat. Ist man an einem heißen Sommertag draußen, an dem es um die Mittagszeit ein kleines Gewitter gibt, so beobachtet man dabei den im folgenden beschriebenen Verlauf von Temperatur und Windverhältnissen:

Die Temperaturen steigen am Morgen relativ stark an und bleiben bis zum Gewitter relativ konstant. Ziehen dann die ersten dunklen Wolken am Himmel auf, wird es plötzlich windig und die Temperaturen stürzen sehr schnell um einige Grad ab. Während des Gewitters sind die Temperaturen und Windgeschwindigkeiten wieder relativ konstant. Zieht dann das Unwetter weiter, und kommt die Sonne wieder raus, steigt die Temperatur und die Windverhältnisse sind ruhiger und insgesamt konstant. Da das Unwetter aber weiterzieht, verschiebt sich diese Wetterfront an einen anderen Ort, wo zeitversetzt das gleiche Phänomen auftritt¹.

Wir werden nun das oben beschriebene Szenario in ein sehr vereinfachtes mathematisches, eindimensionales Modell fassen. Wir betrachten dazu nur eine Wetterkomponente, nämlich den Wind. Weiter nehmen wir an, dass der Wind im ganzen betrachteten Gebiet bei gutem Wetter überall gleich ist und bei schlechtem Wetter ebenso.

Durch diese gemachten Annahmen und da die Wetterfront sich mit der Zeit im Ort bewegt, wählen wir die lineare Transportgleichung

$$u_t(x, t) + u_x(x, t) = 0, \tag{5.1}$$

¹ Diesen Verlauf konnte man z.B. am 12.07.2010 in Greven beobachten. Siehe dazu <http://www.wetterspiegel.de/de/europa/deutschland/nordrhein-westfalen/2394w103150x23.html> und gebe auf der Seite das obige Datum an.

die das Modell beschreiben soll. Dazu sei $u : \mathbb{R}^+ \times [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ die Funktion, die die Windgeschwindigkeit zum Zeitpunkt $t \geq 0$ am Ortspunkt $x \in [0, 1]$ angibt.

Unsere Beobachtungen sind jetzt die gemessenen Windgeschwindigkeiten an verschiedenen Wetterstationen und zu verschiedenen Zeitpunkten. Wir suchen den Anfangszustand der Funktion, wollen also wissen, wie stark der Wind zum Zeitpunkt $t = 0$ auf dem ganzen Gebiet ist. Da wir unsere Ergebnisse später mit den exakten Daten vergleichen wollen, setzen wir folgenden Anfangszustand fest:

$$u(x, 0) = \begin{cases} 0.5, & 0.25 \leq x < 0.5, \\ -0.5, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (5.2)$$

Dabei soll der Wert 0.5 für starke Windverhältnisse stehen und der Wert -0.5 für schwache. Weiter sagt uns dieser Anfangszustand, dass zum Startpunkt das Unwetter schon auf dem Teilgebiet $[0.25, 0.5]$ angekommen ist. Wir werden uns nun unsere Beobachtungen selber herleiten. Dazu werden wir die Transportgleichung mittels Charakteristikenmethode lösen. Die Lösung dient uns dann als Grundlage. Die Grundidee der Methode der Charakteristiken (vgl. [Bur08]) ist die, dass man sich eine Kurve $(x(s), t(s))$ herleitet, welche die Bedingung $\frac{d}{ds}u(x(s), t(s)) = 0$ erfüllt. Wir wählen also eine Kurve $(x(s), t(s))$ mit $s \in \mathbb{R}$. Es gilt dann

$$\frac{d}{ds}u(x(s), t(s)) = \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial s} + \frac{\partial u}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial s} \quad (5.3)$$

Mit der Wahl von $\frac{\partial x}{\partial s} = 1$ und $\frac{\partial t}{\partial s} = 1$ erhalten wir somit wie gewünscht

$$\frac{d}{ds}u(x(s), t(s)) = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial t} = 0. \quad (5.4)$$

Setzen wir nun $t(0) = 0$, so erhalten wir $t = s$, $x = t + x(0)$ und $u(s = 0) = u(x(0), 0)$. Aus (5.4) können wir dann

$$u(x(t), t) = u(x(0), 0) = u(x - t, 0) \quad (5.5)$$

herleiten. Wir bekommen somit die Lösung

$$u(x, t) = \begin{cases} 0.5, & 0.25 + t \leq x \leq 0.5 + t, \\ -0.5, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (5.6)$$

In unserem Beispiel werden wir nur ein Zeitintervall betrachten, in dem das Unwetter nicht über den Rand unseres Gebietes hinausgeht. Daher können wir zusätzlich $u(0, t) = u(1, t)$ fordern. Um nun die Beobachtungen zu konstruieren, werden wir verschiedene Fälle betrachten, um zu zeigen, wie gut unser Verfahren ist. Wir werden zuerst in jedem Zeit- und Ortsschritt exakte Beobachtungen fordern, das heißt

wir werten an jedem Punkt (5.6) aus.

Als zweites betrachten wir den Fall, dass weniger Beobachtungen zur Verfügung stehen. Dies wird die Berechnungszeit natürlich verkürzen. Die Frage ist aber, ob die Lösung trotzdem noch geeignet ist. Wir werden dazu (5.6) nur in jedem zweiten Zeitschritt und in jedem zwanzigsten Ortsschritt auswerten.

Als letztes modifizieren wir den eben betrachteten Fall, indem wir unsere Beobachtungen jetzt noch verfälschen. Wir addieren dazu ein Gaußsches Rauschen mit Erwartungswert 0 und konstanter Varianz σ^2 . Mit dieser Variante können wir schauen, wie unsere Methoden auf kleine Störungen reagieren, denn in der Praxis wird man auch immer Ungenauigkeiten in den Messwerten haben.

Wir können jetzt aus unserem Modell ein lineares 4DVAR-Problem (2.1) herleiten. Dazu werden wir unser Modell diskretisieren.

Es sei $u_j^n := u(j * \Delta x, n * \Delta t)$ für $j = 0, \dots, N$, $n = 0, \dots$ mit $\Delta x = 1/N$. Das Upwind-Verfahren lautet dann ([Bur07])

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (u_j^n - u_{j-1}^n). \quad (5.7)$$

Mit der Matrix

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\Delta t}{\Delta x} & 0 & \dots & 0 & \frac{\Delta t}{\Delta x} \\ \frac{\Delta t}{\Delta x} & 1 - \frac{\Delta t}{\Delta x} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \frac{\Delta t}{\Delta x} & 1 - \frac{\Delta t}{\Delta x} \end{pmatrix} \quad (5.8)$$

und den Vektoren $u^n := (u_0^n, \dots, u_N^n)^T$, können wir (5.7) auch schreiben als

$$u^{n+1} = \mathcal{M}u^n \quad \text{für alle } n \in \mathbb{N}. \quad (5.9)$$

Anders ausgedrückt ist \mathcal{M} unsere Vorhersagefunktion aus Gleichung (2.25).

Um unser 4DVAR-Problem aufstellen zu können, müssen wir noch einige Parameter definieren. Wir setzen als Hintergrundinformation für die Anfangsbedingung $u_0^b = 0$, und dessen Kovarianzmatrix $B = I$. Als Kovarianzmatrix für die Beobachtungen definieren wir $R = 0.01I$. Diese Wahlen der Kovarianzmatritzen, bedeuten, dass wir stärker den Beobachtungen trauen, als der Hintergrundinformation. Dies stimmt in unserem Fall auch, da die Beobachtungen entweder ganz oder fast richtig sind. Die Hintergrundinformation weicht aber über all sehr stark ab.

Somit erhalten wir folgendes 4DVAR-Problem.

Problem 5.1. *Gesucht ist $\hat{u}_0 \in \mathbb{R}^N$, welches die Funktion*

$$J(u_0) = \frac{1}{2} u_0^T u_0 + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^M 100 (z_n - H(u^n))^T (z_n - H(u^n)) \quad (5.10)$$

unter der Bedingung

$$u^{n+1} = \mathcal{M}u^n \quad \text{für } n = 0, \dots, M - 1 \quad (5.11)$$

minimiert.

Dabei sind die z_n die oben beschriebenen Beobachtungen und M ist die Anzahl der Zeitschritte, die wir beobachten. Die Matrix H unterscheidet sich je nach Fall, welche Beobachtungen wir haben. Im ersten Fall, in dem überall Beobachtungen existieren, ist dies die Einheitsmatrix I . In den anderen beiden Fällen ist die Matrix $H \in \mathbb{R}^{N/20 \times N}$ so definiert, dass das Ergebnis einer Multiplikation mit einem Vektor $v \in \mathbb{R}^N$, ein Vektor ist, der jeden zwanzigsten Eintrag von v enthält. Damit vergleichen wir also genau die Beobachtungen am Ort x . Wie wir sehen, sollte N in unserem Fall ein Vielfaches von 20 sein.

Weiter ist zu erwähnen, dass in den Fällen zwei und drei auch nur jeder zweite Zeitschritt betrachtet wird, das heißt wir setzen jeden zweiten Summanden von der Summe in (5.10) einfach auf Null.

Jetzt können wir unsere verschiedenen Regularisierungsmethoden auf das Problem (5.1) anwenden und vergleichen. Dazu wählen wir die Anzahl der Ortsschritte $N = 100$ und die Anzahl der Zeitschritte $M = 40$. Die Zeitschrittweite setzen wir auf $\Delta t = 0.005$.

5.1.1 Ergebnisse der Tikhonov-Regularisierung

In diesem Abschnitt betrachten wir die Tikhonov-Regularisierung und vergleichen die unterschiedlichen Fälle bezüglich unserer Beobachtungen miteinander.

Wie wir in Kapitel 3.2.2 gesehen haben, haben wir das 4DVAR-Problem in ein Problem der Form

$$J(y) = \|b - Ay\|_2^2 + \mu^2 \|y\|_2^2 \quad (5.12)$$

transformiert. In dieser Form sind b und A bekannt und der Regularisierungsparameter $\mu > 0$ beliebig gewählt. Da auch die anderen Regularisierungsmethoden diesen Parameter beinhalten, setzen wir ihn für alle Verfahren auf den gleichen Wert. So garantieren wir, dass die Gewichtung auf den Regularisierungsterm bei allen Methoden gleich ist. Wir wählen für die kommenden Betrachtungen $\mu = 1$.

Wir vergleichen jetzt zuerst den ersten Fall, dass wir überall und zu jedem Zeitpunkt exakte Beobachtungen haben, mit der exakten Lösung. Wie wir in Abbildung 5.1 sehen, ist das Ergebnis noch nicht optimal. Man erkennt starke Oszillationen in der Nähe der Unstetigkeitsstellen der Funktion. Diese nehmen nur langsam ab, wo sie dann gegen die exakte Lösung konvergieren. Dies ist natürlich kein überzeugendes Ergebnis, da dies noch eine sehr einfache Funktion ist. Wären hier noch mehr Sprungstellen auf kleineren Intervallen, würde das ganze noch chaotischer

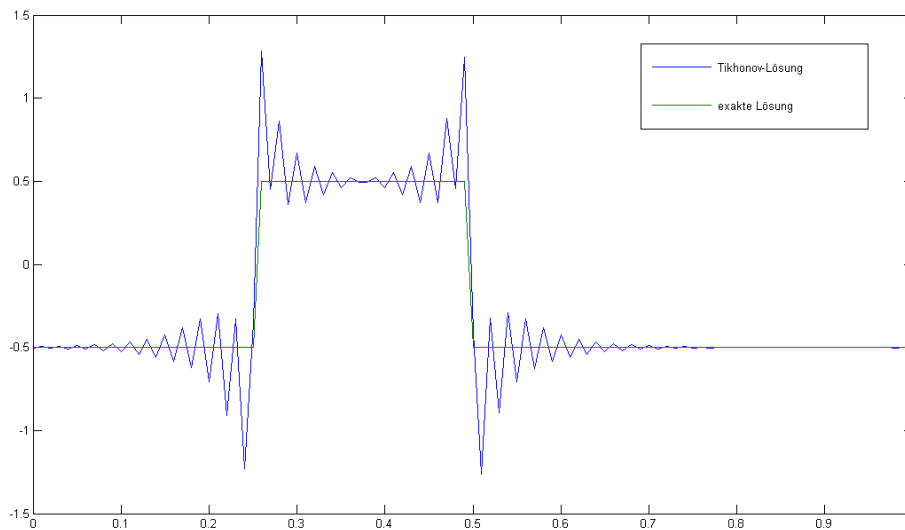


Fig. 5.1: exakte Lösung und die Lösung der Tikhonov-Regularisierung bei genauen Beobachtungen

werden. Entgegenwirken könnte man vielleicht damit, in dem man die Ortsschrittweite verkleinert. Dies würde aber dazu führen, dass man mehr Beobachtungen und mehr Rechenoperationen benötigt.

Wenn wir jetzt den Fall betrachten, wo wir nur an bestimmten Stellen und Zeitpunkten Beobachtungen zur Verfügung haben, sieht man in Abbildung 5.2, dass der Unterschied nicht groß ist. Man erkennt in der Nähe der Unstetigkeitsstelle wieder extreme Ausschläge, die diesmal aber nicht so stark schwingen wie im vorigen Fall. Die Ausschläge sind unterschiedlich ausgeprägt. Man sieht weiterhin, dass die Lösung auch noch weit entfernt von der Unstetigkeitsstelle stark von der exakten Lösung abweichen kann. Dies spiegelt sich in Tabelle 5.1 wider, in der die summierte quadratische Abweichung betrachtet wird.

Desweiteren wird in der Abbildung deutlich, dass eine kleine Störung der Beobachtungswerte kaum Einfluss auf die Lösung hat. Dass diese Abweichung nicht groß ist, liegt unter anderem daran, dass wir die Varianz relativ klein gewählt haben. Vergrößern wir die Varianz auf 0.1, so sehen wir in Abbildung 5.3, dass die Lösung sehr stark vom richtigen Ergebnis abweicht. Andersherum, wenn die Messinstrumente sehr gut sind und die Fehlerabweichung somit sehr klein, dann erhalten wir fast das gleiche Ergebnis, wie im Fall von exakten Daten.

Im nächsten Abschnitt betrachten wir die L1-Regularisierung, die uns etwas bessere Ergebnisse bringen wird.

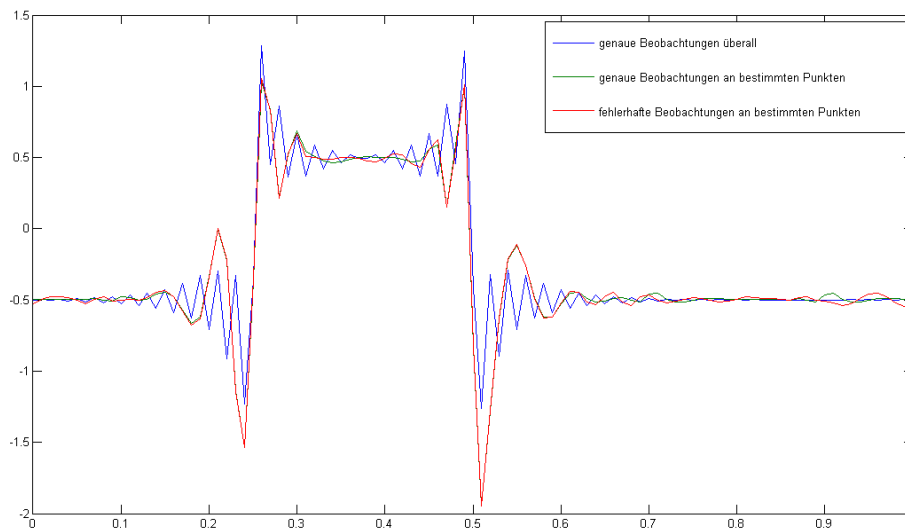


Fig. 5.2: Lösungen der Tikhonov-Regularisierungen bei unterschiedlichen Beobachtungen

	1.Fall	2.Fall	3.Fall
Tikhonov	3.4785	5.9754	5.9867
L1	1.4234	4.6501	4.6698
TV	0.1267	0.0122	0.0317

Tab. 5.1: Aufsummierter Quadratischer Fehler

5.1.2 $L1$ -Regularisierung

In Kapitel 3.3.2 erwähnten wir schon, dass die $L1$ -Regularisierung angewendet wird, wenn wir scharfe Kanten haben. Dies ist hier natürlich genau der Fall in den beiden Sprungstellen, die den Anfang und das Ende des Unwetters symbolisieren.

Betrachten wir zuerst einmal wieder die Lösung, die wir erhalten, wenn wir überall Beobachtungsstationen haben (Abbildung 5.4). Man sieht die Verbesserung im Ergebnis. In der Nähe der Unstetigkeitsstellen ist zwar immer noch eine Abweichung zu erkennen, aber es treten jetzt keine Schwingungen mehr auf. Die Lösung konvergiert vor und nach den Unstetigkeitsstellen schneller.

Auch die Fehlerabweichung ist stark zurückgegangen, wie wir in Tabelle 5.1 sehen. Dies ist nicht verwunderlich, da es nur noch zwei Ausschläge gibt.

Man erkennt in Abbildung 5.5, dass sich die Lösung mit weniger Beobachtungen verbessert hat. Trotzdem fällt auf, dass sich der Unterschied zwischen den Lösungen von Fall 1 und Fall 2 verstärkt hat. Auch sind die Lösungen von Fall 2 und Fall 3 auf Grund der geringen Varianz wieder nah beieinander.

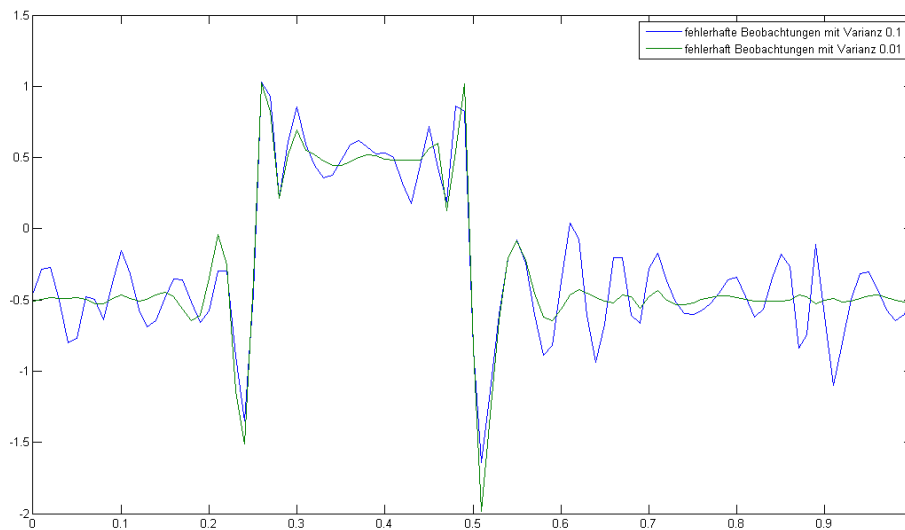


Fig. 5.3: Lösungen der Tikhonov-Regularisierung bei fehlerhaften Beobachtungen mit unterschiedlichen Standardabweichungen

Vergleicht man die Berechnungszeiten (Tabelle 5.2), so bemerkt man den Nachteil dieses Verfahrens. Der Aufwand ist erheblich größer. Dies ist bei unserem kleinen, einfachen Modell natürlich nicht ausschlaggebend. Wenn man aber kompliziertere Modelle mit mehr Beobachtungen und Auswertungspunkten betrachtet, ist dies ein sehr wichtiger Aspekt.

	1.Fall	2.Fall	3.Fall
Tikhonov	0.0262	0.0016	0.0015
L1	2.7096	0.0222	0.0224
TV	1.3962	0.5638	0.4283

Tab. 5.2: Berechnungszeit der Verfahren in Sekunden

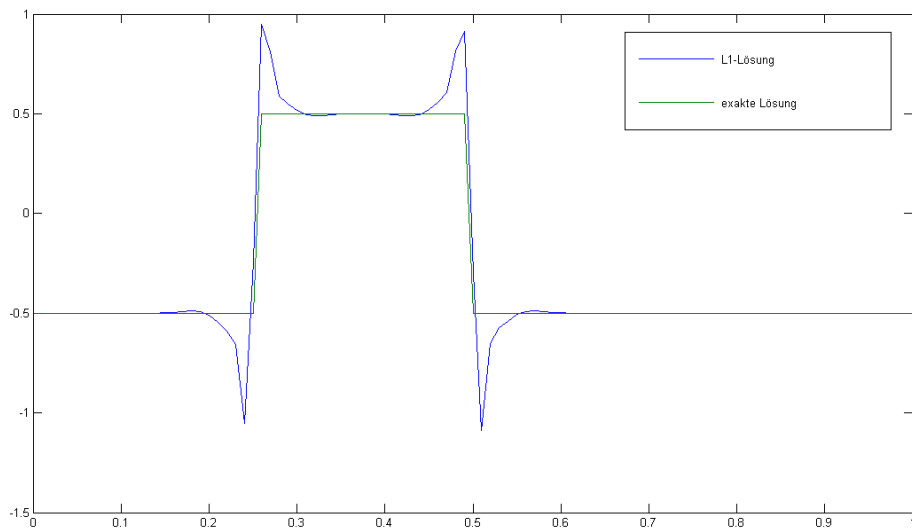


Fig. 5.4: exakten Lösung und Lösung der L1-Regularisierung bei genauen Beobachtungen

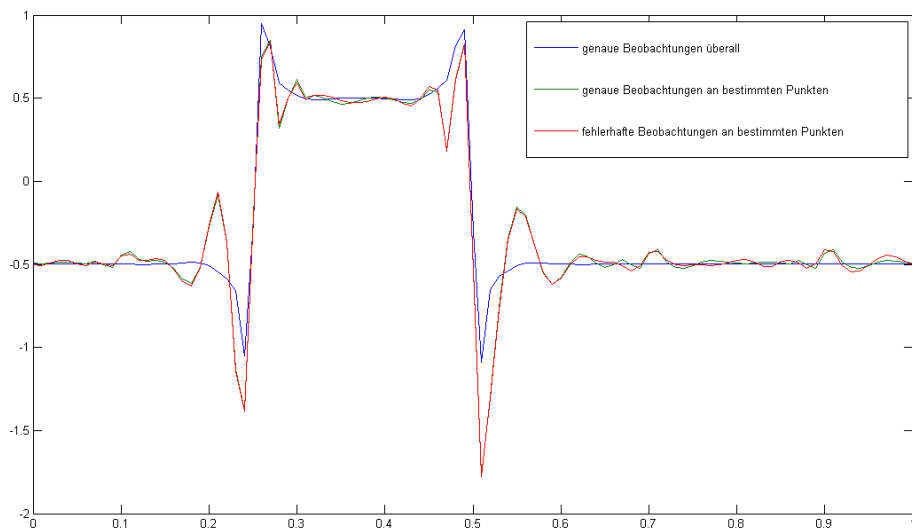


Fig. 5.5: Lösungen der L1-Regularisierung bei unterschiedlichen Beobachtungen

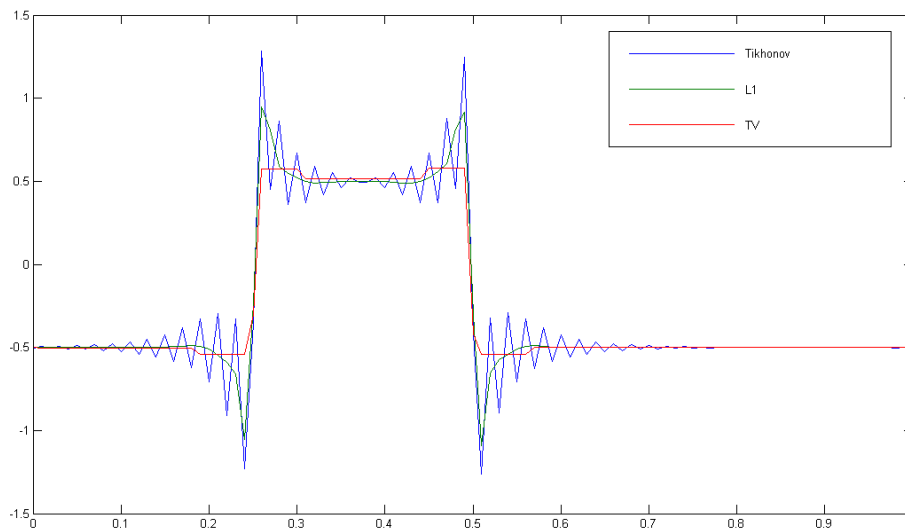


Fig. 5.6: Lösungen der verschiedenen Regularisierungsmethoden bei exakten Beobachtungen an jedem Ort und jedem Zeitpunkt

5.1.3 TV-Regularisierung

In diesem letzten Abschnitt betrachten wir nun die Ergebnisse, die mit der TV-Regularisierung erzielt werden können. Wie wir sehen werden, ist diese für unseren Fall die beste Methode.

Betrachten wir zunächst den ersten Fall, dann sehen wir in Abbildung 5.6, dass wir schon eine fast perfekte Lösung gefunden haben. Lediglich in der Nähe der Sprungstellen ist die Lösung ein wenig verschoben. Es treten aber keine Schwingungen oder andere Schwankungen mehr auf, wie bei den anderen Regularisierungen. Weiter ist die auftretende Abweichung nicht so stark, wie die Ausschläge der anderen beiden Methoden. Dies spiegelt sich auch in Tabelle 5.1 wieder, wo der Fehler noch einmal deutlich verkleinert werden konnte.

Verringern wir die Anzahl unserer Beobachtungen, so bekommen wir eine nahezu perfekte Lösung (Abbildung 5.7). Der Abstand zur richtigen Lösung ist nur minimal und die Funktion ist bis auf ihre beiden Unstetigkeitsstellen auch überall konstant, so wie es die richtige Lösung ist. Dies zeigt, dass die TV-Regularisierung es unter diesen Umständen schafft, auf Beobachtungsdaten zu verzichten und trotzdem nichts an Qualität der Lösung verliert. In diesem Fall verbessert es sogar die Lösung, was aber nur auf die Einfachheit des Problems zurückzuführen ist.

Auch wenn wir verrauschte Beobachtungsdaten betrachten, ist die Lösung immer noch sehr gut, wie man in Abbildung 5.8 sieht. Der Fehler ist hier nur minimal

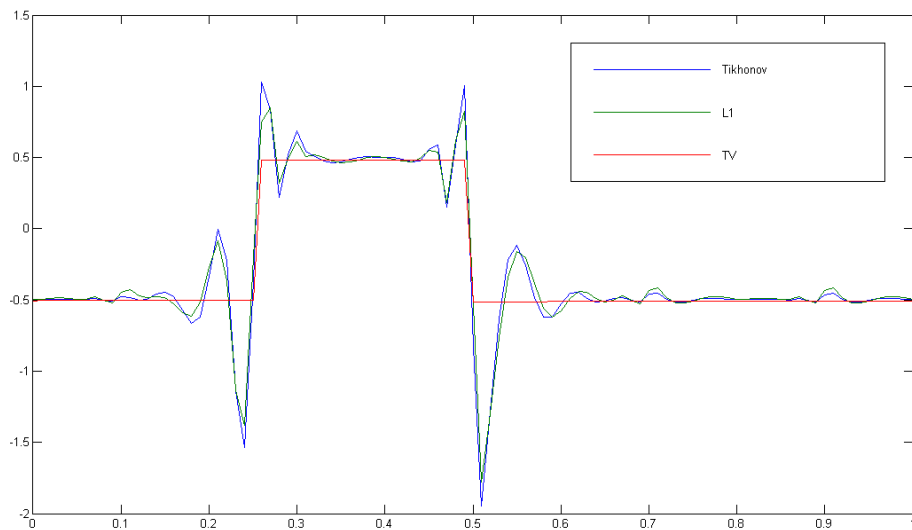


Fig. 5.7: Lösungen der verschiedenen Regularisierungsmethoden bei exakten Beobachtungen an jedem 20. Ort und jedem 2. Zeitpunkt

größer.

Im Vergleich zur L1-Regularisierung benötigt die hier implementierte TV-Regularisierung weniger Rechenzeit, wie man aus Tabelle 5.2 ablesen kann. Nur die Tikhonov-Regularisierung ist schneller.

Insgesamt kann man also den Schluss ziehen, dass die TV-Regularisierung in unserem Fall die numerische Methode ist, die der Lösung am nächsten kommt. Dabei benötigt sie aber mehr Rechenaufwand, der in der Praxis noch sehr viel größer sein wird, als in unserem Beispiel. Die Tikhonov-Regularisierung ist hingegen wesentlich schneller. Dies kann aber nur auf Kosten der Exaktheit der Lösung erreicht werden. Welche Methode man wählen sollte, hängt daher zum einen von der Größe des Modells ab. Zum anderen ist die Rechnerkapazität und die gewünschte Genauigkeit der Lösung entscheidend. Wir verweisen hier darauf, dass es auch noch andere Implementationen von L1- und TV-Regularisierungen gibt (siehe [YOGD08]), die unter Umständen noch schnellere oder bessere Ergebnisse liefern.

5.2 Preismodell

Wir wollen nun das Konzept der 4DVAR auf unser Preismodell anwenden. Die DGL des Preismodells ist nach Kapitel 4.3

$$g_t(y, t) - g_{yy}(y, t) + g_y(0, t)c(y) - \dot{p}(t)g_y(y, t) = 0 \quad (5.13)$$

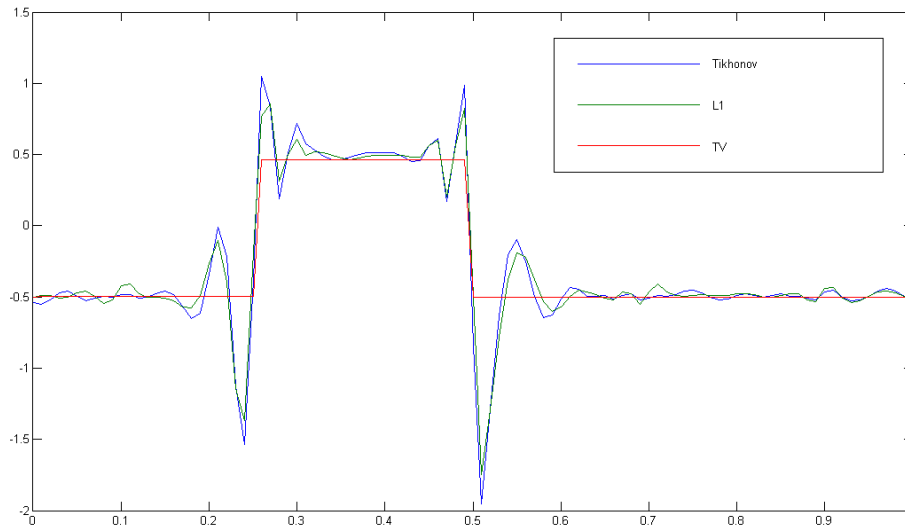


Fig. 5.8: Lösungen der verschiedenen Regularisierungsmethoden bei fehlerhaften Beobachtungen an jedem 20. Ort und jedem 2. Zeitpunkt

mit der Randbedingung

$$g(0, t) = 0. \quad (5.14)$$

Wir werden nun davon ausgehen, dass wir $p(t)$ und $g_y(0, t)$ beobachten können. Die Beobachtungen nennen wir p^b für den Preis bzw. b für $g_y(0, t)$. Mit diesen wollen wir den Anfangszustand $g(y, 0)$ berechnen.

Da die Beobachtungen fehlerhaft sein können, werden wir den wahren Anfangszustand $g(y, 0)$, den richtigen Preis und die exakte Funktion $g_y(0, t)$ schätzen müssen. Hierfür werden wir ein Zielfunktional aufstellen, der alle folgenden Faktoren berücksichtigt.

Die Beobachtungen sollten nicht zu stark von den exakten Daten abweichen, am besten ist der Erwartungswert der Abweichung 0 und die Varianz sehr klein. Weiter müssen wir den Fehler in der DGL betrachten. Wählen wir $g(y, 0)$, $p(t)$ und $g_y(0, t)$, dann erhalten wir nach [Bur07] eine schwache Lösung $\bar{g}(y, t)$ von (5.13), (5.14) in $H^1(\mathbb{R})$. Das heißt es gilt für alle Testfunktionen $\phi \in H^1(\mathbb{R})$ und jedem Zeitpunkt $t \in (0, T]$

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\bar{g}_t(y, t) - \bar{g}_{yy}(y, t) + \bar{g}_y(0, t)c(y) - \dot{p}(t)\bar{g}_y(y, t))\phi(y)dy = 0.$$

Dies muss für die gemessenen Daten nicht gelten, d.h. wenn wir

$$u_{yy} = \bar{g}_t(y, t) - \bar{g}_{yy}(y, t) + b(t)c(y) - \dot{p}^b(t)\bar{g}_y(y, t)$$

definieren gilt nicht

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_{yy}\phi(y)dy = 0 \quad \forall \phi \in H^1(\mathbb{R}). \quad (5.15)$$

Aber (5.15) definiert einen Operator \mathcal{L} auf $H^{-1}(\mathbb{R})$, dem Dualraum von $H^1(\mathbb{R})$. Daher ist es sinnvoll diesen Operator bezüglich seiner Operatornorm $\|\cdot\|_{H^{-1}}$ zu minimieren. Die Dualnorm ist definiert als:

$$\|\mathcal{L}\|_{H^{-1}} = \sup\{\mathcal{L}(\phi) | \phi \in H^1(\mathbb{R}), \|\phi\|_{H^1} \leq 1\}.$$

Anstatt $\|\mathcal{L}\|_{H^{-1}}$ zu minimieren, können wir im eindimensionalen Fall auch $\|u_y\|_{L^2}$ bzw. $\|u\|_{H^1}$ minimieren. Wir werden für unser Funktional die Minimierung bezüglich der L^2 -Norm vorziehen. Wir bekommen somit folgendes Zielfunktional

$$\begin{aligned} \min_{g(y,0), g_y(0,t), p(t)} & \lambda \int_0^T (g_y(0,t) - b(t))^2 dt + \mu \int_0^T (p(t) - p^b(t))^2 dt \\ & + \nu \int_0^T \int_{-\infty}^{\infty} (u_y(y,t))^2 dy dt + \int_{-\infty}^{\infty} (\partial_y g(y,0))^2 dy. \end{aligned}$$

Dabei ist der letzte Term der Regularisierungsterm (in diesem Fall TV-Regularisierung). Die Parameter λ, μ, ν gewichten die einzelnen Terme und stammen unter anderem aus der Varianz der Fehlerabweichung.

Um das Zielfunktional nun in ein 4DVAR-Problem (2.24) zu formulieren, werden wir es diskretisieren. Wir definieren dazu

$$p^k := p(k\Delta t), \quad g_y^k := g_y(0, k\Delta t), \quad u_{yy}^{k,l} = u_{yy}(l\Delta y, k\Delta t),$$

mit $k \in \{0, 1, \dots, N\}$ und $l \in \{-M, \dots, M\}$. Definieren wir weiter

$$\bar{p} := \begin{pmatrix} p^0 \\ \vdots \\ p^N \end{pmatrix}, \quad \bar{g}_y := \begin{pmatrix} g_y^0 \\ \vdots \\ g_y^N \end{pmatrix}, \quad u_{yy}^k := \begin{pmatrix} u_{yy}^{k,-M} \\ \vdots \\ u_{yy}^{k,M} \end{pmatrix},$$

dann erhalten wir mit

$$z_k := \begin{pmatrix} p^b(k\Delta t) \\ b(k\Delta t) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad x_k := \begin{pmatrix} \bar{p} \\ \bar{g}_y \\ u_{yy}^k \end{pmatrix}, \quad R^{-1} := \begin{pmatrix} \lambda & 0 & 0 \\ 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & \nu \end{pmatrix}$$

die 4DVAR-Gleichung

$$\sum_{k=0}^N (z_k - H_k(x^k))^T R^{-1} (z_k - H(x^k))$$

mit

$$x_{k+1} = \mathcal{M}(x_k).$$

Hierbei ist $\mathcal{M} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & P \end{pmatrix}$, wobei P wie im vorigen Beispiel aus Differenzenquotienten konstruiert wird. Weiter ist

$$H_k = \begin{pmatrix} e_k^T \\ e_k^T \\ B \end{pmatrix},$$

wobei e_k der k -te Einheitsvektor ist. Mit der Matrix B wird die diskretisierte Aufleitung von $u_t t$ berechnet. Für die Definition dieser Matrix können wir numerische Integrationsmethoden, wie z.B. die Simpson-Regel (siehe [FH07]) benutzen.

Wir haben jetzt die 4DVAR-Formulierung des Preismodells hergeleitet. In einer weiteren wissenschaftlichen Arbeit kann man nun dieses Problem bei gegebenen Beobachtungen mit den verschiedenen Regularisierungsmethoden, die hier vorgestellt wurden, ausführen.

6. FAZIT

Im ersten Kapitel haben wir verschiedene Datenassimilationsmethoden kennengelernt. Die letzte und wichtigste, die wir betrachtet haben, war die vierdimensionale Datenassimilation. Diese wird bei allen großen Wetterdiensten wie z.B. dem DWD (Deutscher Wetterdienst) angewendet. Die Lösung der 4DVAR haben wir mit Regularisierungsmethoden, die wir in Kapitel 3 vorgestellt haben, berechnet. Dies haben wir in Kapitel 5.1 auf ein Beispiel der Wettervorhersage angewendet. Wir haben gesehen, dass bei diesem Beispiel die TV-Regularisierung das beste Ergebnis liefert. Der Nachteil war die längere Berechnungszeit gegenüber den anderen Verfahren. Da das Beispiel sehr einfach gehalten war und wenige Daten benötigte, stellte das hier zwar kein Problem dar, aber bei Anwendungen für realitätsnahe Wettervorhersagen kann dies zu Komplikationen führen. In einer weiteren Arbeit könnte man daher schnellere Verfahren für die TV-Regularisierung herleiten oder aber exaktere Verfahren für die L1- bzw. Tikhonov-Regularisierung berechnen.

In Kapitel 4 haben wir ein Preismodell vorgestellt, welches wir in Kapitel 5.2 in ein 4DVAR-Problem umformuliert haben. Die numerische Realisierung dieses Problems, bei gegebenen Beobachtungen könnte man in einer weiteren Arbeit durchführen und auch hier wieder testen, welche Methode für dieses Problem optimal ist.

ANHANG

A. GRADIENT UND HESSEMATRIX

Satz A.1. Sei $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ eine zweimal stetig differenzierbare Funktion, und $A \in \mathbb{R}^n$ eine symmetrische, positiv definite Funktion. Dann gilt für $g(x) := \frac{1}{2}f(x)^T Af(x)$:

$$\nabla g(x) = F^T(x)Af(x) \quad (\text{A.1})$$

$$\nabla^2 g(x) = F^T(x)AF(x) + C(x) \quad (\text{A.2})$$

mit $C_{k,l}(x) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n A_{i,j} f_j(x) \frac{\partial^2 f_i(x)}{\partial x_k \partial x_l}$ und F der Jacobi-Matrix von f .

Beweis. Es gilt

$$g(x) = \frac{1}{2}f(x)^T Af(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n A_{i,j} f_i(x) f_j(x).$$

Weiter gilt auf Grund der Symmetrie von A für jedes $k \in \{1, \dots, n\}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial g}{\partial x_k}(x) &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n A_{i,j} f_j(x) \frac{\partial f_i(x)}{\partial x_k} \\ &= \left(\frac{\partial f_1(x)}{\partial x_k}, \dots, \frac{\partial f_n(x)}{\partial x_k} \right) Af(x). \end{aligned}$$

und damit ist (A.1) gezeigt. Für die zweiten Ableitungen gilt für $k, l \in \{1, \dots, n\}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 g}{\partial x_k \partial x_l} &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n A_{i,j} \frac{\partial f_j(x)}{\partial x_l} \frac{\partial f_i(x)}{\partial x_k} + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n A_{i,j} f_j(x) \frac{\partial^2 f_i(x)}{\partial x_k \partial x_l} \\ &= \left(\frac{\partial f_1(x)}{\partial x_k}, \dots, \frac{\partial f_n(x)}{\partial x_k} \right) A \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_l} \\ \vdots \\ \frac{\partial f_n(x)}{\partial x_l} \end{pmatrix} + C_{k,l}(x) \end{aligned}$$

Dies ergibt dann die Gleichung (A.2) □

B. FENCHELS DUALITÄTSTHEOREM

Definition B.1. Sei X ein reeller normierter Raum und sei X^* dessen Dualraum. Weiter sei

$$\langle \cdot, \cdot \rangle : X^* \times X \rightarrow \mathbb{R}$$

eine Bilinearform. Für ein Funktional $f : X \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ ist die **Legendre-Fenchel-Transformation** oder auch **konvex Konjugierte** definiert durch

$$\begin{aligned} f^* : X^* &\rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\} \\ x^* &\mapsto \sup\{\langle x^*, x \rangle - f(x) \mid x \in X\}. \end{aligned}$$

Definition B.2. Sei X ein reeller normierter Raum und sei X^* dessen Dualraum. Weiter sei

$$\langle \cdot, \cdot \rangle : X^* \times X \rightarrow \mathbb{R}$$

eine Bilinearform. Für ein Funktional $g : X \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ ist die **konkav Konjugierte** definiert durch

$$\begin{aligned} g_* : X^* &\rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\} \\ x^* &\mapsto \inf\{\langle x^*, x \rangle - g(x) \mid x \in X\}. \end{aligned}$$

Theorem B.1. Sei $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ eine konvexe Funktion die an mindestens einem Punkt endlich ist. Weiter sei $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ eine konkave Funktion die an mindestens einem Punkt endlich ist. Dann gilt

$$\min_x (f(x) - g(x)) = \max_p (g_*(p) - f^*(p)),$$

wobei f^* die konvex Konjugierte von f und g_* die konkav Konjugierte von g ist.

C. HERMITISCHE POLYNOME UND FUNKTIONEN

Definition C.1. Sei $n \in \mathbb{N}$ beliebig. Dann ist

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$$

das *n-te Hermitsche Polynom*.

Definition C.2. Sei $n \in \mathbb{N}$ beliebig und $H_n(x)$ das *n-te Hermitsche Polynom*. Dann ist

$$\Psi_n(x) = (2^n n! \sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x)$$

die *n-te Hermitsche Funktion*.

Satz C.1. Die Hermitschen Funktionen bilden eine Orthonormalbasis des $L^2(\mathbb{R})$

ABBILDUNGSVERZEICHNIS

2.1	Überblick über die unterschiedlichen Modelle aus [LLD06]	5
5.1	exakte Lösung und die Lösung der Tikhonov-Regularisierung bei genauen Beobachtungen	53
5.2	Lösungen der Tikhonov-Regularisierungen bei unterschiedlichen Beobachtungen	54
5.3	Lösungen der Tikhonov-Regularisierung bei fehlerhaften Beobachtungen mit unterschiedlichen Standardabweichungen	55
5.4	exakten Lösung und Lösung der L1-Regularisierung bei genauen Beobachtungen	56
5.5	Lösungen der L1-Regularisierung bei unterschiedlichen Beobachtungen	56
5.6	Lösungen der verschiedenen Regularisierungsmethoden bei exakten Beobachtungen an jedem Ort und jedem Zeitpunkt	57
5.7	Lösungen der verschiedenen Regularisierungsmethoden bei exakten Beobachtungen an jedem 20. Ort und jedem 2. Zeitpunkt	58
5.8	Lösungen der verschiedenen Regularisierungsmethoden bei fehlerhaften Beobachtungen an jedem 20. Ort und jedem 2. Zeitpunkt	59

TABELLENVERZEICHNIS

5.1	Aufsummierter Quadratischer Fehler	54
5.2	Berechnungszeit der Verfahren in Sekunden	55

LITERATURVERZEICHNIS

- [AHH58] K.J. Arrow, L. Hurwicz, and Uzawa H. *Studies in Linear and Non-Linear Programming*. Stanford University Press, 1958.
- [Ars66] J. Arsac. *Fourier Transforms and the Theory of Distributions*. Prentice-Hall, 1966.
- [Bur07] M. Burger. *Vorlesungsskript Numerik partieller Differentialgleichungen*. Westfälische Wilhelmsuniversität Münster, 2006/07.
- [Bur08] M. Burger. *Vorlesungsskript Partielle Differentialgleichungen*. Westfälische Wilhelmsuniversität Münster, 2008.
- [Cle07] J. Cleven. *Vorlesungsskript Analysis 2*. Fachhochschule Dortmund, <ftp://www.inf.fh-dortmund.de/pub/professors/cleven/kapitel11.pdf>, 2007.
- [FH07] Roland W. Freund and Ronald H. Hoppe. *Stoer/Bulirsch: Numerische Mathematik 1*. Springer, 10 edition, 2007.
- [FNB10] M.A. Freitag, N.K. Nichols, and C.J. Budd. Resolution of sharp fronts in the presence of model error in variational data assimilation. *Preprint*, 2010.
- [FNNB06] H. Fu, M.K. NG, M. Nikolova, and J.L. Barlow. Efficient minimization methods of mixed l2-l1 and l1-l1 norms for image restoration. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 27(6):1881–1902, 2006.
- [Gab83] D. Gabay. *Augmented Lagrangian methods: applications to the solution of boundary-value problems*, chapter Applications of the method of multipliers to variational inequalities. North-Holland, Amsterdam, 1983.
- [GM08] M.d.M. Gonzalez and Gualdani M.P. Asymptotics for a symmetric equation in price formation. *AMO*, 2008.
- [GM09] M. Gonzalez and Gualdani M.P. Asymptotics for a free-boundary problem in price formation. *Preprint*, 2009.

- [Grü05] Lars Grüne. *Vorlesungsskript Numerische Mathematik I*. Universität Bayreuth, 2004/05.
- [Hes69] M.R. Hestenes. Multiplier and gradient methods. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 4:303–320, 1969.
- [HYZ07] E.T. Hale, W. Yin, and Y. Zhang. A fixed-point continuation method for l_1 -regularized minimization with applications to compressed sensing. Technical report, CAAM Technical Report TR07-07, Rice University, 2007.
- [LL07] J.-M. Lasry and P.-L. Lions. Mean field games. *Jpn. J. Math.*, 2(1):229–260, 2007.
- [LLD06] John M. Lewis, S. Lakshmivarahan, and S.K. Dhall. *Dynamic Data Assimilation: A Least Squares Approach*. Cambridge University Press, 2006.
- [Mül08] J. Müller. *Parallel Total Variation Minimization, Diplomarbeit*, 2008.
- [MMPW09] P.A. Markowich, N. Matevosyan, J.-F. Pietschmann, and M.-T. Wolfram. On a parabolic free boundary equation modeling price formation. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 11(19):1929–1957, 2009.
- [Nat96] F. Natterer. *Vorlesungsskript Numerische Mathematik I*. Westfälische Wilhelmsuniversität Münster, 1995/96.
- [Pap65] Athanasios Papoulis. *Probability, Random Variables And Stochastic Processes*. Mcgraw-Hill, 1965.
- [PD92] D.F. Parrish and J.C. Derber. The national meteorological center’s spectral statistical-interpolation analysis system. *Monthly Weather Review*, 120:1747–1764, 1992.
- [Pow72] M.J.D. Powell. A method for nonlinear constraints in minimization problems. *Optimization*, 1972.
- [Roc56] R.T. Rockafellar. Augmented lagrangians and applications of the proximal point algorithm in convex programming. *Mathematics of operations research*, 82:421–439, 1956.
- [TA77] A.N. Tychonoff and Vasilij Ja. Arsenin. *Solutions of ill-posed problems*. Winston & Sons, 1977.

-
- [YOGD08] W. Yin, S. Osher, D. Goldfarb, and J. Darbon. Bregman iterative algorithms for l_1 -minimization with applications to compressed sensing. *SIAM J. Imaging Sci.*, 1:143–168, 2008.
- [ZBO09] X. Zhang, M. Burger, and S. Osher. A unified primal-dual algorithm framework based on bregman iteration. *UCLA CAM-Report*, 09-99, 2009.